

1. Описание функциональных характеристик

1.1 Назначение программы

Код КУПОЛ-БР предназначен для расчета параметров среды и моделирования поведения продуктов деления в объемах помещений АЭС с РУ БР при различных условиях эксплуатации.

1.2 Постановка задачи

В коде КУПОЛ-БР рассчитываются следующие основные величины:

- Изменение во времени температуры и давления газа в помещениях АЭС с РУ БР.
- Нестационарное распределение температуры в плоских, цилиндрических и сферических стенах и оборудовании.
- Временные зависимости плотностей (концентраций) компонент (азот, кислород, пар, водород, окись углерода, углекислый газ, гелий, аргон и произвольный инертный газ) в помещениях АЭС с РУ БР.
- Временные зависимости счетных концентраций, масс продуктов деления в газовой и аэрозольной формах, включая аэрозольные соединения натрия, в помещениях АЭС с РУ БР.
- Изменение влажности в помещениях.
- Интенсивность конденсации пара на поверхностях стен и в объеме помещений.
- Параметры режимов горения натрия.

При расчете учитываются эффекты нестационарного теплопереноса газочастиц в помещениях АЭС с РУ БР с учетом влияния естественной конвекции, объемной и поверхностной конденсации пара в присутствии неконденсирующихся газов. Имитируется прямой нагрев стен и оборудования при осаждении продуктов деления на их поверхности.

Область применения кода КУПОЛ-БР по моделируемым режимам включает в себя режимы нормальной эксплуатации, нарушения нормальных условий эксплуатации, проектные аварии и запроектные аварии, включая тяжелые.

Ограничения, накладываемые на область применения программы I Применение кода КУПОЛ-БР ограничено областью термодинамических параметров атмосферы в объеме помещений при проектных и запроектных авариях на

АЭС с реакторами БР;

II Требуется задание следующих граничных условий:

- расход и энтальпия (или температура) натрия, пара, азота, кислорода, водорода, окиси углерода, углекислого газа, гелия, аргона и произвольного инертного газа, поступающих в объем помещений АЭС;

- расход, компонентный и фракционный состав аэрозолей.

Допустимые значения параметров:

- давление от 0.07 до 0.5 МПа;
- температура газа от 274 до 1200 К;
- температура бетонных стен до 400 К.

1.3 Описание математических моделей

1.3.1 Математическая модель процессов тепломассопереноса

Код КУПОЛ-БР включает в себя модель с сосредоточенными параметрами, в которой объем представляется системой связанных боксов, в каждом из которых термодинамические параметры выровнены. Через связи боксов осуществляется перенос газочапельной смеси и теплоносителя. Между собой боксы могут быть разграничены стенами, оборудование внутри боксов моделируется плоскими, цилиндрическими или сферическими стенами.

Система уравнений переноса получается из классических законов сохранения для постановки задачи в сосредоточенных параметрах. Система уравнений переноса в сокращенном виде и без подробных комментариев представлена ниже. Подробное описание можно найти в [1, 2].

Уравнение движения

Для двух смежных боксов, соединенных связью j , уравнение движения приводится к следующему виду

$$\frac{dw^j}{dz} = \frac{1}{L} \left(w^j U_j - 1 \right) \frac{P_{xc} + \alpha F}{P_{iM}} \quad (1)$$

где

w^j - скорость смеси v_j -й связи, м/с; p_m -

плотность смеси, кг/м³ ;

ΔP - перепад давления между боксами n -й связи, Па;

ΔP_{NC} - перепад давления за счет естественной конвекции на j -й связи, Па;

L - характерное расстояние между боксами (длина связи j), м; z - время, с;

ξ^j - коэффициент гидравлического сопротивления в j -й связи.

Перепад гидростатического давления столба газа на уровне связи Z при высоте бокса H^{box}

записывается как

где

$$\begin{aligned}
 \Delta P_{NC} = & g \rho_m (H^{box} - \Gamma) \left[\rho_g^a ((H^{box})^2 - \Gamma^2) - \rho_g^b ((H^{box})^3 - \Gamma^3) \right] \\
 & - g \rho_m (H^{box} - \Gamma) \left[j ((H^{box})^2 - \Gamma^2) - i ((H^{box})^3 - \Gamma^3) \right]
 \end{aligned} \quad (2)$$

Γ - номер бокса, в который входит связь; i - номер бокса, из

которого выходит связь,

Z - вертикальная координата, направленная вверх, м;

H^{box} - высота бокса, м;

$\rho_m = \rho_g^o + \rho_D$ - плотность газок капельной смеси, кг/м³;

$\rho_D = const$ - плотность капель, кг/м ; ρ_g^o - плотность газа при

$Z = 0$, кг/м³; $a = M_g g / (R_g T)$

M_g - молярная масса газа, кг/моль; g - ускорение силы

тяжести, м/с²;

R_g - универсальная газовая постоянная, Дж/(моль К);

T - температура газа в боксе, К.

Уравнение переноса компонентов

Для каждой k -й компоненты газовой смеси (пар, кислород, азот, водород, окись углерода, углекислый газ, гелий, аргон, произвольный инертный газ, водность) в i -ом боксе записывается уравнение переноса

(3)

$$V \cdot \frac{dP^j}{dt} = \rho^j U^j S^j + G_k - J_{ik}^*$$

где суммирование по j проводится по всем связям бокса;

ρ^j - плотность компоненты в j -й связи, т.е. плотность в том боксе, из которого поступает смесь, кг/м³;

V - объем i -го бокса, м³;

G_k - внешний источник компоненты k газокапельной смеси в i -ый бокс, кг/с;

J_{ik}^* - источник компоненты k газокапельной смеси в i -ом боксе за счет процесса l , кг/с;

U^j - скорость смеси в j -й связи, м/с;

S^j - сечение j -й связи, м².

Первое слагаемое правой части уравнения (3) описывает конвективный перенос k -ой компоненты газокапельной смеси, второе - источник k -ой компоненты, третье - сток k -ой компоненты.

Уравнение для давления газа

Уравнение для давления газа в боксах записывается в виде (опуская индекс бокса) где

$$V \frac{dP}{dt} = \rho U S + G_k - J_{ik}^* \quad (4)$$

V - объем бокса, м³,

P - давление газа, Па;

T - температура газа, К;

R - универсальная газовая постоянная, Дж/(моль К);

M - молекулярная масса газа, кг/моль;

M_k - молекулярная масса компоненты k , кг/моль;

G_k - внешний источник компоненты k газокапельной смеси, кг/с;

J_{ik}^* - источник компоненты газокапельной смеси за счет процесса l , кг/с;

ρ^j - плотность газовой смеси, кг/м³;

U^j - скорость смеси в j -й связи, м/с;

S - сечение j -й связи, м²; t - время, с;

k - индекс компоненты газа.

Для учета зависимости давления от температуры производная по времени выражается как

$$\frac{d\rho^j}{dt} = \rho^j \left(\frac{1}{T} \frac{dT}{dt} - \frac{1}{P} \frac{dP}{dt} \right)$$

Уравнение энергии Для каждого бокса

$$\rho^j C_p U^j S (T - T_{j0}) + \rho^j (h_{j0} - h_{j1}) U^j S = (G, C_p) (T - T^0) - G D C_D - a_s F_s (T - (T_w)_s) + Q + V \frac{dP}{dt} \quad (5)$$

где

j_0 - индекс относится только к тем связям, через которые смесь втекает в рассматриваемый бокс;

0 - индекс течи;

V - объем бокса, м³;

P_0 - давление газа, Па;

Q - задаваемая мощность тепловыделения в боксе, Вт; a_s - коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К);

F_s - площадь поверхности тепловой структуры s , м²;

T - температура, К;

T_{j0} - температура газового источника, К;

$(T_w)_s$ - температура тепловой структуры s , К;

$(h_v - h_D) = r$ - теплота фазового перехода (скрытая теплота парообразования),

Дж/кг;

h - удельная энтальпия пара, Дж/кг;

h_D - удельная энтальпия капель тумана, Дж/кг;

C_m - удельная теплоемкость газок капельной смеси, Дж/(кг К);

C - удельная теплоемкость компоненты l (пар, кислород, азот, водород, окись углерода, углекислый газ, гелий, аргон, произвольный инертный газ, натрий), Дж/(кг К);

- удельная теплоемкость капель, Дж/(кг К);

G_D - внешний источник капель тумана, кг/с;

G , - внешний источник компоненты газок капельной смеси, массовый расход, кг/с; ρ_m - плотность смеси, кг/м ;

J' - сток пара в объеме бокса за счет конденсации на каплях, кг/с;

U - скорость смеси, м/с; s_j

- сечение связи , м²;

t - время, с.

Динамика натрия

В настоящий момент в коде КУПОЛ-БР принята следующая модель смешения и переноса натрия, включая химическое взаимодействие:

- температура и расход натрия, истекающего из разрыва контура, рассчитывается из условий выхода массы и энергии натрия из течи;
- в исходных данных задается направленная цепочка боксов, по которым перемещается натрий;
- в исходных данных задается временной период (расчетный шаг) обмена натрием между боксами;
- смешение натрия от разных источников в боксе идеальное.

Уравнение изменения энтальпии натрия в i -ом боксе имеет вид:
где

$$m_{Na} \frac{dT_{Na}}{dt} = G_{Na} \cdot h_{Na} + Q_{Na} + z \cdot J - \sum_{j} r_j \cdot C_{Na} \cdot (T_{Na} - T_{a_j}) \quad (6)$$

m'_{Na} ■ - масса натрия, кг;

C_{Na} - теплоемкость натрия, Дж/(кг К);

T' - температура натрия, К;

Q_{Na}^l - удельное тепловыделение при химической реакции l с натрием, Дж/кг;

G_{Na}^l - массовый источник от химической реакции l с натрием, кг/с;

J_{Na}^l - массовый поток натрия, кг/с;

G_{Na} - внешний источник натрия, кг/с;

ε_{Na} - энтальпия натрия от внешнего источника, Дж/кг;

a'_{Na} - коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²К);

S - поверхность лужи, м²;

T - температура газа, К.

Теплопроводность многослойной стенки

Модель теплообмена со стенами и оборудованием включает в себя одномерное уравнение теплопроводности для стен, гипотезу аналогии тепло-массообмена для расчета поверхностной конденсации пара и эмпирические зависимости коэффициентов теплоотдачи [1]. Для каждой многослойной стенки нестационарное уравнение энергии (в декартовой системе координат) записывается как

с граничными условиями

$$-\chi_w \frac{dT}{dx} = a^m (T - T^b) + q^b,$$

где

a - коэффициент теплоотдачи, Вт/(м К);

T - температура газа, К;

T^b - температура тепловой структуры, К;

a^b - удельный тепловой поток на поверхности тепловой структуры, Вт/м²; a^m - температуропроводность, м²/с

и условиями сшивки на границах слоев

$$-A' \frac{dT}{dx} = -\lambda \frac{dT}{dx} = \lambda \frac{dT}{dx} \quad (7)$$

где

A' - коэффициент теплопроводности тепловой структуры, Вт/(м К); T - температура тепловой структуры, К; x - координата, м; индекс b относится к границе стенки; индекс t - номер слоя. Подробно этот раздел изложен в [2].

1.3.2 Поверхностная конденсация пара

В модели конденсации пара из смеси на «холодной» стенке должен быть учтен эффект диффузионного сопротивления воздуха как неконденсирующегося газа [3]. Массовый поток пара на стенку в этих условиях равен

$$J_v^w = \frac{1 + P}{P_A} \frac{P^0 - P_v}{P^{\text{box}} - P_v} > 0 \quad P(P_v - P_l) \quad (7)$$

H_v и P_A - молярная масса пара и воздуха соответственно, кг/моль;

P - плотность водяного пара, кг/м³;

P^0 - парциальное давление пара, Па;

P^{box} - давление парогазовой смеси в боксе, Па; индекс «0» означает поверхность стенки.

$P = K_p Nu D_v / L$ - коэффициент массоотдачи, м/с; где

K_p - коэффициент неподобия, учитывающий эффекты, которые отсутствуют при теплоотдаче: капельная фаза; разное направление потоков газа и пленки и др., $K_p < 1$;

D_v - коэффициент диффузии пара в воздухе, м²/с;

L - характерный размер, м, который входит в зависимости и для теплоотдачи, и для массоотдачи;

$Nu = Nu f^n + f(Re_L; Ra_L)$ для разных геометрий стенок [3,4,5]; где $Re_z = \frac{UL}{\nu}$ - число Рейнольдса при обдувании стенок струями пара;

$Ra_L = g \frac{L Pr^s P_g}{\nu} -$ число Рэлея, характеризующее интенсивность естественной

конвекции;

s

3

p_v - плотность пара на линии насыщения при температуре бокса, кг/м³; p_g -

плотность газа в боксе, кг/м³.

1.3.3 Объемная конденсация пара

Конденсация пара на твердых частицах (ядрах конденсации) и каплях и образование тумана является сложным процессом и в полной форме сводится к задаче

определения динамики счетной концентрации капель $I \sim \frac{8NDL}{\nu \delta m}$ и среднего радиуса капли

$\frac{8rD}{\delta m}$ [6]. Задача усложняется при учете осаждения капель и их коагуляции [7].

Обычно вклад массовых и тепловых потоков от объемной конденсации пара в общий тепловой баланс невелик. Отношение поверхности всей капельной фазы

u

к

$$\frac{S_D^\Sigma}{S_{box}} \approx \frac{1}{6} \left(\frac{a}{r_D} \right) \left(\frac{\rho_D}{\rho_f} \right) = \frac{1}{6} \left(\frac{\rho_D}{\rho_f} \right)^{2/3} \sqrt[3]{N_D \frac{4}{3} \pi},$$

поверхности бокса S_{box} выражается геометрической формулой:

(8)

где

ρ_D - парциальная плотность капельной фазы, кг/м³; ρ_f -

плотность жидкости, кг/м³;

a - характерный размер поверхности бокса, м,

Математические модели (1) - (8) составляют замкнутую систему, которая полностью определена соответствующими начальными и граничными условиями и функциями источников и

СТОКОВ.

1.3.4 Физико-математическая модель горения натрия

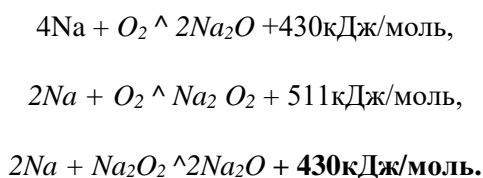
Физико-математическая модель горения натрия представлена моделью горения натрия в луже как наиболее вероятного механизма горения натрия при развитии аварии [8].

Тепло передаётся между поверхностью лужи, стенкой и средой путём излучения, конвекции и теплопроводности. Зона пламени моделируется плоской поверхностью, расположенной параллельно поверхности лужи на некоторой высоте S от неё и повторяющей форму лужи.

Приняты следующие допущения:

- Площадь поверхности лужи постоянна.
- Испарившийся натрий, попав в зону пламени, сгорает мгновенно.
- От лужи натрия на полу практически нет отвода тепла к бетону из-за зазора между бетоном и облицовкой.
- Всё поступающее к луже тепло расходуется на испарение натрия.

Взаимодействие натрия и кислорода воздуха описывается химическими реакциями

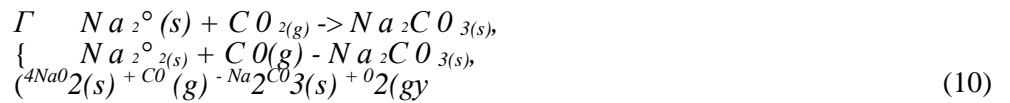
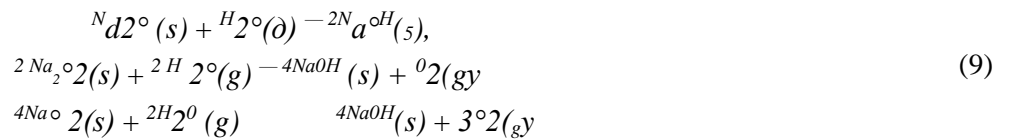


Принимается, что вся образующаяся окись уходит из зоны пламени в газовую фазу. Первичный аэрозоль окиси натрия образуется вне зоны пламени и затем равномерно распределяется в воздухе. Осаждение аэрозоля на поверхность горячей лужи не учитывается.

Подробно модель горения лужи натрия описана в [9].

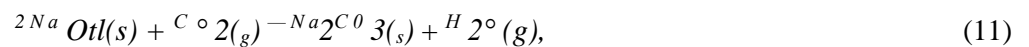
1.3.5 Физико-химическая модель взаимодействия продуктов горения натрия с компонентами атмосферы

При взаимодействии оксидов натрия с компонентами атмосферы, такими как водяной пар (H_2O), углекислый газ (CO_2) и оксид углерода (CO), возможны следующие твердофазные реакции с выделением тепла, в результате которых образуются аэрозоли в виде гидроксида натрия () и карбонатов натрия ():



где (^)-твердая фаза, (∂) - газовая фаза.

При взаимодействии гидроксидов натрия с углекислым газом образуются карбонаты натрия:



где (^)-твердая фаза, (∂) - газовая фаза.

Тепловой эффект реакций (9-11) приведен в отчете [9]

С точки зрения химической термодинамики эффект гигроскопичности состоит в снижении равновесного значения давления насыщенных паров воды в присутствии гигроскопичных веществ по сравнению с соответствующей величиной для чистой жидкости.

Для количественного описания гигроскопичности натриевых аэрозолей используется функция влияния:

$$\Phi = P_e/P_s,$$

где

P_e - давление насыщенных паров воды в присутствии гигроскопичных частиц;

P_s - равновесное давление насыщенного пара.

Более подробно модель химических превращений продуктов горения натрия и влияние гигроскопичности описаны в [9].

1.3.6 Математическая модель переноса и осаждения аэрозолей

1.3.6.1 Уравнение переноса для функции распределения частиц Для описания переноса аэрозольных частиц по помещениям АЭС с РУ БН используется модель в сосредоточенных параметрах, основу которой составляют

нелинейные дифференциальные уравнения. Неизвестными функциями времени являются счётная концентрация частиц (число частиц в единице объема), масса и активность.

Для моделирования переноса аэрозольных частиц по помещениям АЭС используется кинетическое уравнение для функции распределения частиц по массам, которое записывается для каждого k -го контрольного объема

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{j \neq k} S_{jk} f_j - \sum_{j \neq k} S_{kj} f_k + \sum_{i \neq k} J_{ik} f_i - \sum_{i \neq k} J_{ki} f_k \right) - (f_k) \frac{dm}{dt} = \text{Sed}^{(k)} + \text{tr}^{(k)} \quad (12)$$

где

f_k - функция распределения частиц, $\text{кг}^{-1}\text{м}^{-3}$;

K_k - объем бокса, м^3 ;

i, l - номера связанных боксов;

S_{mk}, S_{lk} - площадь сечения связи боксов m и k ; l и k , м^2 ;

J_{ik}, J_{kl} - скорость обмена по связям бокса, $\text{м}/\text{с}$;

t - время, с ;

f_{0k} - функция распределения источника частиц, $\text{кг}^{-1}\text{м}^{-3}$;

t_0 - время действия источника, с ;

m - средняя масса частиц, кг ;

d .

— $m \frac{dj_k}{dm}$ - выражение описывает конденсацию пара на частицах массы m ;

$I_{\text{Sed}}(f_k), I_T(f_k), I_{\text{tr}}(f_k)$ - осаждение частиц при седиментации, термофорезе и турбулентно-диффузионном выносе, соответственно.

Компоненты $I(f), I(f), I(f)$, описывают механизмы осаждения аэрозолей на поверхностях и стенках помещений. Осаждение описывается общей формулой:

$$I_a C(f) = V J f_k,$$

где

V_a - скорость осаждения процесса a , $\text{м}/\text{с}$;

, - характерный размер (отношение площади поверхности осаждения к объему помещения), м⁻¹.

Выражения для скоростей осаждения частиц при седиментации, термофорезе и турбулентно-диффузионном выносе были описаны ранее в [1].

Кинетическое уравнение для функции распределения частиц по размерам учитывает конденсацию пара на аэрозольных частицах и различные механизмы осаждения аэрозоля на поверхностях (гравитационное осаждение аэрозольных частиц, термофорез и турбулентно-диффузионный вынос).

Функция распределения частиц f в начальный момент времени задается в виде логнормального распределения с параметрами a и u где

$$fk = \frac{1}{a m} e^{-\frac{(\ln m - u)^2}{2a^2}} \quad (13)$$

$u = \ln m$, где m - средняя масса частицы, кг; $a = \ln a_g$, где a_g - стандартное геометрическое отклонение.

Счётная концентрация частиц $n_k(t)$ связана с функцией распределения как

$$n_k(t) = \int_0^{\infty} f_k(m^t) dm. \quad (14)$$

Более подробно модели переноса и осаждения аэрозольных частиц описаны в [1, 9].

1.4 Замыкающие соотношения

1.4.1 Коэффициенты теплоотдачи к поверхностям стен и оборудования

При расчете коэффициентов теплоотдачи к поверхностям стен и оборудования используются эмпирические зависимости, описывающие различные процессы теплообмена.

Подробно материал о коэффициентах теплоотдачи представлен в [1].

1.4.2 Теплофизические и транспортные свойства натрия

Для расчета теплофизических и транспортных свойств натрия использованы данные [10].

Ниже перечислены свойства натрия, используемые в коде КУПОЛ-БР. Для размерностей величин используется международная система единиц СИ.

Обозначения свойств, используемых в данном разделе, приведены ниже:

T - абсолютная температура, К;

P - давление, Па;

h_l - энтальпия жидкого натрия, Дж/кг; h_g - энтальпия паров натрия, Дж/кг; h_{lg} - теплота парообразования, Дж/кг;

ρ_l - плотность жидкого натрия, кг/м³; ρ_g - плотность паров натрия, кг/м³;

С_{P,l} - теплоемкость жидкого натрия при постоянном давлении, Дж/(кг К);

С_{P,g} - теплоемкость паров натрия при постоянном давлении, Дж/(кг К);

X - теплопроводность жидкого натрия при постоянном давлении, Вт/(м К); α - поверхностное натяжение, Н/м.

Зависимость давления паров натрия на линии насыщения P_s от температуры описывается формулой (15) и таблицей 1:

$$\ln P_s = 11.9463 - 12633.73/T - 0.4672 \ln(T), \quad (15)$$

где P_s в МПа.

Пределы применимости формулы: T=400²2503 К.

Таблица 1 - Зависимость давления паров натрия от абсолютной температуры на линии насыщения [10]

T, К	P _s , МПа
373	(1.892E-11)
400	(1.802E-10)
500	(8.990E-08)
600	(5.568E-06)
700	(1.049E-04)
800	(9.407E-04)

Продолжение таблицы 1

T, К	P _s , МПа
900	(5.147E-03)
1000	1.995E-02
1100	6.016E-02
1200	0.1504
1300	0.3257
1400	0.6298
1500	1.1130

Примечание: цифра в скобках означает, что величины находятся вне диапазона экспериментальных данных.

В таблице 2 приведена погрешность расчета давления паров натрия на линии насыщения по формуле (15).

Таблица 2 - Оценка погрешности расчета давления паров натрия на линии насыщения при расчете по формуле (15)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
400-600	25 - 9
600-864	6 - 4
864-1500	3

Плотность жидкого натрия по [10]:

$$\begin{aligned}
 &P_i \\
 &= 219 + 275.32(1)
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Зависимость плотностей жидкого натрия и паров натрия на линии насыщения от температуры представлены в таблице 3. В таблице 4 приведена погрешность расчета плотности жидкого натрия на линии насыщения по формуле (16).

Таблица 4 - Оценка погрешности расчета плотности жидкого натрия на линии насыщения при расчете по формуле (16)		
Т, К	ρ_l , кг/м ³	ρ_g , кг/м ³
	919.	$1.24 \cdot 10^{-9}$
Диапазон температуры, К		Погрешность расчета, %
371<T<700		0.3
700<T<1400		0.4
1400<T<1500		2.7 - 14
1000	781.	$6.03 \cdot 10^{-2}$
1100	756.	0.168
1200	732.	0.394
1300	706.	0.805
1400	680.	1.48
1500	653.	2.50

Скрытая теплота парообразования натрия по [10] в диапазоне 371-1500 К

$$h_{lo} = 39.3.3.7(1) \quad 0.29302 \quad (17)$$

В таблице 5 приведены значения скрытой теплоты парообразования натрия на линии насыщения в зависимости от температуры, а в таблице 7 представлены погрешности расчета по формуле (17).

Таблица 5 - Скрытая теплота парообразования натрия на линии насыщения по формуле (17)

Т, К	h_{ig} , кДж/кг
371	4532.
400	4510.
500	4435.

Продолжение таблицы 5

T, K	h_{ig} , кДж/кг
600	4358.
700	4279.
800	4197.
900	4112.
1000	4024.
1100	3933.
1200	3838.
1300	3738.
1400	3633.
1500	3523.

Таблица 6 - Оценка погрешности расчета скрытой теплоты парообразования на линии насыщения при расчете по формуле (17)

Диапазон температуры, K	Погрешность расчета, %
371-1000	1
1400	2
1800	6.5

Уравнение Клапейрона-Клаузиуса для фазового перехода жидкость-пар записывается как

$$y' = \frac{h_{ig}}{T^2} \quad (18)$$

откуда получим формулу (19) для расчета плотности паров натрия:

$$h_{ig} = \frac{h_{ig}}{T^2} \quad (19)$$

где

y' - температурный коэффициент давления по (20), определяемый вдоль линии насыщения, Па/К;

h_{ig} - скрытая теплота парообразования по (17);

- плотность жидкого натрия по (16).

Температурный коэффициент давления получается дифференцированием уравнения (15) для давления на линии насыщения от температуры [10]

$$y' = (\xi) = \{ \cdot T2 + T \}^{exp} \{ a + T + c \ln(T) \} \quad (20)$$

где $a=11.9463$, $b=-12633.73$, $c=-0.4672$.

В таблице 7 показана погрешность расчета плотности паров натрия от абсолютной температуры на линии насыщения.

Таблица 7 - Оценка погрешности расчета плотности паров натрия на линии насыщения при расчете по формуле (19)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
371<T<400	25
400<T<800	9 - 4
800<T<1300	3
1300<T<1500	5 - 15

Энтальпия жидкого натрия рассчитывается по формуле $f = - 365.77 + 1.6582T - 4.2395$

$$10^{-4}T^2 + 1.4847 \cdot 10^{-7}T^3 + 2992.6 T^{-2}. \quad (21)$$

Формула справедлива для диапазона 371<T<2000 К.

Энтальпия паров натрия получается добавлением теплоты парообразования, рассчитанной по (17), к энтальпии жидкости h_i согласно (21).

$$h_g = h_i + h_{ig}. \quad (22)$$

Зависимость удельной энтальпии жидкого натрия h_i и паров натрия h_g на линии насыщения от абсолютной температуры по [10] представлена в таблице 8. Погрешности расчета удельной энтальпии жидкого натрия и паров натрия на линии насыщения приведены в таблицах 9 и 10 соответственно.

Таблица 8 - Зависимость удельной энтальпии жидкого натрия и паров натрия на

линии насыщения от абсолютной температуры Т по [10]

Т, К	h_i , кДж/кг	h_g , кДж/кг
298.15	0	
371	206.7172	4738.468
400	246.6616	4757.054
500	381.8865	4817.341
600	513.5852	4871.974
700	642.4349	4921.435
800	769.2194	4966.283
900	894.7702	5007.09
1000	1019.943	5044.404
1100	1145.605	5078.731
1200	1272.632	5110.512
1300	1401.905	5140.101
1400	1534.307	5167.732
1500	1670.724	5193.473

Таблица 9 - Оценка погрешности расчета удельной энтальпии жидкого натрия при расчете по формуле (21)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
371<Т<1500	1

Таблица 10 - Оценка погрешности расчета удельной энтальпии паров натрия при расчете по формуле (22)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
371<Т<1500	1

Удельная теплоемкость жидкого натрия при постоянном давлении по [10] может быть определена через удельную теплоемкость вдоль линии насыщения и используя термодинамическое соотношение:

$$C_p = C(\gamma + \alpha C_p \gamma \alpha) \quad (23)$$

Температурный коэффициент давления рассчитывается по (20).

Удельная теплоемкость на линии насыщения (для кипящей жидкости и для сухого насыщенного пара) определяется как

$$C_{\sigma} = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{\sigma} - \left(\frac{1}{\rho} \right) \gamma_{\sigma},$$

где

рассчитывается по (20),

H - энтальпия, причем вдоль линии насыщения для жидкости $H = h_l$ по (21), а для пара $H = h_g$ по (22).

Аналогично для плотности $p = \rho_l$ по (16) для жидкости и $p = \rho_g$ по (19) для пара.

Коэффициент теплового расширения выражается

$$a_p = a_a + p_T \gamma_a,$$

где

P_m - коэффициент изотермической сжимаемости, Па^{-1} ;

- коэффициент теплового расширения, определяемый вдоль линии насыщения по формуле (24), K^{-1} .

Коэффициент изотермической сжимаемости определяется как

где

$$\beta_T = \left(\beta_S C_{\sigma} + \left(\frac{T}{\rho_l} \right) \alpha_{\sigma} (\alpha_{\sigma} + \beta_S \gamma_{\sigma}) \right) / \left(C_{\sigma} - \left(\frac{T}{\rho_l} \right) \gamma_{\sigma} (\alpha_{\sigma} + \beta_S \gamma_{\sigma}) \right)$$

$$\beta_S = \beta_{S,m} \left[\left(1 + \frac{\theta}{3.2682} \right) / (1 - \theta) \right],$$

P_s - коэффициент адиабатической сжимаемости

где $p_{sm} = 1.717 \times 10^4 \text{ МПа}^{-1}$ для точки плавления при $T_m = 371 \text{ К}$;

- безразмерная температура, определяемая как

$$T = \frac{(T_c - T_m) \Gamma}{T_c - T_m}$$

ν возрастает от 0 до 1 в диапазоне от точки плавления T_m натрия до температуры в критической точке $T_c=2503.7$ К.

Плотность паров натрия выражается

$$p = p_c \left(\frac{T}{T_c} \right)^h$$

где

$$f=275.32 \text{ кг/м}^3, g=511.58 \text{ кг/м}^3, h=0.5;$$

T -температура, К;

$p_c = 219$ кг/м плотность в критической точке. Производную p i вдоль линии насыщения получаем из (16)

$$-\left(\frac{\partial \rho_l}{\partial T}\right)_\sigma = \frac{f}{T_c} + h \frac{g}{T_c} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{h-1}.$$

Отсюда коэффициент теплового расширения вдоль линии насыщения

$$h - \text{IN}$$

(24)

Удельная теплоемкость жидкого натрия при постоянном давлении по [10]

$$C_{p,1} = +1.6582 - 8.4790 \cdot 10^{-4} T + 4.4541 \cdot 10^{-7} T^2 - 2992.6 T^{-2}.$$

(25)

Зависимость удельной теплоемкости жидкого натрия при постоянном давлении от температуры представлена в таблице 11 по данным из [10]. Оценка погрешности расчета удельной теплоемкости жидкого натрия приведена в таблице 12.

Таблица 11 - Зависимость удельной теплоемкости жидкого натрия на линии насыщения от абсолютной температуры по [10]

Т, К	Срд, кДж/кг К
371	1.383
400	1.372
500	1.334

Продолжение таблицы 11

Т, К	$C_{p,1}$, кДж/кг К
600	1.301
700	1.277
800	1.260
900	1.252
1000	1.252
1100	1.261
1200	1.279
1300	1.305
1400	1.340
1500	1.384

Таблица 12 - Оценка погрешности удельной теплоемкости жидкого натрия при расчете по (25)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
$371 < T < 1500$	0.3

Зависимость удельной теплоемкости паров натрия при постоянном давлении от температуры, рассчитанной вдоль линии насыщения для пара по (23), представлена в таблице 13. В таблице 14 представлена погрешность расчета удельной теплоемкости паров натрия при постоянном давлении.

Таблица 13 - Зависимость удельной теплоемкости $C_{p,g}$ паров натрия на линии насыщения от абсолютной температуры Т

Т, К	$C_{p,g}$, кДж/кг К
400	0.86
500	1.25
600	1.80
700	2.28
800	2.59
900	2.72
1000	2.70
1100	2.62
1200	2.51
1300	2.43
1400	2.39
1500	2.36

Таблица 14 - Оценка погрешности удельной теплоемкости паров натрия при постоянном давлении при расчете по (23)

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
371<T<500	50.
500<T<1000	20.
1000<T<1500	15.

Коэффициент теплопроводности жидкого натрия рассчитывается по формуле [10]:

$$\lambda = 124.67 - 0.11381 * T + 5.5226 \cdot 10^{-5} * T^2 - 1.1842 * 10^{-8} * T^3. \quad (26)$$

Пределы применимости формулы: T = 371,1500 К.

Зависимость удельной теплопроводности жидкого натрия от температуры по формуле (26) по данным [10] представлена в таблице 15. В таблице 16 представлена погрешность расчета удельной теплопроводности жидкого натрия.

Таблица 15 - Удельная теплопроводность жидкого натрия от температуры по [10]

T, К	λ , Вт/(м К)
371	89.44
400	87.22
500	80.09
600	73.71
700	68.00
800	62.90
900	58.34
1000	54.24
1100	50.54
1200	47.16
1300	44.03
1400	41.08
1500	38.25

Таблица 16 - Оценка погрешности удельной теплопроводности жидкого натрия

Диапазон температуры, К	Погрешность расчета, %
371<T<500	5
500<T<1000	12
1000<T<1500	15

Коэффициент поверхностного натяжения жидкого натрия рассчитывается по формуле [10]:
где a в мН/м.

$$a = 240.5 \left(\frac{T - 2503.7}{2503.7} \right)^{1.126} \quad (27)$$

Пределы применимости формулы: $T = 371,2503.7$ К.

Погрешность расчета в диапазоне 371 - 1500 К составляет ± 11 %.

Зависимость коэффициента поверхностного натяжения жидкого натрия от температуры по формуле (27) из [10] представлена в таблице 17.

Таблица 17 - Зависимость коэффициента поверхностного натяжения a жидкого натрия на линии насыщения от абсолютной температуры по данным [10]

T, К	a , мН/м
371	200.7642
400	197.693
500	187.1436
600	176.6605
700	166.2465
800	155.905
900	145.6398
1000	135.455
1100	125.3552
1200	115.3457
1300	105.4326
1400	95.62285
1500	85.92458

1.4.3 Свойства газов и газовой смеси

Условные обозначения, используемые в подразделе 1.4.3:

C_p - теплоемкость при постоянном давлении, Дж/(кг К);

C_v - теплоемкость при постоянном объеме, Дж/(кг К);

C_{rot} - вращательная составляющая теплоемкости, Дж/(кг К); $D_{j,m}$

- коэффициент диффузии i -го компонента в смеси, м²/с;

f_{ij} - параметр;

$G^0(T)$ - свободная энергия Гиббса в стандартных условиях, Дж;
 $H^0(0)$ - энтальпия соединения при 0 К, Дж; k - постоянная Больцмана, Дж/К; m - дипольный момент молекулы; n - счетная концентрация молекул, м⁻³;
 R_g - универсальная газовая постоянная, Дж/(моль К); r - расстояние между взаимодействующими молекулами, м;
 $S^0(0)$ - энтропия соединения в стандартных условиях, Дж/К;
 T - абсолютная температура, К;
 T - приведенная безразмерная температура; c_i - мольная доля i -го компонента;
 Z_{rot} - число столкновений, требуемых для релаксации вращательной составляющей внутренней энергии;
 $\Delta_f H'$ - значения энтальпий образования индивидуальных соединений, Дж/кг;
 δ - безразмерный параметр полярности;
 $\Phi^0(T)$ - приведенный потенциал Гиббса, Дж/(кг К);
 s - минимальная потенциальная энергия взаимодействующих молекул, Дж; σ - динамическая вязкость, мк П;
 λ - теплопроводность, Вт/м К;
 M - молекулярная масса, кг/моль;
 ρ - плотность, кг/м³;
 σ_s - диаметр твердой сферы, м;
 a - расстояние между взаимодействующими молекулами в положении минимальной потенциальной энергии (диаметр столкновения), м;
 $\phi(r)$ - потенциальная функция, Дж; c_{oi} - массовая доля;
 Q_D - интеграл столкновений для диффузии;
 Q_v - интеграл столкновений для вязкости.

1.4.3.1 Теплоемкость и энтальпия

Фундаментальные справочные издания по термодинамическим свойствам индивидуальных соединений [11] содержат в себе информацию о температурной

зависимости термодинамических функций всех соединений, представляющих интерес при изучении реакции горения водорода. В них приведены значения энтальпий образования индивидуальных соединений из простых веществ в стандартных условиях и коэффициенты аппроксимации температурной зависимости приведенного потенциала Гиббса, по которым рассчитываются любые термодинамические функции.

По определению

$$\Phi^{\circ}(m) = \frac{G^{\circ}(T) - H^{\circ}(0)}{T}, \quad (28)$$

$$G^{\circ}(T) = H^{\circ}(T) - TS^{\circ}(T) \text{ и } -S^{\circ}(T) = \int_0^T \frac{C_p^{\circ}(T)}{T} dT \quad (29)$$

$$C_p(T) = - \left(H^{\circ}(T) - H^{\circ}(0) \right)'. \quad (30)$$

Из (29), (30) следует, что

$$H^{\circ}(T) - H^{\circ}(0) = T^2 - \int_0^T \Phi^{\circ}(T) dT, \quad (31)$$

$$C(T) = 2T \frac{d}{dT} \Phi^{\circ}(T) + T^2 \frac{d^2}{dT^2} \Phi^{\circ}(T) \quad d \cdot T^y$$

Для величины $\Phi^{\circ}(T)$ используется аппроксимационная формула, коэффициенты для которой заимствованы из базы термодинамических данных программы "АСТРА" [12]. Расчетные значения C_p и $H^{\circ}(T) - H^{\circ}(0)$ соответствуют справочным данным. Поскольку как для индивидуальных компонентов, так и для смеси газов используется уравнение состояния идеального газа, термодинамические функции для них рассчитываются через аддитивные составляющие.

Для произвольного газа теплоемкость C_p задается в исходных данных.

1.4.3.2 Вязкость

Индивидуальные соединения

На основе молекулярно-кинетической теории газов для модели твердых не взаимодействующих сфер получено выражение для вязкости [13]:

$$\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{\pi}} \bar{c} \lambda \quad (32)$$

Учет влияния межмолекулярных сил (притяжение либо отталкивание) проводится на основе теории Чэпмена-Энскога. Детальное рассмотрение взаимодействия в системе двух сталкивающихся молекул с потенциальной функцией $\phi(r)$, движение которых описывается законами классической механики, приводит к выражению для вязкости

$$\eta = 26,69 \cdot 10^3 \sqrt{m} \bar{c} \lambda \phi(a^2 Q_v). \quad (33)$$

Величина Q_v определяется видом потенциальной функции парных столкновений.

Для любой физически обоснованной потенциальной функции можно определить два параметра:

- приведенную температуру $T^* = kT/\epsilon$;
- диаметр столкновения, a

Неполярные газы

Потенциал Леннарда-Джонса является общепринятым выражением для $\phi(r)$ неполярных молекул:

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right]. \quad (33)$$

С использованием этого соотношения в [13] получена аппроксимация для Q_v , удобная для использования в расчетах:

$$Q_v = 1.16145/T^{*0.14874} + 0.52487/\exp(0.77320 \cdot T^*) + 2.16178/\exp(2.43787 \cdot T^*). \quad (34)$$

Уравнение (34) применимо при $0.3 < T^* < 100$, среднее отклонение при этом составляет 0.064%.

Полярные газы

Для полярных молекул используется потенциал Штокмайера, отличающийся от (33) наличием члена полярности μ (безразмерный). Параметр полярности,

связанный с дипольным моментом m молекулы определяется как

$$s = m^2 / (isa^3).$$

В [13] предложена аппроксимация для расчета интеграла столкновений полярных молекул:

$$O^{\text{полярные}} = O_{\text{г, (неполярные)}} + 0.2 s^2 / T^* \quad (35)$$

Полярными считаются молекулы, для которых $s > 0.05$.

Для произвольного газа значения потенциальной энергии s и расстояния между центрами взаимодействующих частиц a вычисляются по формулам:

$$s = 3918.584149 \cdot v^{-6} - 6.784404479,$$

$$a = 26.74125011v + 2.733673279.$$

На рисунках 1 - 3 приведены расчетные кривые транспортных свойств газов и их смесей в сравнении с опытными данными.

Смеси газов

Точное решение уравнений теории Чепмена-Энскога для вязкости многокомпонентной смеси gm при низких давлениях может быть аппроксимировано рядом [13]

$$gm = -N \frac{\sum_{i,j} c_{ij} f_{ij}}{\sum_{i,j} J_{ij} V_{ij}} \quad (36)$$

Для определения параметра f предложено приближенное соотношение

$$f_{ij} = \frac{j^{\wedge 0,5}}{v^{\vee i} y} \quad j^i - 1$$

Отклонение расчетных значений вязкости смесей газов от экспериментальных значений обычно не превышает 1-2%, за исключением системы водород-аммиак (16%).

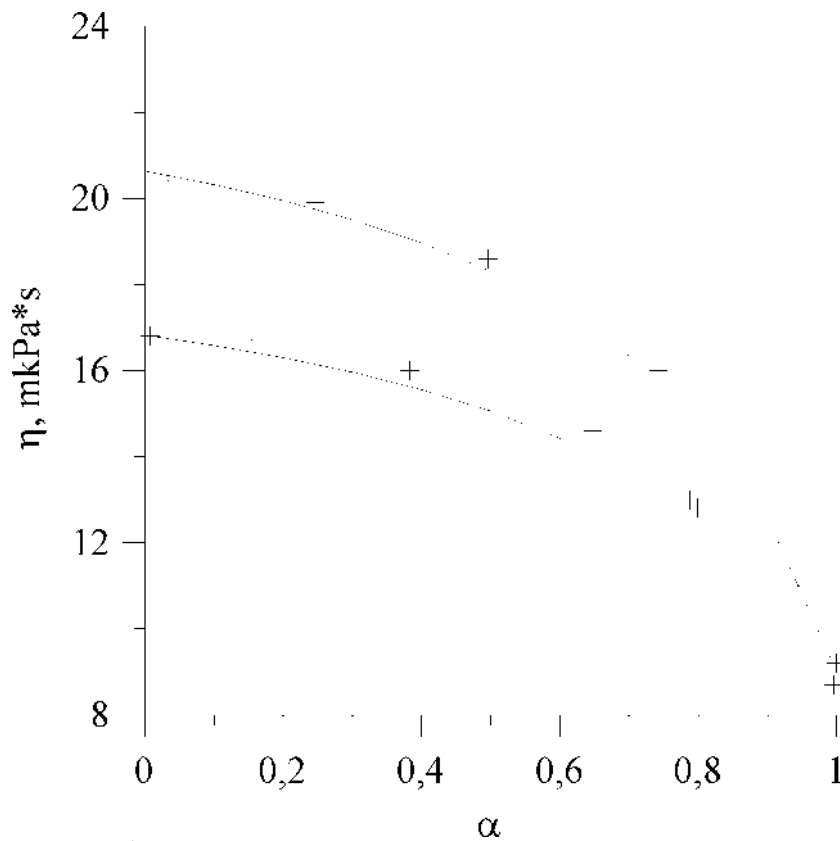


Рисунок 1 - Зависимость вязкости смесей H₂-N₂ и H₂-O₂ от доли первого компонента

(сплошная линия - расчет; + - данные [14])

1.4.3.3 Теплопроводность

Индивидуальные соединения

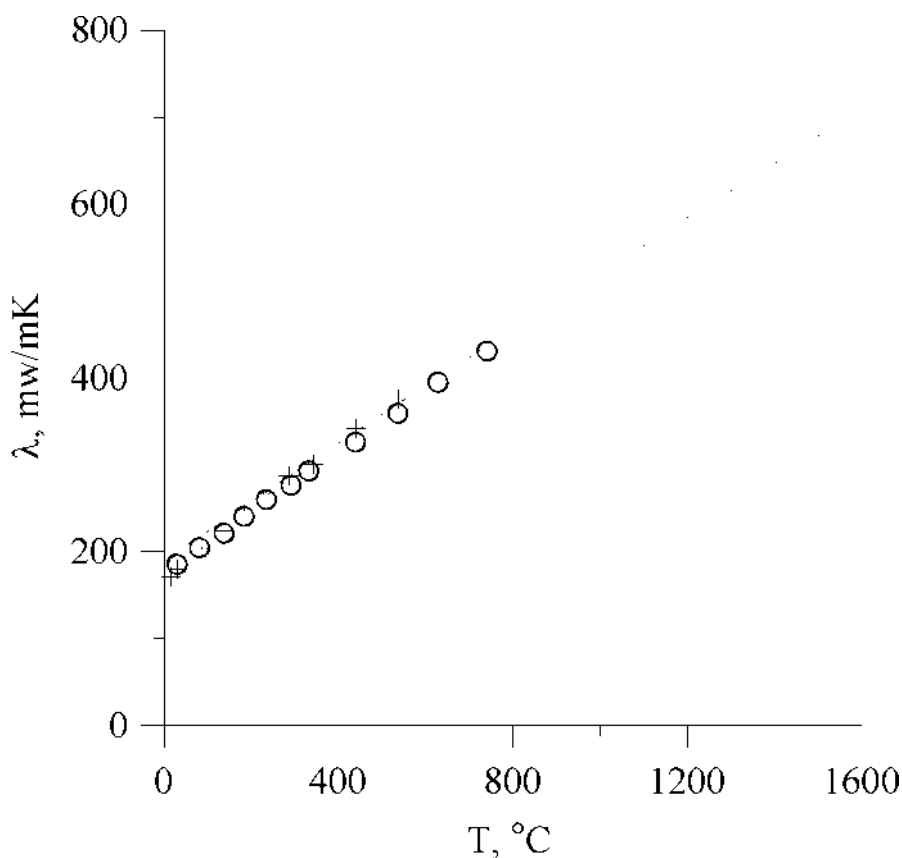
На основе модифицированной корреляции Эйкена для теплопроводности X многоатомных газов в [13] предложено выражение

(37)

$$\frac{-X_{\Lambda}}{10^{-3}\Gamma} = 1.32C + 3.54 - 0.886 \quad \wedge$$

Величина C_{rot} легко рассчитывается из молекулярных постоянных, а Z_{rot} лежит в интервале 1^{10} и, по-видимому, зависит от температуры. В данной работе используются величины σ , s , ν , Z_{rot} , приведенные в [13].

Для произвольного газа используются величины σ , s , определенные в п. 1.4.3.2.



(сплошная линия - расчет; + - данные [15]; o - данные [16])

Рисунок 2 - Зависимость теплопроводности N2 от температуры

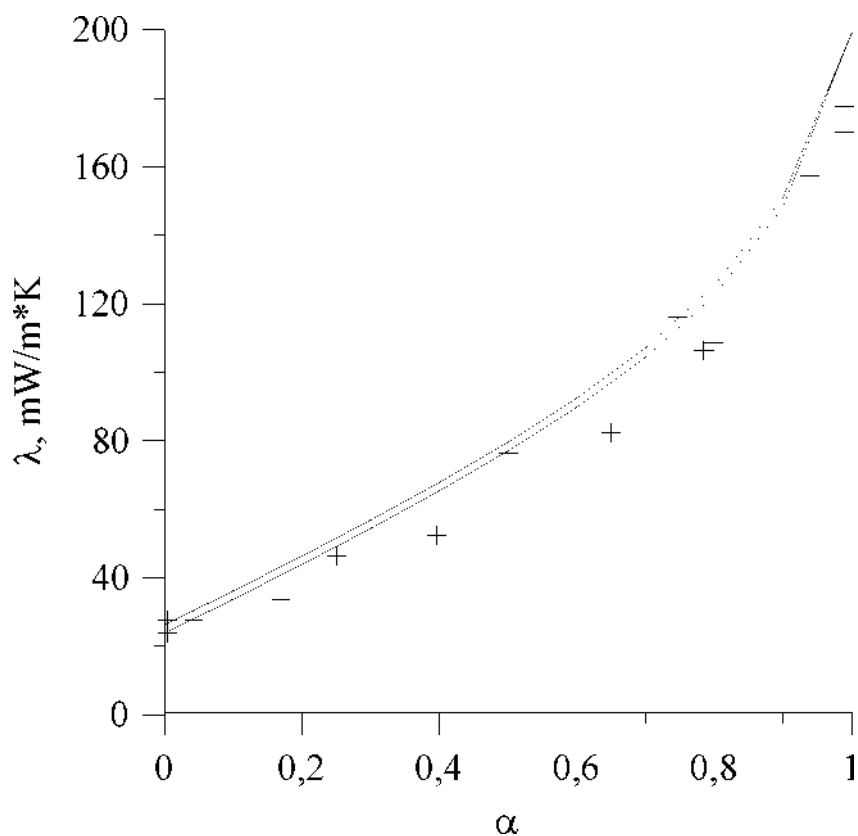
Смеси газов

Для теплопроводности смеси газов характерно отклонение от аддитивной функции состава, выраженного в мольных долях - в присутствии полярных компонент теплопроводность смеси превышает средневзвешенную величину, а для неполярных компонентов наблюдается обратная тенденция. Такой характер зависимости теплопроводности смеси газов от состава качественно правильно передается эмпирическим соотношением Брокау [17]

$$\lambda_s = f \sum c_{i,l} + (1-f) \sum X_i Z_i c_{i,d}, y$$

В бинарной смеси в зависимости от содержания легкого компонента коэффициент f

меняется в интервале 0,34-0,74. Для многокомпонентных смесей в [18] предложено использовать $f=1/2$, при этом отклонение расчетных величин X_m от экспериментальных не превышает 20% даже для смесей с резко отличающимися свойствами компонентов.



(сплошная линия - расчет; + - данные [14])

Рисунок 3 - Зависимость теплопроводности смесей H_2-N_2 и H_2-O_2 от доли первого компонента

1.4.3.4 Коэффициенты молекулярной диффузии

В упрощенной модели диффузионного переноса i -го компонента в многокомпонентной газовой среде вместо уравнения Стефана-Максвелла соответствующий поток j_i представляется пропорциональным градиенту массовой доли a_i [19, 20]:

$$D_{i,m} = P \frac{d o.}{d x}$$

Величина $D_{i,m}$ при этом связывается с бинарными коэффициентами диффузии D_{ij} соотношением

$$D_m = (l-o) / L_{c,i^*j} / D_{i,j} \quad (38)$$

Бинарные коэффициенты диффузии определяются на основе метода Чепмена- Энскога уравнением

$$D_{ij} = (2^{1/2} kT / u)^{2.176} / m a^{2Q_D}$$

где u - приведенная молекулярная масса.

Как и в случае расчета вязкости для определения Q_D используется аналитическая аппроксимация по приведенной температуре, полученная с использованием потенциала Леннарда-Джонса для неполярных и Штокмаейра для полярных компонентов. Парные величины сечения столкновения и потенциальной энергии определяются по простым комбинаторным правилам:

$$a_{ij} = \frac{1}{2} (a_i + a_j) \quad s_{ij} = (s_i s_j)^{1/2}$$

Соотношение для Q_D имеет вид [21]

$$Q_D(\text{неполярные}) = A/T^A + A/\exp(-AT) + A/\exp(A_1 T) + A_3/\exp(AT)$$

и

$$Q_D(\text{неполярные}) = Q_D(\text{неполярные}) + 0.19A^2 / T, \quad A = (A_i A_j)^{0.7}$$

Значения s и a обычно определяются по данным о вязкости, т.к. экспериментальных данных о коэффициентах диффузии не достаточно.

1.4.4 Свойства воды на линии насыщения

Свойства воды и пара на линии насыщения вычисляются линейным интерполированием матрицы свойств [22], рассчитанной по уравнениям Международной ассоциации по свойствам воды и водяного пара и рекомендованной Государственной службой стандартных справочных данных (ГСССВ Р-776-98). Т.к. свойства на линии насыщения используются до 200 °С и 1.555 МПа, что удовлетворяет требованиям кода, но в некоторых случаях не удовлетворяет программной реализации алгоритмов кода, то определенные параметры таблицы экстраполируются константой за пределы этой области. Перечислим эти случаи.

Ввиду того, что значения давления насыщения и плотности насыщенного пара при температуре более 473.15 К используются только для сравнения с парциальным давлением пара или с плотностью пара в боксе, которые не могут быть выше, то при более высокой температуре давление равно давлению насыщения при 473.15 К (1.555 МПа); плотность равна плотности насыщенного пара при 473.15 К (7.86 кг/м).

Т.к. фазовый переход осуществляется при температуре насыщения, то скрытая теплота парообразования может зависеть только от давления.

Плотность воды зависит от температуры и давления (при температуре выше температуры насыщения плотность воды равна плотности насыщенной воды).

Производная плотности насыщенного пара по температуре (на линии насыщения) получена численным дифференцированием табличных данных и дальнейшей аппроксимацией степенными функциями

Графическая иллюстрация данной аппроксимации приведена на рисунке 4.

$$\left(\frac{d\rho_v^s}{dT}\right)_s = \begin{cases} \frac{\left(\frac{T}{540}\right)^{10.8} - 2.4 \cdot 10^{-4}}{\left(\frac{T}{555}\right)^{9.8} - 9.0 \cdot 10^{-4}} & (273.15 < T < 330.0) \\ \frac{\left(\frac{T}{555}\right)^{9.8} - 9.0 \cdot 10^{-4}}{\left(\frac{T}{608}\right)^{7.0} - 1.4 \cdot 10^{-2}} & (330.0 < T < 400.0) \\ & (400.0 < T < 473.15) \end{cases} \quad \text{к} \quad (39)$$

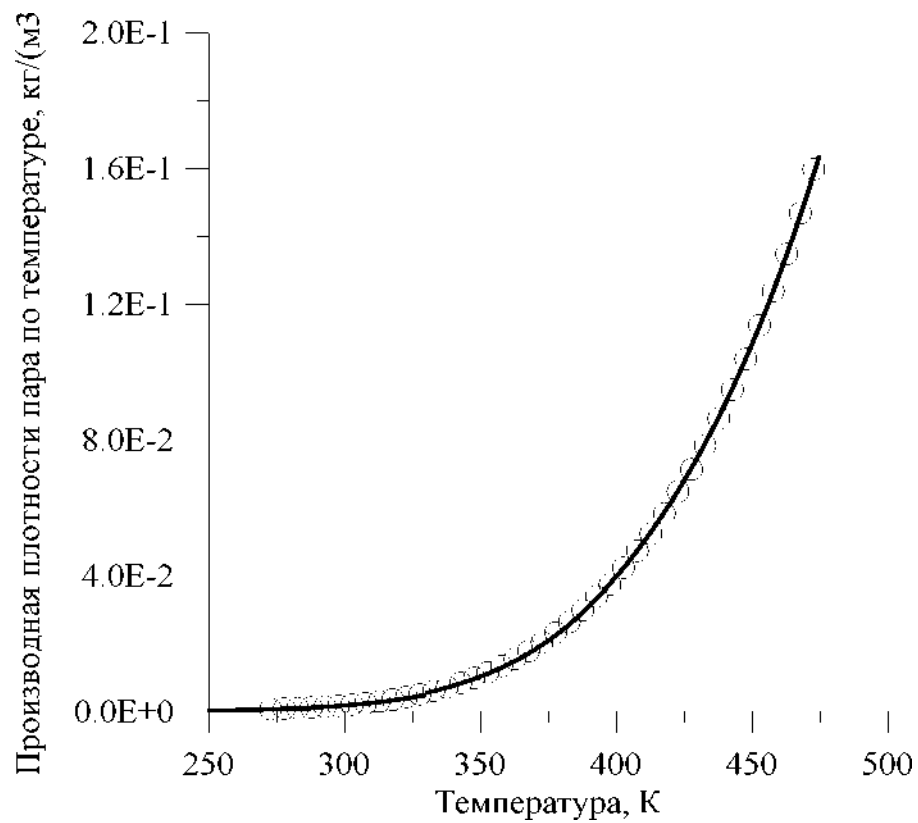


Рисунок 4 - Аппроксимация производной плотности насыщенного пара по температуре
(линия насыщения)

В данном разделе описаны модели и замыкающие соотношения, используемые в коде КУПОЛ-БР. В следующем разделе представлено руководство пользователя для кода КУПОЛ-БР.