**Содержание**

[1 Модуль ПРОФИТ 4](#_Toc470520345)

[1.1 Постановка задачи 4](#_Toc470520346)

[1.2 Общее описание 4](#_Toc470520347)

[1.3 Математическая модель 4](#_Toc470520348)

[1.3.1 Основные предположения и допущения модели ПРОФИТ 4](#_Toc470520349)

[1.3.2 Моделируемые химические соединения и элементы 5](#_Toc470520350)

[1.3.3 Поведение ПД в каналах первого контура ЯЭУ 7](#_Toc470520351)

[1.3.4 Коэффициент захвата частиц поверхностью 10](#_Toc470520352)

[1.3.5 Скорость трения при турбулентном течении 10](#_Toc470520353)

[1.3.6 Скорость диссипации турбулентной энергии 10](#_Toc470520354)

[1.3.7 Осаждение ПД в контурах ЯЭУ 11](#_Toc470520355)

[1.3.8 Осаждение ПД при турбофорезе 13](#_Toc470520356)

[1.3.9 Осажение ПД при диффузиофорезе 13](#_Toc470520357)

[1.3.10 Модель осаждения аэрозолей за счет инерции (влияние гибов) 14](#_Toc470520358)

[1.3.11 Коагуляция аэрозолей ПД 15](#_Toc470520359)

[1.3.12 Суммарное ядро коагуляции 16](#_Toc470520360)

[1.3.13 Конденсация и испарение ПД 17](#_Toc470520361)

[1.3.14 Адсорбция ПД 20](#_Toc470520362)

[1.3.15 Механическое повторное взвешивание 21](#_Toc470520363)

[1.3.16 Гомогенная нуклеация 23](#_Toc470520364)

[1.4 Численная схема и ее реализация 23](#_Toc470520365)

[1.4.1 Коагуляция частиц 24](#_Toc470520366)

[1.4.2 Нуклеация 26](#_Toc470520367)

[1.4.3 Перенос аэрозолей 28](#_Toc470520368)

[1.4.4 Распределение частиц в источнике по размерным классам 28](#_Toc470520369)

[1.4.5 Поверхность осаждения и ее свойств (сухая-мокрая, дырявая, угол по отношению к гравитации, площадь, материал..) 29](#_Toc470520370)

[1.4.6 Моделирование отложений на поверхностях (как делаем отложения, что храним в памяти – массы, размерные группы, хим соедниения, плотнотси?,… 30](#_Toc470520371)

[1.5 Общая архитектура 31](#_Toc470520372)

[1.5.1 Взаимодействие модуля ПРОФИТ с другими модулями 31](#_Toc470520373)

Введение

В настоящее время в России для анализа тяжелых запроектных аварий с потерей теплоносителя применяется расчётный код (РК) улучшенной оценки СОКРАТ/В1 [1]. В РК СОКРАТ/В1 обеспечивается сквозное моделирование физических процессов на этапах развития аварии от исходного события до выхода расплава за пределы корпуса реактора с учетом конструктивных особенностей ВВЭР. Физико-математические модели и расчетные модули кода СОКРАТ/В1 позволяют согласованным образом описывать широкий спектр теплогидравлических, физико-химических и термомеханических явлений на внутрикорпусной стадии тяжелой аварии. Для численного моделирования тяжелых запроектных аварий в качестве основных составных частей РК СОКРАТ/В1 используются следующие программные модули:

* РАТЕГ, осуществляющий моделирование контурной двухжидкостной теплогидравлики;
* СВЕЧА, предназначенный для моделирования физико-химических процессов в активной зоне;
* HEFEST, описывающий поведение материалов в напорной камере реактора и разрушение корпуса.

Выполненные верификационные исследования [2] РК СОКРАТ/В1 на отечественных и зарубежных экспериментальных данных для отдельных физических процессов и на данных интегральных экспериментов подтверждают способность кода адекватно описывать совокупность процессов и явлений, определяющих протекание тяжёлых запроектных аварий на РУ ВВЭР. РК СОКРАТ/В1 аттестован в НТЦ ЯРБ в 2010 году [3].

Версия СОКРАТ/В3 является развитием РК СОКРАТ/В1 в область моделирования накопления радиоактивных веществ в топливе и поведения радиоактивных веществ в первом и во втором контурах РУ, а также моделирования физико-химических и теплогидравлических процессов в устройстве локализации расплава, включая выход радиоактивных веществ.

В частности, РК СОКРАТ/В3 решает следующие задачи:

* рассчитывает количество ПД, накопленное в топливе за время нормальной эксплуатации реактора;
* моделирует выход ПД из топливной таблетки (UO2) в газовый зазор и поведение ПД в газовом зазоре;
* моделирует выход ПД из газового зазора в первый контур реакторной установки (РУ) после разрушения оболочки твэла;
* рассчитывает поведение ПД в первом контуре и перенос ПД в защитную оболочку;
* рассчитывает тепловое состояние УЛР и выход ПД и неконденсируемых газов из расплава в УЛР.

Для решения перечисленных задач в код СОКРАТ/В3 добавлены следующие модули:

* БОНУС — для решения задачи накопления ПД в топливе в течение кампании реактора и мощности остаточного тепловыделения после прекращения ядерной реакции..
* РЕЛИЗ — для решения задачи выхода ПД из топлива в газовый зазор твэла.
* ГАПРЕЛ — для решения задачи выхода ПД из газового зазора в первый контур.
* ПРОФИТ — для моделирования поведения ПД в первом контуре реакторной установки.
* MFPR\_MELT — для моделирования выхода ПД из ванны расплава в НКР.
* РАХИМ — для вычисления активности, массы и мощности изотопов по заданным массам химических соединений.
* ТОЧКА — нейтронно-физический модуль для расчёта нейтронной мощности активной зоне в точечном приближении с учётом обратных связей по теплогидравлическим параметрам, в том числе положительный выбег реактивности, и вычисление мощности остаточного тепловыделения в начальный период после срабатывания АЗ.

В отчете представлены модели кода СОКРАТ/В3, разработанные для моделирования поведения ПД в первом контуре РУ ВВЭР, и методики, разработанные для численной реализации моделей.

# Модуль ПРОФИТ

Возможно, есть ошибки в программировании (см. файл «Для Обсуждения» - выложен на портале)

## Постановка задачи

На внутрикорпусной фазе тяжёлой аварии радиоактивные вещества, вышедшие из разрушенной активной зоны в первом контуре РУ (газовый зазор твэла и бассейн кориума в нижней камере смешения), переносятся с пароводородной смесью к месту разрыва границ первого контура и далее выбрасываются в объём защитной оболочки или, в случае сценариев с байпассированием контейнмента, за её пределы (в частности, во второй контур ПГ и далее, через паропроводы, могут поступать в окружающую среду). При переносе от источника к месту выхода из первого контура они могут менять физико-химические формы, фазовое состояние, взаимодействовать друг с другом и с аэрозольными частицами конструкционных материалов, частично осаждаться на поверхности трубопроводов и внутрикорпусных устройств. В результате источник радиоактивных веществ из первого контура отличается от источника из твэла или дебриса. Степень отличия может быть разной и зависит от конкретного сценария. Поэтому при расчётном анализе радиационных последствий ТА необходимо учитывать сложные процессы эволюции паров ПД и конструкционных материалов (КМ) при их переносе по теплогидравлическим контурам РУ.

## Общее описание

В коде СОКРАТ/В3 численное моделирование поведения ПД и КМ? в контурах РУ на внутрикорпусной фазе тяжелой запроектной аварии выполняется при помощи модуля ПРОФИТ. Моделируются следующие явления:

- перенос благородных газов, паров и частиц по контуру и выход в ЗО и/или в окружающую среду;

- нуклеация;

- конденсация и испарение в объеме и на поверхности стен;

- коагуляция частиц (гравитационная, броуновская и турбулентная);

-осаждение частиц за счет гравитации, турбофореза, диффузиофореза и термофореза, диффузионное осаждение в ламинарном и турбулентном потоках, влияние гибов;

- механическое повторное взвешивание частиц;

- адсорбция;

- гравитационный перенос аэрозолей между расчетными ячейками (inter-volume aerosol fall-back.

## Математическая модель

### Основные предположения и допущения модели ПРОФИТ

Модель ПРОФИТ построена на следующих основных предположениях и допущениях:

1. Моделируется выход в атмосферу 1-ого контура 54 химических веществ;
2. Все химические элементы и соединения, вышедшие в атмосферу 1 контура, делятся на 3 группы – благородные газы, летучие и нелетучие.
3. Элементы из групп летучие и нелетучие могут существовать в 5 состояниях:

состояние 1 (в объеме) - пар в несущей газовой фазе;

состояние 2 (в объеме) - частицы в несущей газовой фазе (аэрозоль);

состояние 3 (на поверхности) - пар, сконденсированный на поверхностях стен и частицах аэрозолей;

состояние 4 (на поверхности) - частицы, осевшие на поверхности;

состояние 5 (на поверхности) - частицы, подвергшиеся химической сорбции стальными поверхностями труб и конструкций контура охлаждения.

Здесь под несущей газовой фазой понимается парогазовая смесь, формируемая модулем РАТЕГ и СВЕЧА, - главным образом, это смесь водяного пара с водородом. Взвешенные частицы и несущая парогазовая смесь образуют аэрозоль. Ниже под парами будем понимать пары химических элементов, выходящих из газового зазора или расплава, а водяной пар будем относить к несущей среде.

1. Процесс перехода нелетучих паров в частицы при выходе из горячего дебриса и/или кориума в относительно холодную атмосферу 1-ого контура не моделируется. Предполагается, что нелетучие вещества выходят в атмосферу 1 контура в форме частиц и их распределение по размерам подчиняется логнормальному закону.
2. Летучие вещества выходят в 1-ый контур в виде паров. Когда пары становится пересыщенными, возможны переходы в конденсированное состояние через нуклеацию и конденсацию. Предполагается, что в смеси паров нуклеация протекает так же, как в однокомпонентном чистом паре.
3. Аэрозоль в 1-ом контуре рассматривается в однокомпонентном приближении, т.е. моделируются однородные частицы смешанного состава. Основным уравнением для описания поведения такого аэрозоля является уравнение переноса числа частиц.
4. Предполагается, что частицы аэрозоля имеют сферическую форму
5. В расчетном объеме в любой момент времени химический состав частиц определяется химическими веществами, находящимися в объеме в данный момент времени, и их массовыми долями. Для отслеживания химического состава частиц в объеме используются уравнения переноса массы отдельных химических веществ. Они дополняют уравнение переноса числа частиц.
6. Рассматриваются следующие процессы:

- перенос благородных газов, паров и частиц по контуру и выход в ЗО и/или в окружающую среду;

- гомогенная нуклеация;

- конденсация на поверхности и обратный процесс испарения;

- коагуляция частиц (гравитационная, броуновская и турбулентная);

- осаждение частиц за счет гравитации, турбофореза, диффузиофореза и термофореза, диффузионное осаждение в ламинарном и турбулентном потоках, влияние гибов;

- механическое повторное взвешивание частиц;

- адсорбция;

-гравитационный перенос аэрозолей между расчетными ячейкам.

1. Химический состав частиц аэрозолей в объеме изменяется за счет переноса, нуклеации, конденсации/испарения, уноса с поверхности и не меняется в результате коагуляции, осаждения, адсорбции.
2. Предполагается, что плотность материала частиц аэрозоля не зависит от химического состава частиц.
3. Химическими взаимодействиями между выходящими в атмосферу 1 контура химическими элементами и соединениями пренебрегается.
4. Влиянием благородных газов и паров химических веществ на свойства атмосферы 1 контура (давление, теплопроводность и т.д.) пренебрегается.

Ниже дано подробное описание интегральной модели поведения ПД, реализованной в модуле ПРОФИТ.

### Моделируемые химические соединения и элементы

Источниками продуктов деления и КМ?, с которыми имеет дело модуль ПРОФИТ, являются вещества, вышедшие из газового зазора при разрушении оболочки твэла и испарившиеся из ванны расплава в НКР в ходе аварии, или заданные пользователем через входной набор. В таблице Таблица 1.1 приведены химические соединения, учитываемые в модуле ПРОФИТ.

Таблица 1.1 – Химические соединения и элементы, учитываемые в модуле ПРОФИТ.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Аббревиатура | Соединение | Состояние | Т плавления/Т кипения,°С |
| 'NG' | Xe, Kr | инертный газ | <0/<0 |
| 'I1' | I2 | летучие | 114/183 |
| 'T1' | Te | 450/990 |
| 'CI' | Cs | 28/671(Cs2) сразу в CsOH или Cs2O |
| 'C1' | CsI | 621/1280 |
| 'TE' | Sb |  |
| 'C2' | Cs2I2 | нелетучие | 621/1280 |
| 'C5' | Cs2 | 700-800 давление пара 1-10Па |
| 'C4' | Cs2O | 490/ |
| 'T2' | Sb2 | нелетучие | 630,5/1625 |
| 'T3' | Sb0 |  |
| 'CH' | CsO | 655/1456 |
| 'C6' | Cs2MoO4 | 350-450 |
| 'PI' | Mo | 936/ |
| 'M1' | MoO | 2620/4830 |
| 'M2' | MoO2 |  |
| 'M3' | MoO3 |  |
| 'M4' | Mo2O6 | 795/1155 |
| 'M5' | Mo3O9 |  |
| 'RU' | Ru |  |
| 'R1' | RuO | 2250/4100 |
| 'R2' | RuO2 |  |
| 'R3' | RuO3 |  |
| 'R4' | RuO4 |  |
| 'BA' | Ba | летучий в водяном паре |
| 'B1' | Ba2 | 727(9)/1897(1640) |
| 'B2' | Ba2O |  |
| 'B3' | BaO | неустойчивый |
| 'B4' | Ba2O2 | 2000/ ->Ba(OH)2 |
| 'B5' | BaMoO4 |  |
| 'SR' | Sr |  |
| 'S1' | Sr2 | 757/1357 |
| 'S2' | SrO |  |
| 'Z1' | Zr | 2430/ ->Sr(OH)2 |
| 'Z2' | ZrO | 1830/4225 |
| 'Z3' | Zr02 |  |
| 'LA' | La | 2680/ |
| 'L1' | La2O | 920/3450 |
| 'L2' | LaO | устойчивый оксид только La2O3 |
| 'L3' | La2O2 |
| 'CE' | Ce |
| 'C7' | CeO(Ce2O3 или СеО2) | 785/2530 |
| 'E1' | Eu | 2700/ |
| 'E2' | Eu2O |  |
| 'E3' | EuO | устойчивый оксид Eu2O3 или EuO |
| 'E4' | Eu2O2 | 1700/ |
| 'N1' | Nd |  |
| 'N2' | NdO(Nd2O3) | 1024/3130 |
| 'N3' | Nb |  |
| 'N4' | NbO (Nb2O5) | 2470/4840 |
| 'U0' | U |  |
| 'FE' | Fe | 1133/3860 |
| 'NI' | Ni |  |
| 'CR' | Cr |  |
| "O2","KR", "AR" |  |  |
|  |  | Не используется |  |

Продукты деления, вышедшие в первый контур РУ разбиваются на три крупные группы в зависимости от их летучести: инертные газы, летучие (в атмосфере первого контура могут быть в состоянии паров и частиц аэрозолей) и нелетучие (в атмосфере первого контура могут быть только в состоянии частиц аэрозолей). Разбиение на группы показано в таблице Таблица 1.1.

Летучие и нелетучие продукты деления в модуле ПРОФИТ могут существовать в пяти состояниях:

1. пар в газовой фазе;
2. аэрозоли в газовой фазе;
3. пар, сконденсированный на поверхностях стен и аэрозолей;
4. аэрозоли, осевшие на поверхности;
5. пары, подвергшиеся химической сорбции стальными поверхностями труб и конструкций контура охлаждения.

Летучие и нелетучие продукты деления могут переходить из одного состояния в другое.

### Поведение ПД в каналах первого контура ЯЭУ

Методическую основу для моделирования поведения ПД в каналах первого контура ЯЭУ составляет система уравнений, включающая в себя:

1. интегро-дифференциальное уравнение (1.1), описывающее эволюцию функции распределения частиц по размерам  в однокомпонентном аэрозоле, равномерно перемешанном по объему V [69], с учетом взаимопревращений частиц и наличия источников/стоков (далее везде, где не оговорено особо, будем называть объем аэрозолей «размером», чтобы избежать путаницы между объемом расчетной ячейки и объемом аэрозолей):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | (1.1) | Источник частиц аэрозоля размера χ  Изменение числа частиц аэрозоля, связанное с переносом аэрозоля через границы объема |
|  | | Образование частиц аэрозоля размера χ за счет коагуляции частиц меньшего размера ξ и χ - ξ  Выведение частиц аэрозоля размера χ за счет коагуляции с другими частицами  Выведение частиц размера χ за счет процессов осаждения  Изменение распределения частиц размера χ за счет конденсации пара или испарения |

где

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| - | векторная сумма скоростей газа-носителя и частиц на границе объема | м c-1 |
| - | функция распределения числа частиц аэрозоля на единицу объема (числовая концентрация), зависящая от размера | м–3 |
| χ, ξ - | размер (объем) частиц аэрозоля | м3 |
| t - | время | с |
| S(χ,t) - | функция распределения источника/стока частиц | м–3с–1 |
| Φ - | ядро коагуляции | м3с-1 |
| R - | скорость выведения | с–1 |
| A | площадь границ объема | м2 |
|  | - числовая концентрация частиц размера χ на границах объема | с–3 |
| V - | объем | м3 |
| С° - | скорость роста/уменьшения размера частицы за счет конденсации пара/испарения | м3/с |



1. дифференциальное уравнение (1.1), описывающее эволюцию объемной концентрации паров хим. соединений  с учетом объемной и поверхностной конденсации паров, повторного испарения со стенок, адсорбции:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | (1.2) | Источник пара химического соединения *v*  Изменение концентрации пара соединения *v*, связанное с переносом пара через границы объема V |
|  | | Изменение концентрации пара соединения *v* в объеме за счет конденсации/испарения на стенках  Убыль пара соединения *v* за счет адсорбции на стенках  Убыль пара соединения *v* за счет нуклеации  Убыль пара соединения *v* за счет конденсации на аэрозолях |

где

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | объемная концентрация пара хим. соединения ПД *v* | кг м-3 |
|  | площадь стенок (поверхности осаждения) в объеме V | м2 |
|  | скорость конденсации/испарения пара ПД на стенке | м/с |
|  | объемная концентрация насыщенного пара хим. соединения *v* у стенки | кг м-3 |
|  | скорость адсорбции пара ПД на стенке | м/с |
|  | объемный источник пара хим. соединения в ячейке | кг/с м-3 |
|  | интенсивность убыли пара из объема за счет нуклеации | кг/с м-3 |
|  | интенсивность убыли пара из объема за счет конденсации на поверхности частиц | кг/с м-3 |

1. дифференциальные уравнения (1.3), описывающие эволюцию концентрации отложений примесей хим. соединений ПД на стенках за счет процессов конденсации и адсорбции паров, осаждения аэрозолей

, (1.3)

где

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | поверхностная концентрация осажденных аэрозолей хим. соединения ПД *v* на стенке | кг м-2 |
|  | масса хим. соединения ПД в форме частиц | кг |
|  | поверхностная концентрация сконденсированных ПД на стенке | кг м-2 |
|  | поверхностная концентрация адсорбированных ПД на стенке | кг м-2 |

Ниже описаны физические модели, представляющие различные члены этих уравнений. Описанию моделей предшествует параграфы, вводящие используемую базовую терминологию и соответствующие формулы.

### Основные параметры физических моделей

#### Время релаксации аэрозольной частицы

Время динамической релаксации τp аэрозольной частицы является важнейшей характеристикой аэрозолей и присутствует во многих формулах. Оно определяется соотношением

|  |  |
| --- | --- |
| ,  , | (1.2) |

где

 − число Кнудсена

 − время релаксации при стоксовом обтекании частицы (Re<<1), с

 − диаметр частицы, м

 − плотность материала частиц, кг/м3

 − плотность несущей среды, кг/м3

 − коэффициент кинематической вязкости несущей среды, м2/с

*l* − длина свободного пробега молекул в несущей среде, м

Здесь длина свободного пробега определяется на основе молекулярно-кинетической теории через вязкость как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.3) |

где *R* - универсальная газовая постоянная, *T* - температура несущей среды, *μf* - молярная масса несущей среды. Отметим, что в описании модуля SOPHAEROS [127] приведено другое (полуэмпирическое) соотношение для длины свободного пробега, но в литературе [118], на которую дана ссылка, этой формулы не найдено (приведена формула (1.3)).

Зависимость , называемая поправкой Каннингема−Милликена, описывает влияние разреженности окружающей частицу среды на силу гидродинамического сопротивления и представляется в виде

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.4) |

В литературе известны различные варианты для констант в (1.4), в модели ПРОФИТ используются, ,  в соответствии с [57].

#### Коэффициент броуновской диффузии

Коэффициент броуновской диффузии *DB* (м2/с) равен

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.5) |

где

*kB* − постоянная Больцмана, Дж/К

*T* − температура несущей среды, К.

### Коэффициент захвата частиц поверхностью

В модели ПРОФИТ используется коэффициент захвата частиц поверхностью *κ.* Физический смысл его может быть определен как отношение потока осевших на поверхность частиц к полному потоку осаждения. Теоретически его можно оценить из условия равенства уносящей силы за счет сдвига скорости на стенке (поверхностного напряжения) и удерживающей адгезионной силы. Однако в модели ПРОФИТ этот коэффициент не вычисляется, а подбирается из условия наилучшего соответствия расчетных данных с экспериментом.

### Форм-фактор

Разобраться с необходимостью введения форм-факторов и их связью с коэффициент захвата частиц поверхностью (каппа) при осаждении и эффективностью коагуляции (гамма) в нашем описании.

### Динамическая скорость при турбулентном течении

В модуле ПРОФИТ имеется две опции для расчета динамической скорости  при турбулентном течении (используется при определении скорости диффузионного осаждения в турбулентном потоке и при турбофорезе). Выбор опций производится во входном наборе.

* Опция 1 (по умолчанию), [38]





,

* Опция 2. Скорость трения определяется по формуле [127]:

,

 ,

где *Vf* – скорость газа-носителя, *Dh* – гидравлический диаметр канала, *μf* – вязкость газа-носителя.

### Скорость диссипации турбулентной энергии

При течении в канале средняя по сечению скорость ее диссипации может быть определены из соотношения

,

 − радиус круглой трубы, м.

### Осаждение ПД в контурах ЯЭУ

Одним из наиболее важных при транспорте ПД в элементах первого контура ЯЭУ является процесс осаждения аэрозолей. По определению скорость осаждения *Vw* − это нормальная компонента скорости, с которой частица дрейфует к поверхности осаждения. При определении полной скорости в модели ПРОФИТ используются два подхода:

* Аддитивное сложение скоростей (по умолчанию)

В этом подходе полная скорость осаждения (м/с) определяется как аддитивная сумма скоростей осаждения за счет различных механизмов:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.6) |

где *V*G— скорость гравитационного осаждения, *V*D — скорость осаждения за счет диффузионных процессов, *V*TM — скорость осаждения под действием термофореза, *V*TB— скорость осаждения под действием турбофореза, VDF определяется диффузиофорезом, VCR – скоростьза счет инерции, α1 и α2 – коэффициенты, учитывающие эффективные площади осаждения за счет гравитации и инерции соответственно (определены ниже в соответствующих разделах).

* Неаддитивный

Осаждение аэрозолей вследствие совместного действия разных механизмов при ламинарном движении в каналах

Скорость осаждения в результате совместного действия всех рассмотренных механизмов (гравитационной седиментации, термофореза, центробежной силы, стефановского потока в результате конденсации пара и броуновской диффузии) при ламинарном движении в каналах может быть представлена в виде [124]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.7) |
| . | (1.8) |

Формула (1.7) совпадает с зависимостью, описывающей влияние поперечного потока массы на относительный закон тепломассопереноса в рамках т.н. «пленочной теории» [125], [126]. Отметим, что при наличии скорости осаждения, индуцированной силой тяжести в наклонной трубе или другим фактором, нарушающим осесимметричность осаждения, необходимо выполнить осреднение (1.8) по периметру трубы.

- Осаждение аэрозолей вследствие совместного действия разных механизмов при турбулентном движении

Скорость осаждения в результате совместного действия всех рассмотренных механизмов (гравитационной седиментации, термофореза, центробежной силы, стефановского потока при конденсации пара, броуновско-турбулентной диффузии и турбофореза) представляется в виде, аналогичном (1.7),

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.9) |

Скорость выведения R (c-1) вычисляется по формуле

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.10) |

где *Slateral* – полная площадь боковых стен расчетной ячейки, Vh – объем расчетной ячейки.

#### Седиментация ПД под действием гравитационных сил

Наиболее известным явлением выведения аэрозолей из атмосферы канала или помещения является седиментация — осаждение за счет сил тяжести. Скорость гравитационного осаждения зависит, главным образом, от силы сопротивления среды движению аэрозольной частицы и определяется выражением [57]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.11) |

где *κ* — коэффициент захвата частиц поверхностью*, g* — ускорение свободного падения, м/с2*.*

Определить α1 – Гена

#### **Диффузионное осаждение ПД в ламинарных и турбулентных потоках**

При ламинарном течении (Re≤2300) и малом размере частиц (меньше 0,1 мкм) осаждение в основном определяется броуновской диффузией частиц. При ламинарном режиме течения скорость осаждения определяется как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.12) |

где DB - коэффициент броуновской диффузии,  - характерная длина диффузии, *Dh* – гидравлический диаметр.

В работе [122] показано, что в случае ламинарного установившегося течения в цилиндрической трубе для зависимости концентрации частиц от расстояния справедлива зависимость вида:



|  |  |
| --- | --- |
| для *h(x)* ≤ 0,0156 | (1.13) |
| для *h(x)* ≥ 0,0156 | (1.14) |

где , x— расстояние от входа в трубу. Следует отметить, что соотношения (1.14) и (1.15) были получены в ходе аналитического решения задачи диффузионного переноса примеси в цилиндрической геометрии в трубе при ламинарном режиме течения (тем самым влияние других механизмов осаждения аэрозолей в данном случае было исключено). Кроме того, в модели (1.13) использовалось допущение о равномерном распределении частиц в сечении на входе трубы. Что не позволяет в качестве *x* рассматривать размер пространственной ячейки, на которые в ходе конечно-разностного решения разбивается рассматриваемый канал.

На основе аналитического решения диффузионной задачи, описанного в работе [122], возможно определить среднюю скорость осаждения в трубе  по соотношению

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.15) |

где *Dh* – гидравлический диаметр, Slateral – полная площадь поверхности боковых стен, nin — числовая концентрация частиц на входе, nin — числовая концентрация частиц на входе в канал.

При турбулентном режиме течения в канале (Re>2300)  определяется следующим образом [68]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.16) |

где  Sc— число Шмидта, - скорость трения.

### Осаждение ПД при турбофорезе

Турбофорез — инерционный механизм осаждения на стенках, определяемый взаимодействием частиц с турбулентными пульсациями несущего потока. Для определения  в ПРОФИТ используется следующее соотношение [68]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.17) |

где  — безразмерное время релаксации частицы, - скорость трения.

### Осаждение ПД под действием термофореза

Термофорез — механизм осаждения на стенках, определяемый разницей температур между поверхностью и окружающей аэрозоли средой. Из-за разности температур между стенкой и несущим газом возникает поток среды в сторону более низких температур, и происходит осаждение частиц на поверхностях охлаждаемого контура. В зависимости от типа аварии и, соответственно, температурного градиента в охлаждаемом контуре за счет термофореза может осаждаться до 50% массы продуктов деления, вышедшей из топлива.

Скорость осаждения под действием термофореза определяется как [60]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.18) |

где  — коэффициент кинематической вязкости парогазовой среды, — градиент температуры у стенки, — коэффициент теплопроводности материала частиц (по умолчанию = 3.5 Вт/м/К), — коэффициент теплопроводности парогазовой среды, ϕ1 рассчитывается по формуле (1.4).

Константы в  имеют следующие значения: *C*m = 1,14; *C*s = 1,17; *Ct* = 2,18.

Следует отметить, что модуль ПРОФИТ ориентирован на взаимодействие с модулем канальной теплогидравлики кода СОКРАТ. Данный модуль позволяет в каждый момент времени для каждой ячейки рассчитывать значения величины теплового потока между стенкой и парогазовой средой  и коэффициента теплопроводности . В рамках приближения постоянного значения  в тепловом пограничном слое значение градиента температуры у стенки можно рассчитать как

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.19) |

Преимуществом данного подхода заключается в согласованности моделей массопереноса с моделями теплогидравлики, внедренными в код. Применение же в модуле ПРОФИТ дополнительных корреляций для расчета толщины теплового пограничного слоя может привести к явно противоречивым результатам (полученное значение градиента температуры у стенки в модуле ПРОФИТ не совпадает с аналогичным, полученным в модуле теплогидравлики).

### Осажение ПД при диффузиофорезе

Диффузиофорез — механизм осаждения частиц на стенке, возникающий из-за конденсации пара на стенке в присутствии неконденсируемых газов. В результате конденсации возникают диффузионные потоки пара (к стенке) и неконденсируемых газов (в противоположную сторону), обусловленные градиентами концентрации соответствующих веществ, а также гидродинамическое течение смеси пара с неконденсируемыми газами к стенке (поток Стефана), которое увлекает за собой частицы. Скорость осаждения частицы на стенке VDF равна скорости потока Стефана VS с поправкой *f*W, возникающей из-за дополнительного взаимодействия диффузионных потоков с частицами (столкновений молекул с частицами) [123]:

|  |  |
| --- | --- |
| *V*DF = *V*S∙*f*W, | (1.20) |

где , — массовый поток конденсируемого пара, — плотность конденсируемого пара, *Sh* — полная площадь стенок расчетной ячейки (поверхности конденсации).

Поправка *f*W определяются следующим образом:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.21) |

где  — молекулярная масса пара,  — эффективная молекулярная масса неконденсируемых газов, вычисляемая по соотношению:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.22) |

где *Xi* — молярная доля i-ого неконденсируемого газа,  - молекулярная масса i-ого неконденсируемого газа.

Формула (1.21) пригодна как для свободномолекулярного, так и для континуального режимов течения [123].

### Модель осаждения аэрозолей за счет инерции (влияние гибов)

В процессе движения по изогнутым участкам труб поток аэрозолей меняет направление, и на частицы действует сила инерции. Аэрозольные частицы большой массы могут выходить за линии тока, сталкиваться со стенками трубы и, таким образом, оседать на них. Частицы меньшей массы могут точно следовать линиям тока и проходить через гиб трубы, не осаждаясь. Чем больше скорость несущего потока, тем больше частиц отклонятся от линий тока и испытают соударение со стенкой гиба. Этот процесс имеет много общего с гравитационным осаждением.

В РУ ВВЭР этот эффект осаждения аэрозолей в гибах может интенсивно проявляться в сценариях, где парогазовая смесь циркулирует через теплообменные трубки парогенераторов.

По аналогии с осаждением аэрозолей за счет гравитации, скорость осаждения частицы за счет центробежной силы, возникающей при обтекании криволинейной поверхности, или в закрученном потоке в модуле ПРОФИТ определяется как [86]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.23) |

где

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | скорость движения потока | м/с |
|  | средний радиус гиба (рисунок  Рисунок 1.1) | м |
|  | коэффициент, учитывающий неоднородность скорости несущего потока |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| R | радиус гиба, | м |
| D | диаметр канала, | м |
| α | угол гиба, | радиан |

**U**

**R**

**α**

**D**

Рисунок 1.1 – Схема гиба трубки

Соотношение (1.23) предложено в [86] для углов гиба 90 градусов.

Следует отметить, что данная модель расчета скорости осаждения применима только для каналов, геометрия которых подобна представленной на рисунке 1.1. Т.е. при разработке одномерной теплогидравлической схемы контура участки с гибами должны выделяться в отдельные гидравлические каналы.

В работе [86] в качестве площади осаждения в гибе рассматривалась величина, равная . Для удобства вычисления суммарной скорости осаждения в модуле ПРОФИТ коэффициент  принимается равным данной попровке ().

### Коагуляция аэрозолей ПД

Агломерация (коагуляция) — процесс, при котором частицы, имеющие разные осредненные или пульсационные скорости, сцепляются вместе и становятся новой единичной частицей, масса которой равна сумме масс отдельных частиц. Мы будем рассматривать только парные столкновения. Изменение спектра аэрозолей в результате коагуляции описывается кинетическим уравнением (1.24) [57], что является частным случаем уравнения (1.22), когда другие процессы, приводящие к изменению числовой концентрации частиц, включая источники/стоки, отсутствуют:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.24) |

Обозначения те же, что и в разделе (1.3.2):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| n(χ,t) - | функция распределения числа частиц аэрозолей на единицу объема (концентрация) | м–3 |
| χ, ξ - | размер (объем) частиц аэрозолей | м3 |
| t - | время | с |
| Φ(χ,ξ,t) - | ядро коагуляции - частота столкновений частиц с размерами χ и ξ в единице объема | м3/с |

Первый интеграл описывает образование частиц аэрозолей размера χ за счет коагуляции частиц меньшего размера ξ и χ – ξ, второй интеграл – исчезновение аэрозолей размера χ за счет коагуляции с другими аэрозолями.

Все механизмы, приводящие к столкновениям и коагуляции частиц, с некоторой степенью условности могут быть подразделены на два типа. К первому типу относятся механизмы, вызывающие столкновения вследствие флуктуаций скоростей частиц, т.е. в результате броуновского или турбулентного движения. Ко второму типу следует отнести 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 разными временами релаксации τp. Наибольший вклад в коагуляцию частиц дают гравитационный, броуновский и турбулентный механизмы. При вычислении ядер коагуляции частицы предполагаются сферическими.

#### Коагуляция за счет броуновской диффузии

Процесс переноса частиц в броуновском движении определяется тепловым движением молекул окружающей среды, для описания которого применима гипотеза молекулярного хаоса (статистической независимости).

Броуновское ядро столкновений аэрозолей совпадает с ядром столкновений молекул [57]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.25) |

где DB1 и DB2 — коэффициенты броуновской диффузии сталкивающихся частиц, γ — эффективность коагуляции (по умолчанию γ=1),  и  — радиусы сталкивающихся частиц.

#### Гравитационная коагуляция

Наибольшее практическое значение из различных механизмов столкновений, связанных с наличием осредненной относительной скорости между частицами, имеет гравитационный механизм, обусловленный различными скоростями оседания (седиментации) частиц. Осредненная относительная скорость, обусловленная силой тяжести, может возникать для частиц разного сорта, т.е. с разными временами релаксации. Гравитационное ядро столкновений равно [69]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.26) |

где VG1 и VG2 — скорости гравитационного осаждения сталкивающихся частиц,  - поправка, учитывающая влияние возмущения несущего газа движением частиц. В работе [69] для ее расчета предлагается использовать соотношение вида

|  |  |
| --- | --- |
| , |  |

где  - отношение радиуса меньшей частицы к радиусу большей.

#### Турбулентная коагуляция

Турбулентная коагуляция обусловлена столкновениями частиц в результате их вовлечения в турбулентное движение несущего парогазового потока. Ядро турбулентной коагуляции состоит из двух частей [61], [69] — сдвиговой и инерционной. Первая определяется следующим образом

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.27) |

где ε — скорость диссипации турбулентной энергии,  — кинематическая вязкость.

Инерционная часть задается формулой:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.28) |

Суммарное ядро турбулентной коагуляции определяется как

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.29) |

#### Суммарное ядро коагуляции

- Броуновская и гравитационная агломерация



- Броуновская и турбулентная агломерация



- Гравитационная и турбулентная агломерация [69]:



- Броуновская, гравитационная и турбулентная агломерация:





















### 1.3.15 Конденсация (испарения) паров ПД на поверхности конструкционных элементов

Конденсация (испарение) является важнейшим процессом в транспорте ПД. В случае, когда пары ПД не находятся на линии насыщения, они подвергаются фазовым превращениям (конденсация/испарение — в зависимости от степени пресыщения). В рамках заложенной в ПРОФИТ кинетической модели конденсации ПД на поверхности конструкционных элементов используется допущение о диффузионном характере процесса конденсации (скорость конденсации и испарения примеси на поверхности конструкционного элемента много больше скорости диффузионного переноса примеси к поверхности стенки).

Величина  для кинетической модели рассчитывается по эмпирическим корреляциям, вид которых зависит от геометрии канала и характера течения (турбулентное или ламинарное). В текущей версии модуля для расчета величины  при ламинарном течении парогазовой среды в канале используется корреляция из работы [128]

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.30) |

Для турбулентного режима - так же корреляция из работы [128]

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.31) |

В формулах (1.34) и (1.35) используются следующие обозначения:  - число Рейнольдса в ячейке,  - число Шмидта в ячейке,  - гидравлический диаметр канала (м),  - длина канала (м),  - коэффициент молекулярной диффузии примеси v в парогазовой среде в ячейке i (м2/с).

Очевидно, что величина  должна существенно зависеть от величины коэффициента молекулярной диффузии. Для его вычисления используется модель Бланка [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.32) |

где *y*j— молярная доля j-ой фракции несущей среды (воздуха, водяного пара, неконденсируемого газа), *D*v,j — коэффициент бинарной диффузии *v-*го соединения ПД в j-ой фракции несущей среды (м2/с). Он определяется как [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.33) |

где *P* — давление в системе (Па),  и  - молярные массы рассматриваемого соединения v и компонента несущей среды j (г/моль),  - эффективный геометрический параметр молекул (Å),  - безразмерный интеграл столкновений. Для вычисления величины  используется соотношение, рекомендованное в [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.34) |

где ,  - параметр, характеризующий межмолекулярное взаимодействие. Для бинарной смеси значение  определяется как [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.35) |

Значения коэффициентов a-h, параметров  и  для части рассматриваемых летучих ПД и компонентов несущей среды представлено в таблице 1.2 (взяты из [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**] и из работы [130] для теллура и йодида цезия).

Таблица 1.2. – Значения коэффициентов в формуле для расчета коэффициента диффузии

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Параметр | Значение | Параметр | Значение | Параметр | Значение |
| a | 1,06036 | ,Å | 5,91 | , К | 370 |
| b | 0,1561 | ,Å | 5,16 | , К | 474,2 |
| c | 0,193 | ,Å | 2,641 | , К | 809,1 |
| d | 0,47635 | ,Å | 2,827 | , К | 59,7 |
| e | 1,03587 | ,Å | 3,798 | , К | 71,4 |
| f | 1,52996 | ,Å | 3,467 | , К | 106,7 |
| g | 1,76474 | ,Å | 4,12 | , К | 1785,9 |
| h | 3,89411 | ,Å | 3,35 | , К | 1850,0 |
|  |  | ,Å | 3,41 | , К | 1780,0 |

Для ряда рассматриваемых летучих ПД в открытых публикациях не удалось найти данных о значениях параметров  и  найти не удалось. В связи с этим, для расчета данных параметров используются соотношения, рекомендованные в [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.36) |

В рамках упрощенной модели процесс конденсации рассматривается как мгновенный. При этом величина  в произвольный момент времени  определяется как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.37) |

где  - дельта-функция.

Концентрация *i*-ой фракции на линии насыщения определяется следующим образом

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.38) |

где  может быть как температурой парогазовой среды (при расчете концентрации насыщения в объеме), так и температурой стенки конструкционного элемента,  - молярная масса хим. соединения ПД.

Давление пара вычисляется по эмпирическим корреляциям, перечень которых представлен в таблице 1.2.

Таблица 1.2. - Корреляции для вычисления давления насыщенных паров ПД

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Хим. соединение ПД | Давление насыщенного пара, Па | Источник |
| Cs | c = - 0.706333,  = - 9.320486,  = 8.722363,  = -2.452782,  = 1.246298,  = 0.493289,  = -0.596955,  = 0.135005 | [131] |
| Te |  | [132] |
| CsI |  | [133] |
| Sb |  | [134] |
| I2 |  | [134] |

### 1.3.15.2 Адсорбция ПД

Модель адсорбции не включена в набор моделей по умолчанию, она рекомендуется для проведения анализа чувствительности (активируется пользователем из входного набора). Используемая корреляция для скорости сорбции йода I2 в зависимости от температурыполучена дляоценки адсорбируемоймассы на поверхностях из нержавеющей стали (SS304).

Скорость адсорбции йода I2 согласно [65] равна

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.39) |

где  — скорость сорбции (м/с). Для остальных летучих ПД скорости сорбции постоянны и определяются согласно работам [66, 67]. Предполагается, что скорость сорбции паров CsI на поверхностях системы охлаждения первого контура пренебрежимо мала по сравнению с другими возможными механизмами осаждения.

### 1.3.15.3Конденсация паров на аэрозолях

Конденсация паров на поверхности аэрозолей является важнейшим процессом в транспорте ПД. Этот процесс приводит к росту размера аэрозольных частиц. В случае, когда пары ПД не находятся на линии насыщения, они подвергаются фазовым превращениям (конденсация/испарения – в зависимости степени пресыщения).

В рамках заложенных в ПРОФИТ моделей используется допущение о том, что конденсация паров на аэрозолях не может привести к такому увеличению их размера, при котором рассматриваемые аэрозоли перейдут в соседнюю размерную группу (удвоения размера аэрозоля только за счет конденсации не происходит). Т.е. процесс конденсации приводит только к росту массы аэрозолей в текущей размерной группе.

Процесс конденсации пара на частицах в рамках кинетической модели можно описать с помощью предложенной в работе [136] модели, в рамках которой убыль пара химического соединения v в объеме за счет конденсации на аэрозолях  определяется как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.40) |

где  - радиус аэрозолей размера ,  - концентрация насыщения пара ПД при температуре несущего газа в ячейке.

Параметр  есть фактор коррекции на размер частицы вследствие эффекта Фукса:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.41) |

где  - число Кнудсена для частиц k-ой размерной группы в i-ой ячейке.

Параметр  соответствует поправке Кельвина на кривизну частицы:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.42) |

где  - коэффициент поверхностного натяжения жидкости,  - объем молекулы рассматриваемого химического соединения ПД.

Однако необходимо отметить, что в ходе методических расчетов было установлено слабое влияние параметров  и  на результаты расчета. В связи с чем они принимаются равными единице.

В рамках применения упрощенной модели процесс конденсации паров на аэрозолях рассматривается как мгновенный, его кинетика не моделируется.

### 1.3.15.4Гомогенная нуклеация

Вещества из группы «летучие» могут распространяться в атмосфере 1-ого контура в форме паров. Если пары становятся пересыщенным, образуется конденсированная фаза. Известно, что в чистом пересыщенном паре начальное состояние метастабильно, и образование частиц происходит через флуктуационное зародышеобразование (нуклеацию) за счет объединения сталкивающихся молекул в кластеры.

В кинетической модели поведения паров учитывается влияние кинетики процесса нуклеации. При этом используется допущение о том, что нуклеация паров различных хим. соединений ПД происходит независимо друг от друга.

Скорость нуклеации пара *J* вещества *a* (скорость образования частиц критического размера) определяется следующим выражением [135]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.43) |

где есть безразмерная поверхностная энергия, a - коэффициент поверхностного натяжения жидкости, a*N* – числовая концентрация мономеров конденсирующегося пара, *S* = a*N*/a*Ns* и a*Ns*(*T*) есть числовая концентрация мономеров насыщенного пара при температуре *T*, a*m*, aχ и a*s* есть соответственно масса, объем и площадь поверхности мономера.

Критический радиус зародыша *arcrit*, полученный из условия максимума свободной энергии, вычисляется по формуле [119]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.44) |

aχ - объем молекулы в жидкой фазе

При этом величина  равна

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.45) |

Коэффициент поверхностного натяжения σ (мН/м) определяется как:

- для элементарного цезия [120];

- для остальных веществ принимается равным .















































В рамках же упрощенной модели переноса и поведения паров ПД процесс нуклеации рассматривается как мгновенный, его кинетика не моделируется.

### Механическое повторное взвешивание

Модель является опционной, предназначена для количественной оценки числовой концентрации частиц аэрозолей в газовой фазе для ситуаций, характеризующихся резким увеличением потока газа, а именно [117]:

- при быстрой генерации пара при стекании дебриса из активной зоны в напорную камеру реактора;

- при генерации пара при заливе активной зоны;

- при разрыве корпуса реактора;

- при интенсивных взаимодействиях расплава с теплоносителем, таких как паровой взрыв;

- при горении и детонации водорода.

В [117] отмечено, что экспериментальные исследования явления повторного взвешивания фокусировались именно на исследования условий резкого возрастания газового течения. Эти исследования показали, что рост газового потока дает существенное начальное повторное взвешивание, за которым следует длинный период, характеризующийся много меньшей скоростью уноса частиц с поверхности. Эти исследования также показали, что старение аэрозольных частиц на поверхности затрудняет унос частиц с поверхности.

Для описания процесса уноса частиц в турбулентном потоке используется рок-н-ролл модель, предложенная в работе [80]. Модель основана на следующих предположениях:

* частицы имеют форму шара;
* осажденный слой можно считать плоским, т.е. его толщина мала по отношению к радиусу трубы.

Рассмотрим отрыв от поверхности сферической частицы радиуса *r* (рисунок Рисунок 1.2) в результате воздействия на нее турбулентного газового потока.На частицу действует подъемная сила *FL*(*t*) и сила «сопротивления» *FD*(*t*). Силы адгезии *FA* стремятся удержать частицу на поверхности. Статическое положение прилипшей к поверхности частицы характеризуется соотношением моментов сил относительно точки P. Момент сил, стремящихся оторвать частицу от поверхности, можно представить моментом обобщенной силы отрыва *F*(*t*), действующей в точке Q:

|  |  |
| --- | --- |
| F(t)∙ a =FL(t)∙rL + FD(t)∙rD, | (1.46) |

где *a* — расстояние между неоднородностями поверхности,

*rL* = *a*/2 и *rD* = (*r2 – a2/4*)1/2 — плечи соответствующих сил относительно точки P.

Момент силы адгезии *FA*, приложенной к частице в точке Q, стремится удержать частицу и имеет величину: *FA*∙*a.* Отрыв происходит в результате вращения частицы вокруг точки Р при превышении силой отрыва *F*(*t*) значения силы адгезии *FA* в точке Q:

|  |  |
| --- | --- |
| *F*(*t*) = *FL*(*t*)/2 + *FD*(*t*)∙( *r2/a 2– 1/4*) 1/2 > *FA* | (1.47) |

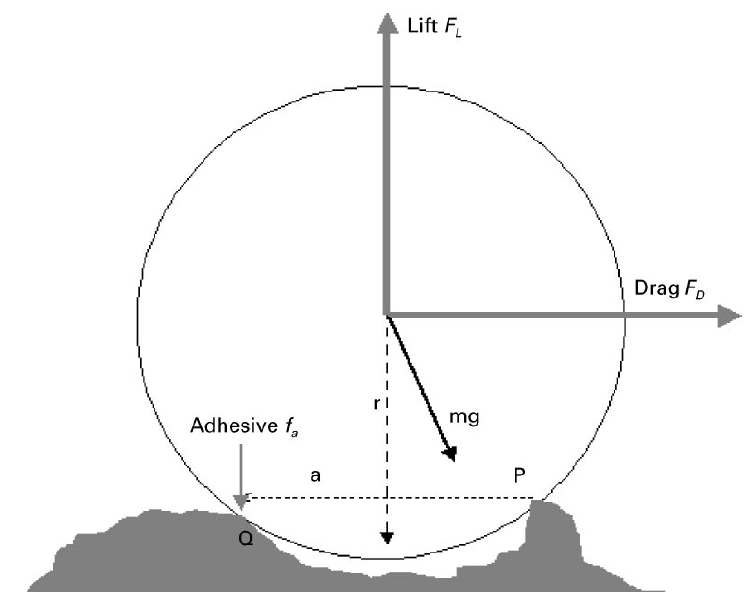


Figure 2.24 - Particle surface geometry for Rock’n’Roll model (Reeks & Hall, 2001)

Рисунок 1.2 – Схема сил, действующих на частицу на поверхности

Отсюда, в частности, видно, что соотношение эффективности подъемной силы и силы сопротивления существенно зависит от соотношения параметра неоднородности *a* и радиуса частицы *r*.

В турбулентном потоке флуктуации скоростей вызывают флуктуации обеих сил *FL* и *FD*. Начиная с работы [80], большинство авторов используют предположение о гауссовском распределении силы *F*(*t*). Это предположение дает следующее выражение для частоты отрыва частиц:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.48) |

где

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.49) |

 — среднее значение силы,  ее флуктуационная составляющая, а  – характерная частота вынужденных смещений, задаваемая формулой

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.50) |

(точкой обозначена временная производная),  — функция ошибок.

Для выполнения практических расчетов приближенно можно считать, что

|  |  |
| --- | --- |
| при . | (1.51) |

Для расчета средних значений сил предлагается использовать эмпирические формулы

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.52) |

для среднего значения подъемной силы и

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.53) |

для среднего значения силы сопротивления. Здесь *ν* — коэффициент кинематической вязкости, *ρ* — массовая плотность газа, *uτ* — динамическая скорость, а *r* — эффективный радиус частицы. В [80] отмечено, что уравнение (1.52) справедливо при .

В итоге для среднего значения силы получим

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.54) |

Учитывая, что для среднеквадратичного отклонения обеих сил используется оценка

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.55) |

и, пренебрегая корреляциями этих сил, получим

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.56) |

экспериментальная зависимость

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.57) |

При описании адгезии удобно ввести нормированную силу адгезии *FA*', определенную как отношение силы адгезии *FA* к силе адгезии, соответствующей взаимодействию с абсолютно гладкой поверхностью . В рамках модели, построенной в работе [109], эта сила пропорциональна радиусу частицы:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.58) |

где *γ* — поверхностная энергия.

Большинство авторов считает, что силы адгезии имеют логнормальное распределение [81–85], то есть для плотности вероятности  можно записать:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.59) |

где  — средняя нормированная сила адгезии, определяющая степень уменьшения адгезионного воздействия, связанного с шероховатостью поверхности, а  – стандартное отклонение для этой величины.

Обработка экспериментальных данных дает следующие зависимости этих величин от радиуса частиц [85]:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| , | | (1.60) |
| , | (1.61) | |

где *r* приводится в микронах. При этом для  используется аппроксимация, отличная от предложенной в [85], но обеспечивающая ту же точность.

Производя усреднение величины *p* по нормированной силе адгезии, можно написать выражение для скорости отрыва частиц:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.62) |







## Численная схема и ее реализация

Вычислительный алгоритм решения общего интегро-дифференциального уравнения (А) в модуле ПРОФИТ основан на методе расщепления по физическим процессам. При этом на каждом временном шаге сначала проводится конечно-разностное решение задачи переноса аэрозолей и паров ПД между ячейками, после чего проводится последовательное решение задач поведения паров ПД в ячейке, коагуляции и осаждения аэрозолей. Ниже представлено подробное описание применяемых в рамках решения данных задач численных методов.

### Поведение аэрозолей в ячейке

Для решения задачи моделирования поведения аэрозолей используется численный метод, основанный на группировании частиц в размерные классы (так называемый «sectional method») [70]. Этот метод сегодня используется в большинстве тяжелоаварийных моделей, в которых решается динамическое уравнение для аэрозолей [117] (например, в кодах ASTEC, COCOSYS, CONTAIN, MELCOR). Метод позволяет получать решение за приемлемое расчетное время, но разрешаемой величиной становится интегральная характеристика аэрозолей в размерном классе. В качестве таковой в модуле ПРОФИТ выбрана полная числовая концентрация частиц *Nl*, определяемая как



где *χl и χl+1*  —размер частиц на границах размерного класса *l.*

Соответственно, балансные уравнения для переноса, коагуляции, конденсации и других процессов также разрешаются относительно *Nl*. Ниже обсуждается соответствующие численные аппроксимации. Уравнения для переноса масс химических соединений являются дополнительными и используются для вычисления химического состава частиц аэрозолей.

#### Коагуляция частиц

Для решения кинетического уравнения коагуляции (1.24) используется метод размерных классов. Суть метода размерных классов, или фракций, состоит в том, что непрерывный спектр частиц *n(χ)* дискретизируется по размерам и в пределах размерного класса, или фракции, все частицы представляются либо одним размером, либо функциональная форма распределения по размерам имеет определенный вид. Далее анализируется только одна интегральная величина из каждого класса, а не каждая *n(χ)*, т.е. число решаемых балансных уравнений редуцируется до числа фракций. Ряд предположений и ограничений (предположение о постоянстве *n(χ)* в пределах фракций и геометрическое ограничение на разбиение по размерам) позволяют снизить количество вычисляемых коэффициентов коагуляции, что существенно экономит вычислительные ресурсы. Подробное описание метода размерных классов дан в работе [70]. Ниже приводятся краткие характеристики метода, а также особенности его применения в модуле ПРОФИТ.

1. Расчетный диапазон размеров частиц [*χmin; χmax*] (напомним, что в модуле ПРОФИТ под размером частицы понимается ее объем) и функция распределения по размерам *n(χ)* делится на *К* фиксированных интервалов. При разбиении накладывается геометрическое ограничение на границы интервалов

|  |  |
| --- | --- |
| *.* | (1.63) |

В модуле ПРОФИТ разбиение с учетом геометрического ограничения может быть задано через входной язык кода СОКРАТ следующим способом:

- задается число размерных групп *К*, границы *χ1= χmin* и *χK+1 = χmax* моделируемого диапазона размеров рассматриваемых частиц. В этом случае при разбиении на интервалы выполняется соотношение:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.64) |

где *χl-1, χl*  — размер частиц на границах *l-1* интервала*;*



2. Частицы в соответствии с размерами группируются в размерные классы, или фракции. По умолчанию установлено 20 размерных классов (*К=20)*.

3. В пределах размерного класса *l* с интервалом размеров [*χl, χl+1*] аппроксимирующая функция *nl* принимается постоянной.

4. За интегральную характеристику размерного класса *l* принимается полное число частиц *Nl* в размерном классе в единице объема (далее полная числовая концентрация частиц в размерном классе), определяемое как

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.65) |

и, в соответствии с предположением о постоянстве аппроксимирующей функции распределения в размерном классе *l*, равное

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.66) |

В этом случае полная масса *Ml* всех частиц в группе *l* определяется как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.67) |

и с учетом (1.66) она равна

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.68) |

где *ρ* – плотность материала частиц.

5. Коагуляция приводит к образованию частиц, чей размер лежит либо в том же размерном классе, что и исходные, либо в других классах. Из-за введенного выше геометрического ограничения (1.63) на границы интервалов переход новой частицы в размерный класс *l* возможен, если хотя бы одна коагулирующая частица принадлежит классу *l-1*. Это условие существенно снижает число слагаемых при вычислении потока частиц в размерную группу.

6. Все образующиеся суперкрупные частицы с размером, превышающим верхнюю границу диапазона размеров *χmax*, выводятся из системы в предположении их мгновенного осаждения.

7. Аппроксимирующие балансные уравнения в общем виде, полученные с использованием метода размерных классов, и их строгий вывод приведены в работе [70]. Уравнения модели коагуляции ПРОФИТ могут быть получены из этой работы (а именно, из уравнения (13) [70] в форме закона сохранения массы, т.е. при γ=1 и α=ρ) с учетом ранее введенного геометрического ограничения и дополнительных предположений о малости квадратичных членов секционных коэффициентов коагуляции [70], внутрисекционных и межсекционных, и слабой зависимости ядра коагуляции от размера частиц в пределах размерного класса.

Финально в модуле ПРОФИТ решается следующая система из *K* уравнений для полной числовой концентрации частиц *Nl* во фракции:

|  |  |
| --- | --- |
| ,  *l=1,2,…, K* | (1.69) |

где 

,

*Φl,m*- ядро коагуляции.

8. При вычислении ядер коагуляции используются представительный размер частиц групп, который вычисляется по формуле

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.70) |

Система (1.69) решается методом Рунге-Кутта шестого порядка точности.

Отметим, что в записи системы уравнений (1.69) во избежание излишней перегруженности опущен индекс гидравлической ячейки *i*. Но следует понимать, что система (P3) решается в каждой гидравлической ячейке.

#### Образование частиц в результате нуклеации

По умолчанию для моделирования изменения числа частиц в результате нуклеации используется модель (1.29). В рамках данной модели вклад в увеличение общей числовой концентрации частиц в размерном классе *l* из-за нуклеации дают пары всех химических элементов *a,* для которых создались условия пересыщения(степень пересыщения больше 4?)и критический размер зародышей которых попадает в размерный интервал данного класса*.*  Количественное изменение общей числовой концентрации в группе из-за нуклеации паров определяется как полная масса частиц-зародышей критических размеров , отнесенная к произведению эффективной плотности материала частиц аэрозоля *ρ* и представительного размера частиц группы .

Аппроксимация балансного уравнения для нуклеации в модуле ПРОФИТ имеет вид:

,

где



, ,

вычисляется по формуле ,  вычисляется по формуле ,

 - плотность вещества *a* в конденсированном состоянии.

В случае же применения упрошенной модели поведения паров предполагается, что в результате нуклеации образуются только частицы из первой размерной группы. При этом уравнение для изменения числа частиц имеет вид:

, (1.71)

где  - объем рассматриваемой ячейки,  - масса сконденсированного в объеме пара a-го вещества за текущий временной шаг.

### Поведение паров продуктов деления в ячейке

На основе модели (1.29) и ее упрощенной версии (1.30) в соответствии с методом разделения по физическим процессам была разработана система конечно-разностных уравнений, описывающая поведение паров в ячейке (объемную, поверхностную конденсацию и процесс адсорбции). Система конечно-разностных уравнений, построенная на основе (1.29), имеет вид:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.72) |

где  - полная масса пара a-го соединения в i-ой ячейке на n-ном временном слое (кг),  - полная масса a-го соединения в форме аэрозолей в i-ой ячейке на n-ном временном слое (кг),  - полная масса конденсата a-го соединения в i-ой ячейке на j-ой поверхности на n-ном временном слое (кг),  - полная масса адсорбированного a-го соединения в i-ой ячейке на j-ой поверхности на n-ном временном слое (кг),  - величина временного шага (с),  - коэффициент нуклеации (1/с),  - коэффициент конденсации на аэрозолях (1/с),  - концентрация насыщенных паров при температуре газа в ячейке.

Соотношение для  получено из (1.40) и имеет вид:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.73) |

где  - молярная масса a-го соединения,  - число Авогадро.

Соотношение для  получено из (1.43) и имеет вид:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.74) |

В рамках равновесной модели поведение паров ПД в ячейке моделируется следующим образом:

1. первоначально проводится решение системы уравнений вида

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.75) |

1. затем, в том случае, если концентрация насыщения пара при температуре несущего газа в ячейке окажется меньше полученной в результате решения (1.31), объемная концентрация пара в ячейке приравнивается концентрации насыщения, а весь излишек массы считается перешедшим в аэрозольную форму

|  |  |
| --- | --- |
| ; | (1.76) |

1. если объемная концентрация пара оказывается выше концентрации насыщения при температуре поверхности конструкционных элементов, то объемная концентрация пара в ячейке приравнивается концентрации насыщения для температуры стенок, а весь излишек массы считается перешедшим в конденсат.

|  |  |
| --- | --- |
| ; | (1.77) |

В (1.76)  - масса соединения ПД, перешедшая из парообразного состояния в аэрозольную форму в момент времени t+∆t,  - объемная концентрация насыщенных паров ПД при температуре несущего газа в ячейке,  - объемная концентрация насыщенных паров ПД при температуре поверхности конструкционных элементов в ячейке. В том случае, если , процесс испарения ПД с поверхности конструкционных элементов описывается также уравнениями вида (1.77).

Следует отметить, что в рамках упрощенного подхода в том случае, если к моменту времени t+∆t аэрозоли в ячейке отсутствовали, то вся масса  переводится в массу аэрозолей в первой размерной группе (моделируется нуклеация). В случае же присутствия аэрозолей предполагается, что весь пар конденсируется уже на существующих аэрозолях, пропорционально их суммарной площади поверхности:

|  |  |
| --- | --- |
| ; | (1.78) |

где k – номер размерной группы аэрозолей,  - масса пара ПД, сконденсированного на k-ой размерной группе.

### Перенос паров и аэрозолей

Моделирование транспорта продуктов деления выполняется с использованием нодализации РУ для кода СОКРАТ/В3 (раздел отчета, где описывается нодализация). Предполагается, что перенос частиц аэрозолей и паров ПД осуществляется потоком несущего газа (смесь водяного пара с неконденсируемыми газами).

В конечно-разностном приближении переносной член в уравнениях (1.1), (1.29) и (1.30) будет имеет вид

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.79) |

где  - число гидравлических связей ячейки (граничных сечений),  - проекция скорости несущего газа на внешнюю нормаль j-го граничного сечения,  - площадь j-го граничного сечения,  - значение в j-ом сечении функции, для которой записано уравнение переноса (объемная концентрация пара, химического соединения в аэрозольной форме или концентрация аэрозолей в данной размерной группе).

Следует отметить, что существуют различные методы определения . В модуле ПРОФИТ используется хорошо известный метод «назад по потоку». В соответствии с данным методом, соотношение (1.75) можно записать в виде:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.80) |

где  - число граничных сечений, через которые на данном временном шаге происходит унос парогазовой среды из i-ой ячейки,  - число граничных сечений, через которые на данном временном шаге происходит приток парогазовой среды в i-ую ячейку,  - значение концентрации в соседних ячейках, из которых происходит приток несущей среды.

Конечно-разностный аналог уравнения переноса (как в случае переноса объемных концентраций аэрозолей рассматриваемых размерных групп, так и в случае объемных концентраций хим. соединений ПД в форме паров или аэрозолей) с учетом (1.76) можно записать в виде

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.81) |

В рамках решения задачи переноса решаются системы уравнений вида (1.77), состоящие из K уравнений (K – число пространственных ячеек) для объемных концентраций аэрозолей всех рассматриваемых размерных групп, для объемных концентраций паров и аэрозолей всех рассматриваемых химических соединений ПД. При решении полученной системы линейных уравнений используется метод Гаусса.

### Распределение частиц в источнике по размерным классам

Источниками частиц для модуля ПРОФИТ являются:

- вещества из группы «нелетучие» при выходе из дебриса или бассейна с кориумом при моделировании тяжелой аварии (источник 1);

- ввод частиц, задаваемый пользователем (источник 2).

Распределение в источнике 1 из группы «нелетучие» полагается логнормальным в пределах моделируемого диапазона размеров [*χmin; χmax*]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.82) |

где:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| - *σg* | стандартное отклонение, |  |
| - *r* | радиус частицы, |  |
| - *rg* | средний геометрический радиус аэрозолей, |  |

Параметры распределения (σg, rg) в этом источнике задаются пользователем во входном языке кода СОКРАТ/В3. Заметим, что в эксперименте обычно измеряется среднемассовый радиус аэрозолей, *rm*. Справедливо соотношение: .

Пользователь может задать источник 2 со спектром в виде функции с логнормальным распределением или в табличном виде (произвольное распределение).

Число частиц отисточника в размерном классе *l* определяется определяется как скорость ввода массы частиц всех веществ с размером в интервале [*χl, χl+1*], отнесенная к произведению эффективной плотности материала частиц аэрозоля *ρ* и представительного размера частиц группы :

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.83) |

где

.

В текущей версии ПРОФИТа  является параметром модели, который задает пользователь во входном файле. По умолчанию устанавливается значение, равное 4000 кг/м3.

Заметим, что при смешении частиц разного химического состава в объеме (от источника, в результате переноса, нуклеации, конденсации, уноса с поверхности) моделируется изменение химического состава частиц всех размерных групп. Это - следствие однокомпонентного приближения.

### Поверхность осаждения и ее свойств

В модуле ПРОФИТ поверхности осаждения в каждой ячейке делятся на три типа:

* нижние горизонтальные поверхности;
* верхние горизонтальные поверхности;
* боковые вертикальные поверхности.

Площадь поверхности каждого типа в ячейке рассчитывается на основе следующих допущений:

* суммарная площадь поверхностей осаждения в ячейке равна суммарной площади поверхности тепловых элементов;
* каждый тепловой элемент имеет цилиндрическую геометрию;
* тепловой элемент, угол наклона которого по отношению к оси ячейки не превышает 45о, считается горизонтальным, в противном же случае он считается вертикальным.

Для горизонтальных тепловых элементов площади верхней и нижней поверхностей осаждения рассчитываются как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.84) |

где  - радиус теплового элемента (м),  - длина теплового элемента в ячейке (м),  - кратность теплового элемента, i -индекс ячейки. Площадь боковых поверхностей осаждения при этом равна

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.85) |

В случае же вертикального теплового элемента площади горизонтальных (верхних и нижних) и вертикальных поверхностей определяются как

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.86) |
| . | (1.87) |

Следует отметить, что модуль ПРОФИТ позволяет задать дополнительные площади осаждения во входном файле (нижние, верхние или горизонтальные). При этом температура данных поверхностей в каждый момент времени предполагается равной температуре парогазовой среды (в противном случае данные поверхности должны учитываться также и в теплогидравлическом расчете, а потому должны задаваться в виде тепловых элементов).

Предполагается, что каждая поверхность является сухой, с одинаковой интенсивностью адсорбирующей ПД, при этом площадь поверхности осаждения одинакова для всех процессов (осаждения аэрозолей, конденсации паров, адсорбции). Кроме того, используется допущение о том, что площадь поверхности не изменяется по мере накопления на ней слоя отложений ПД.

В [86] предложена корреляция для вычисления площади осаждения в гибе на основании экспериментальных данных в широком диапазоне числа Рейнольдса 100<Re<10000 с числа Рейнольдса при стоксовом обтекании частицы в диапазоне 0,6≤Rep≤3,9 при ламинарном режиме течения и в диапазоне 1,3≤Rep≤12,7 для турбулентного потока.

### Моделирование отложений на поверхностях

В модуле ПРОФИТ реализованы два подхода к моделированию процессов поведения отложений:

* базовый подход к моделированию формирования отложений за счет процессов конденсации, осаждения аэрозолей, адсорбции паров ПД;
* модель изменения толщины слоя отложений за счет повторного уноса.

#### Базовый подход к моделированию формирования отложений на поверхностях конструкционных элементов контура

В основе данного подхода лежит допущение о том, что процессы формирования отложений за счет различных физических процессов (конденсации, осаждения аэрозолей, адсорбции) не оказывают влияния друг на друга. В рамках данного допущения каждый из рассматриваемых физических процессов формирует на стальных стенках слой отложений пренебрежимо малой толщины и известной массы (полученной в ходе решения задачи массопереноса). Масса слоя отложений, образованного за счет процесса конденсации паров ПД, может уменьшаться за счет повторного испарения ПД, уменьшение же массы осажденных аэрозолей (если модель повторного уноса не используется) и адсорбированных ПД модулем ПРОФИТ не моделируется.

#### Моделирование отложений на поверхностях при моделировании повторного уноса аэрозолей

Рассмотрим динамику слоя, осажденного на поверхности со средним расстоянием a между неоднородностями. При этом силы взаимодействия между частицей и поверхностью характеризовались поверхностной энергией адгезии.

Можно обобщить изложенные в модели «повторное взвешивание» результаты на случай уноса частицы с поверхности слоя подобных ей частиц, предположив, что в этом случае роль параметра неоднородности начинает играть некий эффективный размер, характеризующий спектр частиц из верхней части осажденного слоя, а силы адгезии уступают место силам когезии.

Для описания осажденного слоя его удобно разбить на два подслоя: верхний и нижний. Верхний — «свободный» подслой — содержит частицы, которые могут быть унесены потоком. К частицам нижнего «засыпанного» подслоя поток не имеет свободного доступа, и они не могут быть унесены в данный момент времени.

Обозначим за *ρ* суммарную по всем размерам плотность частиц в осажденном слое:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.88) |

где:

k - индекс, нумерующий размер частиц:

ρk - плотность частиц соответствующего размера в осажденном слое, кг/м3.

Заметим, что в коде СОКРАТ/В3 плотность всех аэрозолей одинакова и являетя входным параметром задачи.

В [83] предполагается, что поскольку коэффициент объемной «упаковки» (т.е., отношение суммарного объема некоторого числа частиц к объему вмещающей их части пространства) одинаковых сферических частиц есть не зависящая от их размера величина, то, можно предположить, что и коэффициент совместной упаковки набора частиц c некоторым распределением по размерам не будет зависеть от вида этого распределения.

Тогда суммарная плотность частиц в слое  есть величина постоянная и для приращения высоты всего осажденного слоя  за промежуток времени  можно написать выражение:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.89) |

где:  — скорость уноса частиц, 1/с;  — поверхностная плотность частиц в свободном подслое, кг/м2;  — скорость осаждения частиц, м/с;  — массовая концентрация частиц в потоке над осажденным слоем, кг/м3;

Приращение поверхностной плотности частиц определенного размера в свободном подслое за промежуток времени  может быть записано в виде:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.90) |

где  есть приращение толщины свободного подслоя.

Можно предположить, что свободный подслой имеет толщину порядка размера частиц, представленных в нем в наибольшем количестве (размера, соответствующего максимуму кривой плотности распределения частиц по размерам).

При численном решении уравнения (1.90) используются следующие предположения:

* толщина свободного подслоя «постоянна», т.е. ее приращение за временной шаг мало по сравнению с приращением толщины всего осажденного слоя.
* силы адгезии и когезии не различаются по величине.
* дифференциальные уравнения (1.88) и (1.89) численно решаются методом Эйлера.

Поступление частиц в парогазовую фазу за счет уноса с поверхности в уравнении (А) учитывается в источниковом члене S.

## Общая архитектура

### Взаимодействие модуля ПРОФИТ с другими модулями

На основании вышеприведенных моделей и подходов был разработан модуль ПРОФИТ, в котором рассчитывается поведение ПД в первом и/или втором контурах ЯЭУ.

Для каждой гидравлической ячейки хранится информация о нуклидном составе находящихся в ней продуктов деления, количестве и распределении по размерам аэрозольных частиц. Связь модуля ПРОФИТ с остальными модулями кода СОКРАТ/В3 осуществляется с помощью алгоритма, описанного в разделе **Ошибка! Источник ссылки не найден.**.

Ввиду необходимости частого (на каждом шаге расчета тепло-гидравлических параметров) обмена большим количеством данных (характеристики теплоносителя, нуклидный и аэрозольный состав) модуль переноса продуктов деления реализован как один из внутренних блоков РК. Модуль ПРОФИТ рассчитывает поведение продуктов деления в одной гидравлической ячейке.

Из модуля РАТЕГ в модуль ПРОФИТ передается следующая информация:

* Параметры контрольных объемов:
* задаваемый модулем РАТЕГ временной шаг;
* температура среды в гидравлической ячейке;
* величина объема контрольного объема;
* длина (протяженность) контрольного объема вдоль линии тока;
* высота контрольного объема, равная длине для вертикальных ячеек и диаметру для горизонтальных;
* площадь проходного сечения;
* тепловые структуры в данном контрольном объеме;
* температуры поверхностей тепловых элементов (твёрдых тел);
* гидравлические диаметры тепловых элементов;
* длина потокового пути вдоль тепловой структуры;
* площадь поверхности тепловой структуры, которая обращена вверх;
* площадь поверхности тепловой структуры, которая обращена вниз;
* площадь поверхности тепловой структуры, которая ориентирована вертикально;
* динамическая вязкость среды вдоль тепловой структуры в контрольном объеме;
* кинематическая вязкость среды вдоль тепловой структуры в контрольном объеме;
* плотность среды в гидравлической ячейке;
* коэффициент теплоотдачи с поверхности тепловой структуры;
* источники массы летучих форм продуктов деления для каждого из рассматриваемых классов радионуклидов и их состояний;
* источники аэрозолей для каждого из рассматриваемых размерных интервалов.

Перечисленные теплогидравлические параметры контрольных объемов и источники ПД через соответствующие интерфейсы передаются в модуль ПРОФИТ, в котором моделируется поведение ПД в каждой гидравлической ячейки.

Из модуля ПРОФИТ в модули кода СОКРАТ/В3 передаются массы ПД и КМ в шести состояниях в каждой гидравлической ячейке. Передача осуществляется с помощью двумерных массивов: X\_GS и X\_GS\_1, которые содержат массы ПД, КМ и функцию распределения аэрозолей на (n-1)-ом и n-ом временных шагах, соответственно.

Список литературы

1. L. Bolshov, V. Strizhov. "SOCRAT — The System of Codes for Realistic Analysis of Severe Accidents", Proceedings of ICAPP’06Reno, NV USA, June 4–8, 2006, Paper 6439.
2. А.Е. Киселев, В.Ф. Стрижов, В.В. Безлепкин и др. "Верификационный отчет базовой версии расчетного комплекса СОКРАТ/В1". Отчет ИБРАЭ РАН № 248-08, 2008.
3. "Аттестационный паспорт программного средства "Расчетный код СОКРАТ/В1", № 275 от 13.05.2010.
4. "Инструкция об организации проведения экспертизы программных средств, применяемых при обосновании и (или) обеспечении безопасности объектов использования атомной энергии", РД-03-33-2008. Утверждена приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 19 августа 2008 г. № 634. Введена в действие с 1 сентября 2008 г.
5. MS ISO-10645-92. Calculation of the decay heat power in nuclear fuels in light water reactors.
6. В.И. Тарасов, "Пакет БОНУС 1.2 Наработка радионуклидов в реакторах на тепловых нейтронах. Руководство пользователя". Отчет ИБРАЭ РАН, NSI–SARR–137–2002.
7. А. С. Герасимов, Т. С. Зарицкая, А. П. Рудик. Справочник по образованию нуклидов в ядерных реакторах. М.: Энергоатомиздат, 1989.
8. А. В. Аввакумов, А. Е. Киселев, Е. Ф. Митенкова, В. Ф. Стрижов, В. И. Тарасов, С. В. Цаун , В. В. Безлепкин, И. А. Потапов, А. С. Фролов. Верификация модуля БОНУС в составе интегрального кода СОКРАТ. Атомная энергия, т. 250, (2009) 250‑257.
9. А. Е. Киселев, В. И. Тарасов, С. В. Цаун. Верификация обновленного модуля наработки расчета продуктов деления в составе отраслевого кода СОКРАТ. Атомная Энергия, №113, том  6, 2013.
10. В.И. Тарасов. Моделирование диффузионного выхода радиоактивных продуктов деления из топлива UO2 , Атомная Энергия 106 (2009), 319‑328.
11. P. Garcia, A. Boulore, Y. Guerin, M. Trotabas, P. Goeuriot, In-Pile Densification of MOX Fuels in Relation to their Initial Microstructure, Proceedings of the Light Water Reactor.
12. C.T. Walker, T. Kameyama, S. Kitijma, M. Kinoshita, J. Nucl. Mater. 188 (1992) 73.
13. K. Nogita and K. Une, “Radiation-induced microstructural change in high burnup UO2 fuel pellets”, Nucl. Instruments and Meth. In Physics Research B91, pp 301-306, 1994.
14. J. Spino, K. Vennix, M. Coquerelle, J. Nucl. Mater. 231 (1996) 179.
15. I.L.F. Ray, Hj. Matzke, H.A. Thiele, M. Kinoshita, J. Nucl. Mater. 245 (1997) 115.
16. M.E. Cunningham, M.D. Freshley and D.D. Lanning, “Development and characteristics of the rim region in high burnup UO2 fuel pellets”, J. Nucl. Mat. 188 (1992) 19.
17. Fuel Performance Conference, April 10-13, Park City, USA, p. 679 (Oral Presentations), 2000.
18. P. Cook, R. Stratton, C.T. Walker, Post Irradiation Examination of BNFL MOX Fuel, Proceedings of the Light Water Reactor Fuel Performance Conference, April 10-13, Park City, USA, p. 653 (Oral Presentations), 2000.
19. H. Kleykamp, Post-irradiation studies on LWR-MOX fuel fabricated by the optimized co-milling process, J. Nucl. Mater. 324 (2004) 198–202.
20. Blanpain, P., Brunel, L., Thibault, X., and Trotabas, M., 2000. MOX fuel performance in the French PWRs: status and development, Proc. ANS Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance, Park City, Utah, April 10-13.
21. L.O. Jernkvist, A.R. Massih, A.R., Models for fuel rod behaviour at high burnup, Swedish Nuclear Power Inspectorate (SKI) research report 2005:41, December 2004.
22. L. O. Jernkvist, A model for fission gas release from mixed oxide nuclear fuel, SKI Report 2008:30, 2007.
23. T.R. England, B.F. Rider. Thermal Neutron Induced Fission Decay, LA-UR-94-3106,ENDF-349
24. В.М. Колобашкин, П.М. Рубцов, В.Д. Ружанский, В.Д. Сидоренко "Радиационные характеристики облученного ядерного топлива: Справочник", Энергоатомиздат, 1983.
25. Ю.Г. Дегальцев, Н.Н. Пономарев-Степной, В.Ф. Кузнецов. "Поведение высокотемпературного ядерного топлива при облучении", М., Энергоатомиздат, 1987.
26. M.S. Veshchunov, V.I. Tarasov, An Advanced Model for Grain Face Diffusion Transport in Irradiated UO2 Fuel. Part 1. Model Formulation, J. Nucl. Mater. 392 (2009) 78‑84.,
27. H. Kleykamp. "The chemical state of the fission products in oxide fuels", J. Nucl. Mater., V. 131 (1985), P. 221–246.
28. J. Rest, S.A. Zawadzki. "FASTGRASS, A Mechanistic Model for the Prediction of Xe, I, Cs, Te, Ba and Sr release from Nuclear Fuel under Normal and Severe-Accident Conditions", NUREG/CR-5840 TI92 040783, 1994.
29. T.J. Heames et al. "VICTORIA: A Mechanistic Model of Radionuclide Behavior in the Reactor Coolant System Under Severe Accident Conditions", NUREG/CR-5545 SAND90-0756 Rev 1 R3, R4, 1992.
30. А.В. Бердышев, М.С. Вещунов, В.Д. Озрин и др. "Механистический код "РЕЛИЗ", Руководство пользователя", отчет ИБРАЭ РАН, NSI–SARR–116–2001.
31. M.S. Veshchunov, V.D. Ozrin, V.E. Shestak, V.I. Tarasov, R. Dubourg, G. Nicaise. «Development of mechanistic code MFPR for modelling fission product release from irradiated UO2 fuel», Nuclear Engineering and Design, 206 (2006) 179-200.
32. M.S. Veshchunov, R. Dubourg, V.D. Ozrin, V.E. Shestak, V.I. Tarasov, «Mechanistic modelling of urania fuel evolution and fission product migration during irradiation and heating», Journal of Nuclear Materials, 362 (2007) 327-335.
33. T.B. Lindemer and T.M. Besmann. "Chemical thermodynamic representation of <UO2±x>", J. Nucl. Matter., V. 130 (1985), ), P. 473–488.
34. V.I. Tarasov, M.S. Veshchunov, An Advanced Model for Grain Face Diffusion Transport in Irradiated UO2 Fuel. Part 2. Model Implementation and Validation, J. Nucl. Mater. 392 (2009) 85‑89.
35. V.D. Ozrin. A model for evolution of oxygen potential and stoichiometry deviation in irradiated UO2 fuel. J. Nucl. Mater. 419 (2011) 371–377.
36. H. Kleykamp. "The solubility of selected fission products in UO2 and (U, Pu)O2", J. Nucl. Mater., V. 206 (1993), P. 82–86.
37. S. Imoto. "Chemical state of fission products in irradiated UO2", J. Nucl. Mater., V. 140 (1986), P. 1927.
38. E.H.P. Cordfunke and R.J.M. Konings. "Chemical interactions in water-cooled nuclear fuel: a thermochemical approach", J. Nucl. Mater., V. 152 (1988), P. 301–309.
39. R.G.J. Ball, W.G. Burns, J. Henshaw, M.A. Mignanelli and P.E. Potter. "The chemical constitution of the fuel-clad gap in oxide fuel pins for nuclear reactors", J. Nucl. Mater., V. 167 (1989), P. 191–204.
40. E.H.P. Cordfunke and R.J.M. Konings. "The release of fission products from degraded UO2 fuel: thermochemical aspects", J. Nucl. Mater., V. 201 (1993), P. 57–69.
41. K. Moriyama and H. Furuya. "Thermochemical prediction of chemical form distributions of fission products in LWR oxide fuels irradiated to high burnup", J. Nucl. Sci. and Techn., V. 34 (1997), P. 900–908.
42. W.E. Wang, D.R. Olander and T.B. Lindemer. "Vaporisation thermodynamics of urania-neodymium mixed oxides", J. Nucl. Mater., V. 211 (1994), P. 85–94.
43. Байбуз, В.Ю. Зицерман, Л.М. Голубушкин, У.Г. Чернов. "Химическое равновесие в неидеальных системах", М.: Институт высоких температур, 1985.
44. L.V. Gurvich, I.V. Veitz et al. "Thermodynamic properties of individual substances", Fourth edition in 5 volumes, Hemisphere Publ. Co, NY, L., 1989.
45. L.V. Gurvich, V.S. Iorish et al. "IVTANTHERMO — A Thermodynamic Database and Software System for Personal Computer. User's guide", CRC Press, Inc., Boca Raton, 1993.
46. B.J. Lewis, W.T. Thompson, F. Akbari, D.M. Thompson, C. Thurgood, J. Higgs, Thermodynamic and kinetic modeling of fuel oxidation behaviour in operating defective fuel, J. Nucl. Mater. 328 (2004) 180.
47. V.D. Ozrin. A model for evolution of oxygen potential and stoichiometry deviation in irradiated UO2 fuel. J. Nucl. Mater. 419 (2011) 371–377
48. C. Sari and G. Schumacher, Oxygen redistribution in fast reactor oxide fuel, J. Nucl. Mater. 61 (1976) 192–202.
49. J. Abrefah, A.de Aguiar Briad, W. Wang, Y. Khalil, and D.R. Olander, High Temperature Oxidation of UO2 in Steam-Hydrogen Mixtures, J. Nucl. Matter. 208 (1994) 98-110.
50. B.V. Dobrov, V.V. Likhanskii, V.D. Ozrin, A.A. Solodov, M.P. Kissane and H. Manenc, Kinetics of UO2 oxidation in steam atmosphere, J. Nucl. Matter. 255 (1998) 59.
51. W.R. Smith. in "Theoretical Chemistry, Advances and Perspectives", V. 5, N.Y., Academic Press, 1979.
52. Методические указания по определению выхода радиоактивных продуктов из твэлов и за пределы первого контура при нормальной эксплуатации и при авариях. Правила и нормы в атомной энергетике. Приложение III: Методика расчета активности продуктов деления в теплоносителе КМПЦ и в сдувках с эжекторов реактора типа РБМК. Вторая редакция. ИАЭ им. И.В. Курчатова, М., 1987.
53. Reid and Thomas. The properties of gases and liquids. MacGraw Hill, 1966.
54. S.R. Brinkley. "Calculation of equilibrium of system of many constituents", J. Chem. Phys. V. 15 (1947), P. 107–110.
55. К. Флетчер. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Том 2. Методы расчета различных течений. М., Мир, 1991.
56. В.В. Коняшов, А.М. Краснов. Методика расчета выхода радиоактивных газообразных продуктов деления из-под оболочки дефектного твэла в теплоноситель водоохлаждаемого реактора. Димитровград, 1993.
57. П. Райст. Аэрозоли. Введение в теорию. М.,Мир, 1987, 279 с.
58. Talbot L., Cheng R.K., Schefer R.W., Willis D.R., "Termophoretic deposition of small particles in a direct numerical simulation of turbulent channel flow", Int. J. Heat and Mass Transfer., 1998, V. 41, P. 4167–4182.
59. Clift R., Grace J.R, Weber M.E. Bubbles, drops and particles. N.Y., Academic Press, 1978.
60. Talbot L., Cheng R.K., Schefer R.W., Willis D.R. "Thermophoresis of particles in a heated boundary layer", J. Fluid Mech., V. 101, 1980, P. 737−758.
61. Saffman P.G., Turner J.S. 1956. On the collision of drops in turbulent clouds. J.Fluid Mech., Vol. 1, Pt 1, P. 16–30.
62. Jordan H. And Kuhlman M.R. TRAP-MELT2 User’s Manual, BMI-2124, NUREG/CR-4205 (May 1985).
63. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric chemistry and physics. Wiley 2006, New Jersey, p. 1213.
64. Perry’s chemical engineers of gases. 6th edition MacGraw Hill, 1984.
65. Genco J.M., Berry W.E., Rosenberg H.S., Morrison D.L., Fission Product Deposition and Its Enhancement under Reactor Accident Conditions: Deposition on Primary-System Surfaces, Buttelle Columbus Laboratories No. BMI – 1863, March, 1969.
66. Elrick R.M., Sallach R.A., Fission Product Chemistry in the Primary System, Proceedings of the International Meeting on Light Water Reactor Severe Accidents Evaluation, Vol.1, p4.6-1, 4.6-5, ANS publication number 700085.
67. Sallach R.A., Greenholt C.G., Taig A.R., Chemical Interactions of Tellurium Vapors with Reactor Materials, UREG/CR-2921, Sandia National Laboratories No.SAND82-1145, 1983.
68. Zaichik L.I., Drobyshevsky N.I., Filippov A.S., Mukin R.V., Strizhov V.F. A diffusion-inertia model for predicting dispersion and deposition of low-inertia particles in turbulent flows. International Journal of Heat and Mass Transfer, V. 53(2010), P. 154–162.
69. Williams M.R., Loyalka S.K. Aerosol science. Theory and practice. Pergamon Press, Oxford, 1991, p. 446.
70. Gelbard F., Tambour Y., Seifeld J.H. Sectional Representations for Simulating Aerosol Dynamics. Journal of Colloid and Interface Science. V. 76. N2. 1980, P. 541–556.
71. S. Hellmann, F. Funke, G.-U. Greger, A. Bleier, W. Morell. The Reaction between Iodine and Organic Coatings under Severe PWR Accident Conditions — An Experimental Parameter Study Proceedings of the Fourth CSNI Workshop on the Chemistry of Iodine in Reactor Safety, June 10–12, WCjrelingen, Switzerland (1996), P. 367–384
72. F. Funke, G.-U. Greger, S. Hellmann, A. Bleier, W. Morell. Iodine-steel Reactions under Severe Accident Conditions in Light-water Reactors. Nuclear Engineering and Design 166, P. 357–365 (1996).
73. D. Jacquemain, Ch. Poletiko. Point sur les Modeles Physico-chimiques Utilises dans le Code IODE Validation et Developpements Futurs Note Technique IPSN/DRS/SEMAR 96/67 (1996).
74. G. Benezech, J. Cerf, M. Lucas, R. Ventre, J. Dufresne. Piegeage de l'iode par les Surfaces (Peintures, Beton, Acier). Note Technique SASC 89/736 (1989).
75. J.M. Coulson, J.F. Richardson Chemical Engineering, vol. 1 Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer. Pergamon Press, 2nd Edition/
76. Reynolds A.B. et al., "Role of surface vaporization in low-volatile fission product release experiments", Nucl. Technol. 74 (1986) 76.
77. Lewis B.J., et al. "Low volatile fission product release and fuel volatilization during severe accident conditions". J. Nucl. Mater. 252 (1998) 235.
78. Bird R.B., et al., "Transport phenomena", John Wiley & Sons, NY (1960).
79. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М., Наука, 1986.
80. Reeks M.W., Hall D. Kinetic models for particle resuspension in turbulent flows: Theory and measurement. Journal of Aerosol Science, 2001, 32, 1–31.
81. S. Asakawa S. and G. Jimbo G. Measurement of Adhesion Force of Powder Particles to Solid Surfaces by Centrifugal Method. J. Soc. Material Sci. Jpn. 1967, 16, 385–363.
82. Zimon A.D. Adhesion of dust and powder. 2nd ed. Consultants Bureau, New York, 1982, 9–24.
83. Reeks M.W., Reed J. and Hall D. On the resuspension of small particles by a turbulent flow. J. Phys. D: Appl. Phys. 1988, 21, 574–589.
84. H.Y. Wen, G. Kasper. On the kinetics of particle reentrainment from surfaces. Aerosol Sci. 1989, 20, 483–498.
85. Baisi L., de los Reyes A., Reeks M.W., de Santi G.F. Use of a simple model for the interpretation of experimental data on particle resuspension in turbulent flow. J. Aerosol Sci., 2001, 32, 1175–1200.
86. Pui D.Y., Romay-Novas F., and Lui B.Y. Experimental Study of Partile Deposition in Bends of Circular Cross Section, Aerosol Science and Technology, 7 (1987) 301.
87. I. Langmuir , J. Amer. Chem. Soc. 35 (1913) 931
88. Хабенский В.Б., Бешта С.В., Крушинов Е.В и др. Оценка аварийного выброса на внекорпусной стадии тяжелой аварии. Итоговый отчет по задаче 2 проекта МНТЦ № 3345 EVAN, Сосновый Бор, 2007
89. Kukhtevich I.V., Bezlepkin V.V.,Granovskii V.S., et al., “The Concept of Localization of the Corium Melt in the Ex-vessel Stage of a Severe Accident at a Nuclear Power Station with a VVER-1000 Reactor”, Thermal Engineering, v. 48, 9, p. 699-707 (2001). 572
90. Asmolov V.G., Bechta S.V., Berkovich V.M., et al., “Crucibletype Core Catcher for VVER-1000 Reactor”, Proc. of ICAPP’05, Seoul, Korea, May 15-19, 2005, Paper 5328 (2005).
91. Кухтевич И.В., Безлепкин В.В., Грановский B.C., Хабенский В.Б., Асмолов В.Г., Бешта С.В., Сидоров А.С, Беркович В.М., Стрижов В.Ф., Хуа Минчан, Рогов М.Ф., Новак В.П. Концепция локализации расплава кориума на внекорпусной стадии запроектной аварии АЭС с ВВЭР-1000 // Научно-практический семинар "Вопросы безопасности АЭС с ВВЭР", С-Петербург, 12-14 сентября 2000 г.
92. Sidorov A.S., Nedorezov A.B., Rogov M.F. et al., “The Device for Core Melt Localization at the Tyan’van Nuclear Power Station with a VVER-1000 Reactor”, Thermal Engineering, v. 48, 9, p. 707 (2001).
93. Обоснование эффективности устройства локализации расплава при тяжелой аварии Тяньваньской АЭС с ВВЭР-1000. Материалы совещания. СПб. 2001
94. Филиппов А.С., Дробышевский Н.И., Киселёв А.Е., Стрижов В.Ф. Расчёт термодеформирования корпуса реактора с расплавом с помощью кода HEFEST-M. Известия РАН, Энергетика, 6, 2010 cтр. 92-104.
95. Филиппов А.С., Дробышевский Н.И., Киселёв А.Е., Стрижов В.Ф., Фокин А.Л. СОКРАТ/HEFEST: модели взаимодействия расплава активной зоны ВВЭР с конструкциями реактора при тяжёлой аварии. Известия РАН, Энергетика, 3, 2010, cтр.4-24
96. Озрин В.Д., Тарасов О.В., Стрижов В.Ф., Филиппов А.С. Модель для расчёта состава и плотности расплава активной зоны водо−водяного реактора при тяжёлой аварии. Известия РАН, Энергетика, 3, 2010, cтр. 25-42
97. Мосунова Н.А., Стрижов В.Ф., Филиппов А.C. Моделирование расплава в корпусе ВВЭР в коде СОКРАТ/HEFEST. Известия РАН, Энергетика, 3, 2010, cтр. 43-63
98. V.D. Ozrin, V.I. Tarasov, A.S. Filippov, E.V. Moiseenko, O.V. Tarasov. Distribution of fission product residual decay heat in stratified core melt of LWR and its influence on sidewall heat flux. // Nucl. Eng. Des. 261 (2013) 107-115
99. M. T. Farmer, S. Lomperski, D. J. Kilsdonk, and R. W. Aeschlimann. OECD MCCI-2 Project. Final Report. Rev. 1-Final. November 2010
100. Hans-Josef Allelein et al. State-Of-The-Art Report On Nuclear Aerosols. NEA/CSNI/R(2009)5. Р. 87
101. Грановский В.С. и др. "Теоретическое и экспериментальное исследование пленочного кипения на горизонтальной поверхности", ТВТ, 1995, т. 33, №5, с. 765-772.
102. D.R.Gardner, D.R.Bradley, CORCON-Mod3: An Integrated Computer Model for Analysis of Molten Core-Concrete Interactions. Users manual. NUREG/CR-5843, SAND92-0167, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 87185,1993.
103. Мучник Г.Ф., Рубашов И.Б. Методы теории теплообмена. Тепловое излучение. М., 1974.
104. Зигель Р., Хауэлл Дж., "Теплообмен излучением", М.:Мир, 1975.
105. С.Кутателадзе. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справочное пособие. М., 1990.
106. Hargman Donald L., REMPE Joy L. Corium oxidation at temperatures above 2000 K. // Nuclear technology, 2001, vol. 133, no2, pp. 194-212
107. D.R.Gardner, D.R.Bradley, CORCON-Mod3: An Integrated Computer Model for Analysis of Molten Core-Concrete Interactions. Users manual. NUREG/CR-5843, SAND92-0167, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 87185,1993.
108. Davidson, J.F., and B.O.G. Schuler, Trans. Ist. Chem. Eng., Vol. 38, p.144, 335, 1960.
109. K.L Johnson, K. Kendall and A.D. Roberts. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids. Proceedings of the Royal Society, London Series A, 8 September 1971, vol. 324, no. 1558, 301–313.
110. Clift, R., J.R. Grace, and M.E. Weber, Bubbles, Drops, and Particles (New York: Academic Press, 1978).
111. Mendelson, H.D., Journal of the American of Chemical Engineering, Vol. 13, p. 250, 1967
112. Ziemniak, S. E., "A Study of Interfacial Resistance to Mass Transfer at High Evaporation Rates," Diss., Rennesselaer Polytechnic Institute, 1968.
113. Scheibel, E. G., "Physical Chemistry in Chemical Engineering," Ind. Eng. Chem., Vol. 46, p. 2007, 1954, Wilke, C. R., and P. Chang, "Correlations of Diffusion Coefficients in Dilute Solutions," AICHE Journal, Vol. 1, p. 264, 1955.
114. Singh, P. C., and S. Singh, "Development of a New Correlation for Binary Gas Phase Diffusion Coefficients," International Commission on Heat Mass Transfer, Vol. 10, p. 123, 1983.
115. Бешта С. В., Хабенский В. Б., Крушинов Е. В., Витоль С.А., Грановский В.С., Сулацкий А.А.. Кипение воды на поверхности оксидного расплава кориума в условиях тяжелой аварии ВВЭР // Вопросы безопасности АЭС с ВВЭР. Труды научно-практического семинара, Санкт-Петербург, 12-14 сентября 2000 г., с. 269.
116. IAEA SRS No. 56, Approaches and Tools for Severe Accident Analysis for Nuclear Power Plants, 2008.
117. STATE-OF-THE-ART REPORT ON NUCLEAR AEROSOLS, NEA/CSNI/R(2009)5.
118. Girshik S. L., Chiu C.-P. Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor. J. Chem. Phys., 93, 1273-1277, 1990.
119. Пискунов В.Н. Динамика аэрозолей. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 296 с.
120. Kirillov P.L., Terentieva M.I., Deniskina N.B. Thermophysical properties of materials for nuclear engineering. - M.: IzdAT, 2007. - 200 P.
121. Pruppacher H. R., Klett J. D. Microphysics of Clouds and Precipitation. Kluver Academc Publishers, New Mexico, USA.
122. ААА Gormley, P. G., and Kennedy, M. (1949). Diffusion from a Stream Flowing Through a Cylindrical Tube, Proc. Royal Irish Acad. 52:163–169.
123. L.J.M. SNEPVANGERS, J.F. VAN DE VATE, DIFFUSIOPHORESIS OF FISSION PRODUCT, AEROSOL IN AN LWR CONTAINMENT AFTER CORE MELTDOWN, Report EUR 11376 EN, 1988.
124. Деревич И.В., Зайчик Л.И. 1988. Влияние термофореза на осаждение броуновских частиц в канале. Теплофизика высоких температур. Т. 26. № 1. С. 137146.
125. Сполдинг Д.Б. 1965. Конвективный массоперенос. М.: Энергия. 384 с.
126. Ерошенко В.М., Зайчик Л.И. 1984. Гидродинамика и тепломассообмен на проницаемых поверхностях. М.: Наука. 275 с.
127. F. Cousin, ASTEC V2 SOPHAEROS module. Theoretical manual. ASTEC-V2/DOC/09-09, DPAM-SEMIC-2009-181, 2009.
128. Cussler E.L. Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems. - 3nd ed./Cambridge university press. 2007. 655 p.
129. The properties of gases and liquids. 5th edition MacGraw Hill, 2001.
130. N.E. Bixler, VICTORIA 2.0: A mechanistic model for radionuclide behavior in nuclear reactor coolant system under severe accident conditions, Report SAND93-2301, 1998.
131. ГССД 112-87. Литий, натрий, калий, рубидий, цезий. Давление насыщенных паров при высоких температурах. Введ. 1987-11-17. М.: Гос. комитет СССР по стандартам, 1987. 21 с.
132. L. S. Brooks, “The vapor pressures of tellurium and selenium,” J. Am. Chem. Soc.,74, No. 1, 227–229 (1952)
133. Yaws C.L.: „Handbook of vapor pressure, Volume 4: Inorganic compounds and elements “ 348 pp, Gulf, Houston 1995.
134. Dean, John A., and Norbert Adolph Lange. 1999. *Lange's handbook of chemistry*. New York: McGraw-Hill.
135. Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., Transport Phenomena, Wiley International Edition, 1960.
136. Seinfeld J. Y., Pandis S.N. Atmospheric Chemistry and Physics. Wiley, New York, 1998.
137. Идельчик И. Е. Справочник по гидравлическим сопротивлениям, М: Машиностроение, 1992.