**Содержание**

[1 Модуль CONTFP 2](#_Toc471642052)

[1.1 Постановка задачи 2](#_Toc471642053)

[1.2 Общее описание 2](#_Toc471642054)

[1.3 Математическая модель 2](#_Toc471642055)

[1.3.1 Основные предположения и допущения модели CONTFP 2](#_Toc471642056)

[1.3.2 Моделируемые химические соединения и элементы 3](#_Toc471642057)

[1.3.3 Поведение ПД в ЗО 3](#_Toc471642058)

[1.3.4 Основные параметры физических моделей 5](#_Toc471642059)

[1.3.5 Коэффициент захвата частиц поверхностью 5](#_Toc471642060)

[1.3.6 Динамическая скорость при турбулентном течении 5](#_Toc471642061)

[1.3.7 Скорость диссипации турбулентной энергии **Ошибка! Закладка не определена.**](#_Toc471642062)

[1.3.8 Осаждение ПД в ЗО 6](#_Toc471642063)

[1.3.9 Осаждение ПД при турбофорезе 6](#_Toc471642064)

[1.3.10 Осаждение ПД под действием термофореза 6](#_Toc471642065)

[1.3.11 Осажение ПД при диффузиофорезе 7](#_Toc471642066)

[1.3.12 Поведение паров ПД 8](#_Toc471642067)

[1.3.12.1 Расчет предельной объемной концентрации насыщенных паров ПД **Ошибка! Закладка не определена.**](#_Toc471642068)

[1.3.12.2 Адсорбция ПД **Ошибка! Закладка не определена.**](#_Toc471642069)

[1.4 Численная схема и ее реализация 8](#_Toc471642070)

[1.4.1 Перенос паров и аэрозолей 8](#_Toc471642071)

[1.4.2 Поведение аэрозолей в ячейке 9](#_Toc471642072)

[1.4.3 Поведение паров продуктов деления в ячейке 9](#_Toc471642073)

[1.4.4 Поверхность осаждения и ее свойств (сухая-мокрая, дырявая, угол по отношению к гравитации, площадь, материал..) 9](#_Toc471642074)

[1.4.5 Моделирование отложений на поверхностях (как делаем отложения, что храним в памяти – массы, размерные группы, хим соедниения, плотнотси?,… 9](#_Toc471642075)

[1.5 Общая архитектура 9](#_Toc471642076)

[1.5.1 Взаимодействие модуля CONTFP с другими модулями 9](#_Toc471642077)

# Модуль CONTFP

## Постановка задачи

На внекорпусной фазе тяжёлой аварии радиоактивные вещества, вышедшие из первого контура РУ (через течь или барботер), поступают в объём защитной оболочки преимущественно в виде аэрозолей. В защитной оболочке соединения йода могут менять физико-химические формы и фазовое состояние. Аэрозоли могут осаждаться на поверхностях стен (с дополнительными опциями «сухо», «окрашено», «пленка конденсата», «водная поверхность (приямки и бассейн выдержки)).Рассчитывается утечка массы и активности радиоактивных газов, паров и взвешенных аэрозолей через неплотности в окружающую среду.

## Общее описание

В коде СОКРАТ/В3 численное моделирование поведения ПД в ЗОна внекорпусной фазе тяжелой запроектной аварии выполняется при помощи модуля CONTFP. Моделируются следующие явления:

- перенос благородных газов, паров и частиц по помещениям ЗО и выход в окружающую среду;

- конденсация и испарение молекулярного йода на поверхности стен и частиц;

-осаждение аэрозольных частиц за счет гравитации, турбофореза, диффузиофореза и термофореза, диффузионное осаждение в турбулентном потокена поверхности стенок;

- адcорбция йода (опционно);

- переход ПД на одну из стен (пол с признаком «жидкость», возможно кроме S у жидкости может быть параметр «объем») в результате работы спринклерной системы;

- гравитационный перенос аэрозолей между помещениями ЗО.

## Математическая модель

### Основные предположения и допущения модели CONTFP

Модель CONTFP построена на следующих основных предположениях и допущениях:

1. Моделируется выход в защитную оболочку18различных химических элементов и соединений (веществ);
2. Все химические элементы и соединения делятся на 3 группы – благородные газы, пары и аэрозоли.
3. Элементы из групп пары и аэрозоли могут существовать в 3 основных состояниях (и четырех дополнительных в зависимости от типа «стенки»):

состояние 1 (в объеме) –пар (молекулярный йод и может что-то еще) в атмосфере ЗО;

состояние 2 (в объеме) - частицы в атмосфере ЗО (аэрозоль);

состояние 3 (на поверхности) - пар и частицы, осевшие на поверхности не взаимодействующих стен, покрашенных стен, конденсатной пленке, и перешедшие в через «водную поверхность» в водную фазу.

1. Аэрозоль рассматривается монодисперсном приближении единого химического состава, т.е. моделируется 18 различных частиц, основным уравнением для описания поведения такого аэрозоля является уравнение переноса массы каждого вещества.
2. Предполагается, что частицы аэрозоля имеют сферическую форму
3. Рассматриваются следующие процессы:

- перенос благородных газов, паров и частиц по помещениям ЗО и выход в окружающую среду;

- конденсация и испарение молекулярного йода на поверхности стен (всех типов) и частиц;

- осаждение аэрозольных частиц за счет гравитации, турбофореза, диффузиофореза и термофореза, диффузионное осаждение в турбулентном потоке на поверхности стенок (всех типов);

- осаждение паров и аэрозолей в результате работы спринклерной системы;

- гравитационный перенос аэрозолей между помещениями ЗО.

- адcорбция йода (опционно);

1. Предполагается постоянная плотность материала частиц;
2. Химические взаимодействия рассчитываются только между соединениями йода (I2,)и лакокрасочными покрытиями.
3. ПД рассматриваются как пассивная примесь, не оказывающая влияние на теплогидравлические процессы.
4. Перемешивание ПД во всем объеме жидкости в системе происходит мгновенно.
5. Предполагается, что не происходит:

- нуклеации паров ПД (постулируется, что пары ПД присутствуют всегда с аэрозолями, на которых может происходить конденсация);

- повторного испарения ПД (кроме иода) с поверхности стенок и частиц;

- перехода ПД из газовой фазы в жидкость при барботаже (опция будет к концу года);

- выхода ПД из жидкости в газовую фазу;

- перенос ПД между помещениями за счет диффузии;

- радиационный распад изотопов ПД (оценки производятся внешней программой);

- сдува осажденных на стенки аэрозолей ПД.

### Моделируемые химические соединения и элементы

Источниками ПД являются вещества, вышедшие из первого контура или при взаимодействии расплав-бетон (процессах в УЛР).В таблице приведены химические соединения, учитываемые в модуле CONTFP.

Таблица .– Химические соединения и элементы, учитываемые (? Или передаваемые – если совпадает с перечнем ПРОФИТ – отметить это обстоятельство специально, если нет – оговорить различия)в модуле CONTFP.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Имя | Химическое соединение\* | Тип | Элементы таблицы Менделеева для расчета активности | Молекулярный вес |
| '#BA' | BaO | аэрозоль | Ba | 137.3 |
| '#CE' | Ce2O3 | аэрозоль | Ce | 140.1 |
| '#CS' | CsOH | аэрозоль | Cs, Rb | 135.9 |
| '#CSI' | CsI | аэрозоль | Cs, I | 135.9+126.9 |
| '#EU' | Eu2O3 | аэрозоль | Eu | 152 |
| '#FU' | UO2 | аэрозоль | U,Pu,Np | 238 |
| '#IG' | I2 | пар | I, Br | 126.9\*2 |
| '#IO' | CH3I | благородныйгаз | I | 126.9+12+3 |
| '#LA' | La2O3 | аэрозоль | La, Pm, Sm, Y | 138.9 |
| '#MO' | Mo | аэрозоль | Mo, Tc, Rh, Pd | 95.9 |
| '#NB' | Nb2O5 | аэрозоль | Nb | 92.9 |
| '#ND' | Nd2O3 | аэрозоль | Nd | 144.2 |
| '#NG' | Xe | благородныйгаз | Xe, Kr | 131.3 |
| '#RU' | RuO2 | аэрозоль | Ru | 101 |
| '#SB' | Sb | аэрозоль | Sb | 121.8 |
| '#SR' | Sr(OH)2 | аэрозоль | Sr | 87.6 |
| '#TE' | TeO2 | аэрозоль | Te, Se, Sn | 127.6 |
| '#ZR' | ZrO2 | аэрозоль | Zr | 91.2 |

\* рассчитывается масса соединения без учета кислорода и водорода

### Поведение ПД в ЗО

В основе модели переноса и поведения ПД в ЗО лежит система уравнений, включающая в себя:

1. уравнение переноса и поведения ПД - благородных газов



где

 - объемная концентрация ПД-благородного газа в объеме, кг/м3;

 - объемная источник ПД-благородного газа в объеме, кг/с/м3;

 - величина рассматриваемого объема, м3;

 - векторная сумма скоростей газа-носителя и частиц на границе объема, м/с;

 - площадь границ объема, м3;

 - (для йодистого метила) источник появления хим. соединения ПД за счет взаимодействия со стенкой;

 - осаждения пд за счет работы спринклерной системы, 1/с.

2. уравнение переноса и поведения ПД в форме паров



где

 - объемная концентрация пара v-го соединения ПД в объеме, кг/м3;

 - объемная концентрация пара v-го соединения ПД в состоянии насыщения у поверхности стенки, кг/м3;

 - скорость конденсации, м/с;

 - скорость химического взаимодействия йода с краской на стенках (нужно индекс только йода здесь указать);

 - убыль пара v-го соединения ПД за счет конденсации на поверхности частиц в объеме, кг/с/м3.

3. уравнение переноса и поведения аэрозольных частиц ПД



где

 - объемная концентрация аэрозольных частиц v-го соединения ПД в объеме, кг/м3;

 - коэффициент осаждения аэрозольных частиц, 1/с.

4. уравнение сохранения массы ПД в жидкости



где

 - суммарная масса химического соединения vв жидкости, кг;

 - суммарный объем газовой фазы в помещениях.

5. уравнение сохранения массы осажденных ПД на стенках



где

 и  - соответственно, поверхностные концентрации осажденных паров и аэрозолей ПД, кг/м2.

Возможно уточнить уравнения с учетом стекания пленки конденсата и переноса ПД в объем «водной поверхности»

Ниже описаны модели, представляющие различные члены этих уравнений.

### Основные параметры физических моделей

#### Время релаксации аэрозольной частицы

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

|  |  |
| --- | --- |
| , , | (.) |

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

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

где *R* - универсальная газовая постоянная, *T* - температура несущей среды, *μf* - молярная масса несущей среды. Отметим, что в описании модуля SOPHAEROS[128] приведено другое (полуэмпирическое) соотношение для длины свободного пробега, но в литературе [119], на которую дана ссылка, этой формулы не найдено (приведена формула (1.2)).

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

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.3) |

В литературе известны различные варианты для констант в (1.3),в модели ПРОФИТ используются, ,  в соответствии с [].

#### Коэффициент броуновской диффузии

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

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.4) |

где

*kB*− постоянная Больцмана, Дж/К

*T*− температура несущей среды, К.

### Коэффициент захвата частиц поверхностью

### Динамическая скорость при турбулентном течении

В модуле CONTFP динамическая скорость при турбулентном течении (используется при определении скорости диффузионного осаждения в турбулентном потоке и при турбофорезе)определяется по формуле [128]:

,

,

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

### Осаждение ПД вЗО

#### 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 []:

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

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

#### **Диффузионное осаждение ПД в турбулентном потоке**

При турбулентном режиме течения  определяется следующим образом [], [128]:

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

где  Sc— число Шмидта,  — коэффициент кинематической вязкости,- 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 []:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.7) |

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 []:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.8) |

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, ϕ1рассчитывается по формуле (1.4).

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

#### 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 VDFравна скорости потока Стефана VS с поправкой *f*W, возникающей из-за дополнительного взаимодействия диффузионных потоков с частицами (столкновений молекул с частицами) [124]:

|  |  |
| --- | --- |
| *V*DF = *V*S∙*f*W, | (1.9) |

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

Поправка *f*Wопределяются следующим образом:

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

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

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

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

Формула (1.10) пригодна как для свободномолекулярного, так и для континуального режимов течения [124].

### Поведение паров ПД

В модуле используется равновесная модель конденсации паров ПД в объеме и на поверхностях конструкционных элементов. В рамках данной модели процесс конденсации рассматривается бесконечно быстрым. В таком приближении соотношение для скорости конденсации на стенках будет иметь вид:



где  - площадь аэрозолей в объеме.

Аналогично выглядит соотношение для объемной конденсации

.

#### Расчет предельной объемной концентрации насыщенных паров ПД

Таблица 1.2. - Корреляции для вычисления давления насыщенных паров ПД

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Хим. соединение ПД | Давление насыщенного пара, Па | Источник |
| I2 |  |  |

#### Адсорбция паров йода

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 I2в зависимости от температуры получена для оценки адсорбируемой массы на поверхностях из нержавеющей стали (SS304).

Скорость адсорбции йода I2 согласно [] равна

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.12) |

где — скорость сорбции (м/с).

### Влияние спринклерной системы

В рамках модели осаждения паров ПД за счет спринклерной системы используются следующие допущения:

1. Характерное время изменение объемной концентрации паров ПД много больше времени падения капли (за время падения капли концентрацию пара ПД можно считать постоянной);

2. Кинетика растворения паров ПД в каплях носит диффузионный характер.

При таких допущениях соотношение для  может быть записано в виде:

, (8.2)

где L — расход водного раствора, подаваемого на форсунки спринклерной системы;

V — объем помещения, где происходит разбрызгивание раствора;

 — эффективный коэффициент растворения паров ПД в объеме капли (определяется в соответствии с рекомендациями, изложенными в Приложении А – перенести сюда);

H(t) — коэффициенты распределения радионуклидов первой и второй группы соответственно, определяемые в соответствии с рекомендациями, изложенными в Приложении Б;

 - время падения капли.

соотношение для  имеет вид

,

где E - эффективность прямого захвата каплями аэрозолей. Для нее

## Численная схема и ее реализация

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

### Перенос паров и аэрозолей

Моделирование транспорта продуктов деления выполняется с использованием нодализации защитной оболочки модуля АНГАР РК СОКРАТ/В3. Предполагается, что перенос благородных газов, 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

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.13) |

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).

В модуле ПРОФИТ используется хорошо известный метод «назад по потоку». В соответствии с данным методом, соотношение (1.75) можно записать в виде:

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.14) |

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

|  |  |
| --- | --- |
| . | (1.15) |

В рамках решения задачи переноса решаются системы уравнений вида (1.77), состоящие из Kуравнений (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.

### Поведение аэрозолей в ячейке

### Поведение паров продуктов деления в ячейке

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

### Моделирование отложений на поверхностях (как делаем отложения, что храним в памяти – массы, размерные группы, химсоедниения, плотнотси?,…

## Общая архитектура

### Взаимодействие модуля CONTFPс другими модулями

Из модуля АНГАР 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.

Списоклитературы

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. InstrumentsandMeth. InPhysicsResearch 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. Lindemerand 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. Olanderand 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 AguiarBriad, 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. Методическиеуказанияпоопределению 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. Davies C.N.. Fundamentals of Aerosol Science. D.T.Shaw. Ed.. Wiley. NewYork (1978)
61. Talbot L., Cheng R.K., Schefer R.W., Willis D.R. "Thermophoresis of particles in a heated boundary layer", J. FluidMech., V. 101, 1980, P. 737−758.
62. 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.
63. Jordan H. And Kuhlman M.R. TRAP-MELT2 User’s Manual, BMI-2124, NUREG/CR-4205 (May 1985).
64. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric chemistry and physics. Wiley 2006, New Jersey, p. 1213.
65. Perry’s chemical engineers of gases. 6th edition MacGraw Hill, 1984.
66. 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.
67. 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.
68. 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.
69. Alipchenkov V.M., Kiselev A.E., Strizhov V.F., Tsaun S.V., Zaichik L.I. Advancement of modeling deposition and coagulation of aerosols in nuclear reactor. Nuclear Engineering and Design, V. 239(2009), P. 641–647.
70. Williams M.R., Loyalka S.K. Aerosol science. Theory and practice. Pergamon Press, Oxford, 1991, p. 446.
71. 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.
72. 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
73. 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).
74. 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).
75. 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).
76. J.M. Coulson, J.F. Richardson Chemical Engineering, vol. 1 Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer. Pergamon Press, 2nd Edition/
77. Reynolds A.B. et al., "Role of surface vaporization in low-volatile fission product release experiments", Nucl. Technol. 74 (1986) 76.
78. Lewis B.J., et al. "Low volatile fission product release and fuel volatilization during severe accident conditions". J. Nucl. Mater. 252 (1998) 235.
79. Bird R.B., et al., "Transport phenomena", John Wiley & Sons, NY (1960).
80. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М., Наука, 1986.
81. Reeks M.W., Hall D. Kinetic models for particle resuspension in turbulent flows: Theory and measurement. Journal of Aerosol Science, 2001, 32, 1–31.
82. 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.
83. Zimon A.D. Adhesion of dust and powder. 2nd ed. Consultants Bureau, New York, 1982, 9–24.
84. 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.
85. H.Y. Wen, G. Kasper. On the kinetics of particle reentrainment from surfaces. Aerosol Sci. 1989, 20, 483–498.
86. 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.
87. 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.
88. I. Langmuir , J. Amer. Chem. Soc. 35 (1913) 931
89. 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
90. 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
91. 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).
92. 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.
93. 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).
94. Обоснование эффективности устройства локализации расплава при тяжелой аварии Тяньваньской АЭС с ВВЭР-1000. Материалы совещания. СПб. 2001
95. 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.
96. 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
97. 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
98. 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
99. 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
100. M. T. Farmer, S. Lomperski, D. J. Kilsdonk, and R. W. Aeschlimann. OECD MCCI-2 Project. Final Report. Rev. 1-Final. November 2010
101. Hans-Josef Allelein et al. State-Of-The-Art Report On Nuclear Aerosols. NEA/CSNI/R(2009)5. Р. 87
102. Грановский В.С. и др. "Теоретическое и экспериментальное исследование пленочного кипения на горизонтальной поверхности", ТВТ, 1995, т. 33, №5, с. 765-772.
103. 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.
104. Мучник Г.Ф., Рубашов И.Б. Методы теории теплообмена. Тепловое излучение. М., 1974.
105. Зигель Р., Хауэлл Дж., "Теплообмен излучением", М.:Мир, 1975.
106. С.Кутателадзе. Теплопередача и гидродинамическое сопротивление: Справочное пособие. М., 1990.
107. Hargman Donald L., REMPE Joy L. Corium oxidation at temperatures above 2000 K. // Nuclear technology, 2001, vol. 133, no2, pp. 194-212
108. 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.
109. Davidson, J.F., and B.O.G. Schuler, Trans. Ist. Chem. Eng., Vol. 38, p.144, 335, 1960.
110. 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.
111. Clift, R., J.R. Grace, and M.E. Weber, Bubbles, Drops, and Particles (New York: Academic Press, 1978).
112. Mendelson, H.D., Journal of the American of Chemical Engineering, Vol. 13, p. 250, 1967
113. Ziemniak, S. E., "A Study of Interfacial Resistance to Mass Transfer at High Evaporation Rates," Diss., Rennesselaer Polytechnic Institute, 1968.
114. 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.
115. 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.
116. 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.
117. IAEA SRS No. 56, Approaches and Tools for Severe Accident Analysis for Nuclear Power Plants, 2008.
118. STATE-OF-THE-ART REPORT ON NUCLEAR AEROSOLS, NEA/CSNI/R(2009)5.
119. 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.
120. Пискунов В.Н. Динамика аэрозолей. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. - 296 с.
121. Kirillov P.L., Terentieva M.I., Deniskina N.B. Thermophysical properties of materials for nuclear engineering. - M.: IzdAT, 2007. - 200 P.
122. Pruppacher H. R., Klett J. D. Microphysics of Clouds and Precipitation. KluverAcademc Publishers, New Mexico, USA.
123. ААА Gormley, P. G., and Kennedy, M. (1949). Diffusion from a Stream Flowing Through a Cylindrical Tube, Proc. Royal Irish Acad. 52:163–169.
124. 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.
125. ДеревичИ.В., ЗайчикЛ.И. 1988. Влияние термофореза на осаждение броуновских частиц в канале. Теплофизика высоких температур. Т. 26. № 1. С. 137146.
126. Сполдинг Д.Б. 1965. Конвективный массоперенос. М.: Энергия. 384 с.
127. Ерошенко В.М., Зайчик Л.И. 1984. Гидродинамика и тепломассообмен на проницаемых поверхностях. М.: Наука. 275 с.
128. F. Cousin, ASTEC V2 SOPHAEROS module. Theoretical manual. ASTEC-V2/DOC/09-09, DPAM-SEMIC-2009-181, 2009.
129. Cussler E.L. Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems. - 3nd ed./Cambridge university press. 2007. 655 p.
130. Wilke C.R. Diffusional properties of multicomponent gases // J.Chem. Eng. Progr. 1950. V.46, No.2 p.95-104.
131. ГССД 112-87. Литий, натрий, калий, рубидий, цезий. Давление насыщенных паров при высоких температурах. Введ. 1987-11-17. М.: Гос. комитетСССРпостандартам, 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. Yamawaki M., Oka T., Yasumoto M. and oth. "Thermodynamics of vaporization of cesium molybdate by means of mass spectrometry", Journal of Nuclear Materials, Vol. 201, pp. 257-260 (1993).
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.

ПРИЛОЖЕНИЕА  
(справочное)  
Расчетэффективностиабсорбцииразличныхлетучихсоединенийиаэрозолейводоразбрызгивающимиибарботажной системами

## А1 Спринклерная система

Процесс поглощения растворимого газообразного соединения каплями спринклерного раствора в общем виде может быть представлен как процесс массопередачи из свободного объема через газовую пленку капли, растворение на поверхности (жидкой пленки) и процесс массопередачи в объем капли.



В рамках допущения о диффузионном характере кинетики данного процесса для расчета эффективного коэффициента массопереноса  можно воспользоваться соотношением вида [А1]



где  - диаметр капли (м),  - скорость диффузионного переноса растворенной примеси в капле к межфазной поверхности (м/с),  - скорость диффузионного переноса паров примеси к поверхности капли в газе (м/с).

Для расчета скоростей диффузионного переноса используются корреляции, рекомендованные в работе [A1]:

,

.

Здесь  - плотность жидкости в капле (кг/м3),  - плотность парогазовой среды в помещении (кг/м3),  - ускорение свободного падения (м/с2),  - кинематическая вязкость парогазовой среды (м2/с),  - число Шмидта,  - коэффициент молекулярной диффузии паров ПД в парогазовой среде (м2/с),  - коэффициент молекулярной диффузии растворенных ПД в капле (м2/с),  - время падения капли (с).

Для расчета величины коэффициента  в работе [A1] предлагается воспользоваться соотношением вида



где  - молярная масса растворенного соединения ПД (кг/моль),  - температура жидкости в капли (К),  - динамическая вязкость жидкости (Па∙с),  - молярный объем хим. соединения ПД (см3/моль).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б  
(справочное)  
Распределение соединений йода между водной и газовой фазами

## Б1 Органические соединения йода (первая группа)

Среди наиболее распространенных органических соединений йода, оказывающих при проектных авариях заметное влияние на радиационную безопасность, йодистый металл (СH3I) является наименее химически активным, т.е. способным вступать в физико-химические реакции. Поэтому, как правило, для описания поведения соединений йода, относящихся к первой группе, в качестве представителя этой группы выбирается CH3I.

Среди известных работ по исследованию коэффициента распределения (H) для CH3I наиболее консервативные (наименьшие) значения H даны в работе [Б1]. Эти значения были экспериментально обоснованы в диапазоне температур от 5 до 70ºС. (Наиболее широкий исследуемый диапазон температур, известных авторам). Наблюдаемые значения хорошо описываются эмпирической функцией, зависящей от температуры, которую предполагается использовать для расчета H:

 (Б1)

где T — температура, К;

H — [моль/л раств./моль/л газа].

## Б2 Неорганические соединения йода (вторая группа)

Как правило, при проектных авариях в качестве представителя неорганических соединений йода рассматривают элементарный йод (I2), который является наименее химически активным соединением этой группы.

*(замечание: в прошлой версии описания я так и не увидел конечной формулы для расчета величины H для молекулярного йода, только некоторые выкладки, на основе которых после некоторых трудозатрат возможно будет построить модель. В связи с этим они заменены на простую корреляцию от температуры, которую использовали американцы)*

Для расчета коэффициента H предлагается использовать корреляцию, представленную в работе [A1]:



Литература

А1 - M.F. Albert The absorption of gaseous iodine by water droplets. A thesis presented for the Master of Science Degree. The University of Tennessee, Knoxville. 1985.