

На правах рукописи

Петров Леонид Витальевич

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИ
ОПАСНЫХ КОНДЕНСАЦИОННЫХ АЭРОЗОЛЕЙ**

Специальность 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Москва – 2026

Работа выполнена в отделе управления аварийными процессами курчатовского комплекса атомной энергетики НИЦ «Курчатовский институт».

Научный руководитель: Корценштейн Наум Моисеевич

доктор технических наук, ведущий научный сотрудник Лаборатории №12. – распределенной генерации ОИВТ РАН

**Официальные
оппоненты:**

Ведущая организация

Защита состоится «___» 2026 г. в ___ часов на заседании диссертационного совета 24.1.193.01 при ОИВТ РАН, расположенном по адресу: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ОИВТ РАН, <https://jiht.ru>

Автореферат разослан «___» 2026 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высыпать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.ф.-м.н

А.В. Тимофеев

Актуальность исследования. Сжигание твердых топлив, таких как энергетические угли, биомасса, твердые бытовые отходы, приводит к выбросу в окружающую среду различных химических соединений, а также выбросу высокодисперсных частиц PM0.1, PM2.5, PM10. Присутствие высокодисперсных частиц в воздушной среде создает серьезную угрозу здоровью людей, в связи с чем концентрация частиц регулируется в большинстве стран мира, устанавливаются предельно допустимые значения. Так содержание экологически опасных субмикронных частиц в воздушной среде подлежит контролю в РФ (Федеральный закон №7-ФЗ «Об охране окружающей среды», СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания»); ограничения на концентрацию частиц класса PM2.5 отражены национальном стандарте качества окружающего воздуха (NAAQS) США; в КНР приоритетом государственной политики стало сокращение атмосферных загрязнений, что отражает план действий по контролю загрязнения воздуха.

Помимо выброса в окружающую среду загрязняющих веществ в ходе плановой эксплуатации энергетических установок, в случае тяжелой аварии на АЭС существует угроза выброса радиоактивных продуктов деления, который приводит к радиационному загрязнению окружающей среды (атмосфера, почва, водоемы, организм человека). В РФ регулирование выбросов радиоактивных продуктов деления в атмосферу при аварийных ситуациях отражены в НП-001-15 «Общие положения обеспечения безопасности атомных станций». Нормативы и правила в России и мире требуют наличия систем безопасности, способных предотвращать и минимизировать выбросы при авариях, а также проведения моделирования тяжелых аварий в реалистическом приближении для планирования мер по защите населения и персонала АЭС. В настоящее время перенос ПД моделируется консервативно без учета перемещения потока пара, газов и аэрозолей ПД в каналах первого контура.

Медицинские исследования показывают, что частицы различного размера отличаются степенью осаждения в дыхательной системе человека и в зависимости от химической природы частиц могут стать причиной различных заболеваний – от астмы до сердечно-сосудистых и онкологических заболеваний. В случае эмиссии субмикронных частиц при сжигании углей опасность представляют как сами частицы, так и конденсация вредных веществ на их поверхности. В случае выброса радиоактивных продуктов деления угрозу также представляет радиоактивное излучение распадающихся изотопов и их накопление в органах и тканях человеческого организма.

Одним из механизмов формирования субмикронных частиц является объемная конденсация паров веществ, образующихся из минеральной части углей в процессе горения в случае эксплуатации угольных ТЭС, а также радиоактивных продуктов деления в случае разгерметизации твэл при тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР. Для сокращения выбросов субмикронных частиц в атмосферу за счет их улавливания фильтрами и для реалистичной оценки выброса радиоактивных продуктов деления с учетом осаждения необходима информация о параметрах конденсационных аэрозолей (концентрация частиц и их распределение по размерам), которую может обеспечить численное моделирование. Качество такого моделирования определяется наличием математической модели адекватной моделируемому явлению.

Цель и задачи исследования

Целью диссертационной работы является создание математической модели образования экологически опасных конденсационных аэрозолей в продуктах сгорания углей и продуктах деления при тяжелых авариях на АЭС с ВВЭР.

Исходя из поставленной цели работы, были сформулированы следующие задачи:

1. Провести сравнительный термодинамический анализ состава продуктов сгорания энергетических углей различных месторождений.

2. Разработать модель образования субмикронных частиц в процессе объемной конденсации в продуктах сгорания углей и алгоритм ее компьютерной реализации.
3. Провести численное моделирование образования субмикронных частиц в продуктах сгорания углей и при переносе паров радиоактивных продуктов деления.
4. Провести анализ влияния запыленности и скорости охлаждения потока продуктов сгорания углей на формирование субмикронных частиц.
5. Провести анализ влияния объемной конденсации паров цезия на рост и осаждение аэрозолей при их переносе.

Научная новизна полученных автором результатов:

1. Впервые проведён сравнительный анализ состава продуктов сгорания 15 энергетических углей с учетом и без учета образования алюмосиликатов.
2. Разработана модель формирования субмикронных частиц в продуктах сгорания энергетических углей на основе гипотезы «замораживания» формирования алюмосиликатов и шлакоудаления и алгоритм ее компьютерной реализации.
3. Получены новые расчетные данные по концентрации и распределению по размерам частиц, образующихся при объемной конденсации паров сульфата калия и сульфата натрия в продуктах сгорания 15 энергетических углей при их охлаждении в технологическом тракте.
4. Предложен критерий для учета влияния гетерогенных центров конденсации и скорости изменения температуры потока на параметры конденсационного аэрозоля.
5. Проведен анализ влияния гомогенно-гетерогенной конденсации газообразных продуктов деления на осаждение аэрозолей в горизонтальном канале.
6. Получены новые расчетные данные по среднему размеру сформировавшихся капель и аэрозольных частиц вдоль оси канала в зоне конденсации при варьируемом значении массовой доли гетерогенных центров конденсации.

Значимость работы. Результаты диссертационной работы использовались при разработке аттестованной в Ростехнадзоре программы для ЭВМ МАВР-ТА, которая активно используется при обосновании безопасности действующих и проектируемых АЭС с ВВЭР в части анализа выхода, переноса и осаждения радиоактивных продуктов деления при тяжелых авариях. Результаты моделирования могут быть использованы при разработке и проектировании новых типов оборудования для улавливания субмикронных частиц в продуктах сгорания энергетических углей на ТЭС угольного типа с использованием разработанной программы для ЭВМ COND-KINET-1.

Обоснованность и достоверность выводов обеспечивается использованием математических моделей, основанных на фундаментальных законах механики и теплофизики, удовлетворительным совпадением результатов численного решения на основе предложенной модели с надежными экспериментальными данными.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Модель образования субмикронных частиц в продуктах сгорания энергетических углей на основе гипотезы «замораживания» формирования алюмосиликатов и шлакоудаления.
2. Критерий для учета влияния гетерогенных центров конденсации и скорости изменения температуры потока на параметры конденсационного аэрозоля.
3. Результаты сравнительного анализа состава продуктов сгорания 15 энергетических углей с учетом и без учета образования алюмосиликатов.
4. Результаты численного моделирования формирования субмикронных частиц в продуктах сгорания углей.
5. Результаты численного моделирования гомогенно-гетерогенной конденсации с учетом запыленности парогазового потока продуктов сгорания углей.

6. Результаты численного моделирования гомогенно-гетерогенной конденсации газообразных продуктов деления и анализ влияния на процесс осаждения аэрозольных частиц при переносе в горизонтальном участке.

Личный вклад автора. Все материалы и результаты диссертационного исследования получены соискателем лично или в соавторстве. Личный вклад автора для достижения полученных результатов заключается в проведении численных расчетов, обработке и анализе полученных результатов, подготовке публикаций; участии в разработке модели формирования субмикронных частиц в продуктах сгорания энергетических углей на основе гипотезы «замораживания» алломосиликатов и шлакоудаления, участии в выработке критерия для учета влияния гетерогенных центров конденсации и скорости изменения температуры потока на параметры конденсационного аэрозоля, модификации программы кинетики объемной конденсации и ее валидации, участии в разработке программы для расчета процессов осаждения продуктов деления на поверхностях защитной оболочки.

Апробация результатов.

Основные результаты работы представлены в 18 работах, из которых 10 опубликованы в рецензируемых журналах, входящих в список ВАК, Scopus, Web of Science.

Основные положения и результаты работы были представлены на 8 конференциях: «9th International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer» СНТ-24, IV Международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (СПТЭ 2024), International Heat Transfer Conference (IHTC-17, IHTC-16), XIII всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике, XI Семинар вузов по теплофизике и энергетике, Российская национальная конференция по теплообмену (РНКТ-7), International Conference Combustion Physics and Chemistry (Самара, 2018), XXI Школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством академика А.И. Леонтьева (2017).

Получено 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.14 «Теплофизика и теоретическая теплотехника»:

6. Экспериментальные исследования, физическое и численное моделирование процессов переноса массы, импульса и энергии в многофазных системах и при фазовых превращениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке: РФФИ № 13-08-00962 А, РФФИ № 16-08-00182 А, РНФ № 22-19-00044.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка использованных обозначений, списка литературы, приложения. Объем работы составляет 119 страниц (основная часть 108). Список литературы содержит 90 наименований. Диссертация содержит 51 рисунок, 13 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость полученных результатов, перечисляются основные положения, выносимые на защиту, приводятся сведения об апробации результатов, основных публикациях, объеме и структуре работы.

В первой главе диссертации приводится обзор научных работ, посвященных проблеме моделирования фазового перехода первого рода, в частности, объемной конденсации и различным аспектам моделирования формирования высокодисперсных конденсационных аэрозолей. Представлены выражения для скорости нуклеации из

классической теории нуклеации и различные модификации выражения скорости нуклеации. Описан подход к моделированию роста формирующейся капли с использованием выражения Герца-Кнудсена для свободномолекулярного режима роста капли, формула Максвелла для диффузионного режима, а также формула Фукса для случая, когда размер капли соизмерим с длиной свободного пробега молекул. Описаны основные методы экспериментального исследования объемной конденсации. Приведен обзор научных работ, посвященных исследованию и моделированию формирования и роста высокодисперсных частиц классов PM10, PM2.5, PM0.1, а также работ по гомогенно-гетерогенной конденсации в парогазовом потоке. Отмечен недостаток результатов исследований, связанных с возможностью образования алюмосиликатов, препятствующих испарению летучих элементов золы с их последующей конденсацией в объеме, и результатов исследований, посвященных учету влияния технологических процессов при использовании энергетических углей, запыленности потока продуктов сгорания в технологическом тракте на формирование высокодисперсных аэрозолей экологически опасных веществ. Сделаны выводы о необходимости развития комплексного подхода к определению параметров образующихся конденсационных аэрозолей в продуктах сгорания углей и развитии моделей осаждения аэрозолей продуктов деления за счет учета влияния объемной конденсации на динамику роста аэрозольных частиц при переносе и распространении в каналах первого контура реакторной установки при тяжелой аварии на АЭС.

Во второй главе диссертации приводится математическое описание моделей термодинамического анализа состава продуктов сгорания энергетических углей, а также формирования субмикронных частиц за счет объемной конденсации. Эти модели реализованы в программных средствах TETRAN-PRO и COND-KINET-1. Программа TETRAN-PRO рассчитывает состав и термодинамические свойства многокомпонентных систем в состоянии равновесия методом преобладающих компонентов. COND-KINET-1 моделирует параметры конденсационного аэрозоля с учётом кинетики объёмной конденсации в парогазовом потоке. В соответствии с комплексным подходом использование программ двухэтапное: результаты термодинамического анализа TETRAN-PRO служат входными данными для моделирования аэрозолей в COND-KINET-1.

В случае исследования образования субмикронных частиц в продуктах сгорания углей с помощью программы TETRAN-PRO методом преобладающих компонентов определяются составы газовой и конденсированных фаз, последовательность конденсации различных веществ по мере понижения температуры продуктов сгорания вдоль технологического тракта.

Движущей силой процесса объемной конденсации является превышение парциального давления конденсирующегося компонента относительно равновесного значения при заданной температуре и характеризуется степенью пересыщения. Применительно к рассматриваемому случаю степень пересыщения может быть записана в виде:

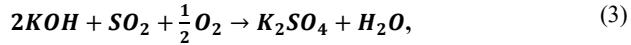
$$s = \frac{N_{K_2SO_4}}{N_{K_2SO_4}^s}. \quad (1)$$

Здесь $N_{K_2SO_4}$ – текущее число молей в газовой фазе, соответствующее однофазному термодинамическому равновесию в газовой фазе, моль; $N_{K_2SO_4}^s$ – число молей в газовой фазе (двухфазное термодинамическое равновесие), моль.

Имея температурную зависимость числа молей K_2SO_4 в газовой фазе для знаменателя выражения (1) используются температурные аппроксимации вида:

$$\lg N^s = A^s - \frac{B^s}{T} \quad (2)$$

Для определения числителя выражения (1) **Ошибка! Источник ссылки не найден.** используется система уравнений для реакции образования сульфата калия:



состоящая из закона действующих масс и материального баланса для основных калийсодержащих компонентов в газовой фазе (KOH и K₂SO₄).

$$\left. \begin{array}{l} N_{\text{K}_2\text{SO}_4}/N_{\text{KOH}}^2 = K_{eq} \\ 2N_{\text{K}_2\text{SO}_4} + N_{\text{KOH}} = \Sigma_K \end{array} \right\} \quad (4)$$

Искомое выражение для N_{K2SO4}

$$\left. \begin{array}{l} N_{\text{K}_2\text{SO}_4} = (\sqrt{1 + 8\Sigma_K} - 1)^2 / 16K_{eq}, \\ \Sigma_K = N_K^0 - \Delta N_K. \end{array} \right\} \quad (5)$$

Здесь N_K⁰ – концентрация калия в угле, моль; ΔN_K – убыль калия, моль, из газовой фазы вследствие конденсации; K_{eq} – константа равновесия для реакции образования сульфата калия в газовой фазе. Температурная зависимость константы равновесия получена на основании расчетных данных для 15 видов углей была аппроксимирована двучленными полиномами:

$$\lg K_{eq}^{(i)} = A_i - B_i/T. \quad (6)$$

Значения A_i и B_i для рассмотренных углей представлены в приложении диссертации.

Для моделирования процесса объемной конденсации пересыщенного пара используется кинетическое уравнение для функции распределения капель по размерам.

$$u \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial(\dot{r}f)}{\partial r} = \frac{1}{\rho_{\Sigma}} \delta(r - r_{cr}), \quad (7)$$

где f – функция распределения капель по размерам, нормированная на число капель в единице массы парогазовой смеси, кг⁻¹, u – скорость потока, м/с, r – радиус капли, м, ḡ – скорость роста капель, м/с, J – скорость нуклеации, м⁻³с⁻¹, ρ_Σ – плотность смеси пара, газа и капель, кг/см³, δ – дельта-функция Дирака, r_{cr} – критический радиус зародыша, м.

При условии, что размер капель много меньше средней длины свободного пробега, из уравнения **Ошибка! Источник ссылки не найден.**(7) следует система уравнений для первых четырех моментов функции распределения

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d\Omega_0}{dx} = \mathbf{IA} \\ \frac{d\Omega_1}{dx} = \frac{\dot{r}}{v} \Omega_0 + r_{cr} \frac{d\Omega_0}{dx} \\ \frac{d\Omega_2}{dx} = 2 \frac{\dot{r}}{v} \Omega_1 + r_{cr}^2 \frac{d\Omega_0}{dt} \\ \frac{dC_1}{dx} = \frac{4\pi\rho_1}{3Q} \left(3 \frac{\dot{r}}{v} \Omega_2 + r_{cr}^3 \frac{d\Omega_0}{dx} \right) \end{array} \right\}, \quad (8)$$

Где

$$\Omega_n = \int_{r_{cr}}^{\infty} r^n f dr. \quad (9)$$

Решение системы уравнений (8) позволяет получить параметры конденсационного аэрозоля такие как:

- счетная концентрация капель $n_d = \rho \Omega_0$;
- массовая доля капель $C_l = \frac{4}{3} \pi \frac{\rho_l}{\rho} \Omega_3$;
- средний радиус капель $\langle r \rangle = \frac{\Omega_1}{\Omega_0}$.

Решение системы уравнений (8) реализована в программном средстве COND-KINET-1, которое было валидировано на надежных экспериментальных данных по изменению параметров конденсационного аэрозоля тяжелой воды и н-нона при истечении парогазовой смеси через сопло [J. Chem. Phys. 2014]. Показано хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных по параметрам конденсационного аэрозоля (рис. 1, 2; табл. 1).

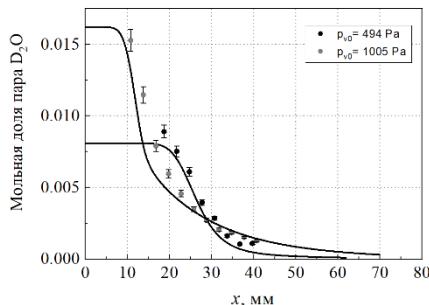


Рисунок 1 - Изменения мольной доли пара тяжелой воды (символы – экспериментальные данные; линии – расчетные данные)

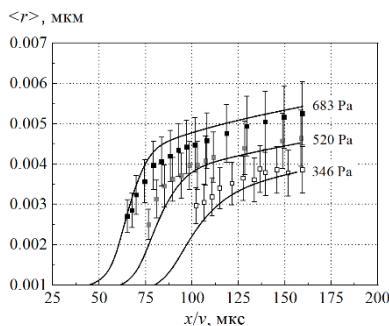


Рисунок 2 - Средний размер капель конденсата тяжелой воды в зоне неравновесной конденсации (символы – экспериментальные данные; линии – расчетные данные)

Таблица 1 - Максимальная скорость нуклеации (тяжелая вода)

p _v , Па	J _{max} , см ⁻³ с ⁻¹	
	Расчет	Эксперимент
683	2.28 · 10 ¹⁷	2.4 · 10 ¹⁷ < J _{max} < 4.1 · 10 ¹⁷
520	2.72 · 10 ¹⁷	
346	3.20 · 10 ¹⁷	

В соответствии с подходом, предложенным [AIP Conference Proceedings. 2012], при рассмотрении гомогенно-гетерогенной конденсации выделяются две группы капель: 1) микрокапли, образующиеся вследствие гомогенной нуклеации в объеме парогазовой смеси, 2) макрокапли, формирующиеся при конденсации пара на гетерогенных центрах. При этом к уравнению (7) для микрокапель добавляется кинетическое уравнение для макрокапель:

$$u \frac{\partial f_M}{\partial x} + \frac{\partial(r f_M)}{\partial r} = 0. \quad (10)$$

Здесь f_M – функция распределения макрокапель по размерам, кг⁻¹. Уравнения (7) и (10) имеют разные начальные условия: для микрокапель функция распределения во входном сечении равна нулю, а для макрокапель – задаваемой функции распределения частиц пыли.

Описываемый подход к моделированию кинетики гомогенно-гетерогенной конденсации может быть применен к анализу изменения распределения частиц по размерам в каналах первого контура при тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР и использоваться

в качестве исходных данных для моделирования осаждения аэрозолей радиоактивных продуктов деления.

В свою очередь, модель переноса и осаждения соединений ПД в первом контуре, реализованная в программном средстве МАВР-ТА, описывается системой дифференциальных уравнений относительно массы каждого вещества для каждого участка (в несущей среде и на поверхности контура). Данная модель позволяет количественно оценить массу радиоактивных ПД в атмосфере и на поверхностях участков первого контура, а также количество продуктов деления, вышедших из него под защитную оболочку или в окружающую среду.

Общая система уравнений включает в себя описание переходов между различными состояниями ПД в системе из $6N + 3$ дифференциальных уравнений (здесь N – число моделируемых участков). Для расчета коэффициентов осаждения аэрозолей применяются модели диффузиофореза, седиментации (гравитационного осаждения), термофореза, броуновской диффузии, а также выражение для турбулентной диффузии

В третьей главе рассмотрено использование комплексного подхода к моделированию формирования субмикронных частиц в продуктах сгорания углей, а также влияние запыленности потока продуктов сгорания. Комплексный подход включает в себя термодинамический анализ состава продуктов сгорания на первом этапе и кинетический расчет параметров формирующихся частиц по механизму объемной конденсации на втором этапе. Учет запыленности потока продуктов сгорания предполагал образование аэрозоля сульфата калия в процессе гомогенно-гетерогенной конденсации с учетом кинетики процесса.

Предметом исследования выступают продукты сгорания 15 видов энергетических углей различных месторождений России и Китая.

Первая часть главы посвящена результатам термодинамического анализа с использованием и без использования гипотезы «замораживания» образования алюмосиликатов.

Для изучения механизма образования высокодисперсного зольного уноса важны вещества, испаряющиеся при сжигании угля и образующие субмикронные частицы летучей золы при охлаждении. К наиболее летучим элементам относятся калий и натрий, которые были выбраны для термодинамического анализа их паров и соединений. Состав углей изменяется в широком диапазоне: зольность варьируется от 5.75 до 48.0%, содержание серы – от 0.3 до 6.5%, калия – от 0.4 до 3.5%, натрия – от 0.2 до 1.9%

Результаты термодинамического анализа представляют собой температурную зависимость количества молей вещества (рис. 3) и температуры перехода в конденсированную фазу соединений калия и натрия (табл. 2).

Таблица 2 - Температуры перехода в конденсированную фазу соединений калия и натрия в продуктах сгорания углей с учетом (с/у) и без учета (б/у) алюмосиликатов калия и натрия

№	Уголь	Ca/Si	Калий с/у	Калий б/у	Натрий с/у	Натрий б/у
1	Красноярскгутоль, разрез Березовский	1.5	1250	1250	1300	1050
2	Кузнецкий бассейн, CC2CCP0KI	0.1	2650	1400	1850	1150
3	Кузнецкий бассейн, разрез Моховский	0.72	1850	1350	1600	1100
4	Кузнецкий бассейн, разрез Моховский	0.77	1600	1250	1650	1100
5	Печорский бассейн, шахта Воркутинская	0.06	2800	1400	1950	1150
6	Подмосковный бассейн, шахта Новомосковская	0.11	2600	1350	1700	1050

№	Уголь	Ca/Si	Калий с/у	Калий б/у	Натрий с/у	Натрий б/у
7	Хабаровский край, Ургальское месторождение	0.04	2700	1300	2000	1100
8	Чукотка, месторождение Бухта угольная	0.128	2550	1350	1850	1150
9	Респ. Саха, Нерюнгринское месторождение	0.10	2550	1300	1800	1100
10	Донецкий бассейн, А, штыб, СШ	0.06	2800	1500	1950	1350
11	Экибастузский бассейн	0.028	2800	1400	1850	1100
12	Yanzhou, KHP	1.4	1300	1300	1300	1050
13	YZLS, KHP	0.22	2050	1350	1600	1050
14	Baotou, KHP	0.447	1800	1300	1550	1050
15	Wangfg, KHP	0.15	2400	1300	1700	1050

Из результатов расчета следует, что с учетом алюмосиликатов присутствие в заметном количестве соединений калия и натрия в газовой фазе возможно только при температурах выше топочных, следовательно объемная конденсация соединений калия и натрия из продуктов сгорания невозможна. В то же время, согласно экспериментальным данным, алюмосиликаты в продуктах сгорания углей присутствуют, таким образом, модель должна учитывать образование алюмосиликатов.

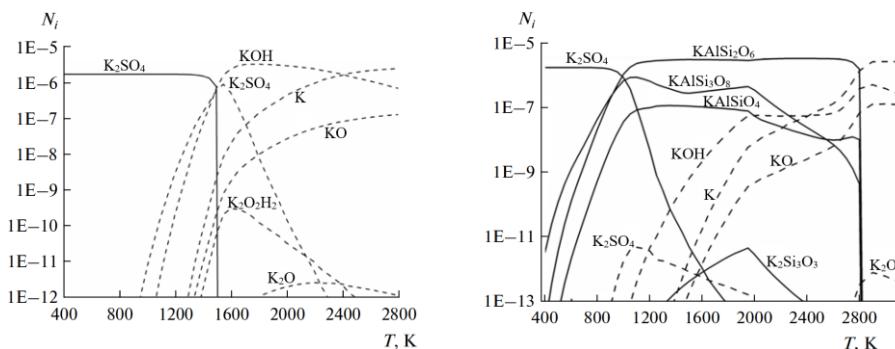


Рисунок 3 – Количество молей компонентов, содержащих калий в продуктах сгорания донецкого угля без учета алюмосиликатов и силикатов калия (слева) и с учетом алюмосиликатов калия (справа). Пунктир – газовая фаза, сплошная линия – конденсированная фаза

Для снятия возникшего противоречия при построении модели использована гипотеза «замораживания» образования алюмосиликатов. Основное допущение модели состоит в том, что взаимодействие калия и натрия с кремнием и алюминием с образованием алюмосиликатов в объеме горящей угольной частицы «замораживается» после прекращения горения и снижения температуры частицы. Калий и натрий, образовавшие алюмосиликаты, удаляются из продуктов сгорания со шлаком и летучей золой, в то время как испарившиеся элементы остаются в газовой фазе и конденсируются в виде сульфатов при понижении температуры. Расчет равновесного состава продуктов сгорания при температуре ниже температуры «замораживания» (T_{fr}) выполняется с учетом снижения содержания калия, натрия, кремния и алюминия, равного расчетному содержанию в алюмосиликатах при T_{fr} . Для оценки влияния неопределенности в выборе T_{fr} использованы значения: 1700 К и 1900 К, соответствующие диапазону температур (1350-1700°C) жидкого состояния шлака.

Температуры перехода сульфатов калия и натрия в конденсированную фазу, для двух значений T_{fr} варьируются от 1100 до 1300 К для соединений калия, от 1000 до 1150 К для соединений натрия (см. табл. 3). Видно, что температуры перехода заметно ниже температуры продуктов сгорания в зоне горения, что подтверждает возможность объемной конденсации. Температура перехода для сульфата калия выше, чем для сульфата натрия, что предполагает образование центров конденсации из сульфата калия с последующей конденсацией сульфата натрия при охлаждении продуктов сгорания.

Таблица 3 - Температуры (К) перехода в конденсированную фазу соединений калия и натрия в продуктах сгорания рассматриваемых углей с учетом образования алюмосиликатов калия и натрия и “замораживания” при двух значениях T_{fr}

Уголь	Калий при T_{fr} , К		Натрий при T_{fr} , К	
	1700 К	1900 К	1700 К	1900 К
1	1250	1250	1050	1050
2	1200	1250	1050	1150
3	1250	1350	1100	1050
4	1250	1300	1100	1100
5	1100	1250	1050	1100
6	1200	1300	1050	1050
7	1100	1200	1000	1050
8	1150	1250	1050	1050
9	1200	1250	1050	1100
10	1150	1250	1050	1100
11	1150	1250	1000	1100
12	1250	1300	1050	1050
13	1200	1300	1050	1050
14	1200	1300	1050	1050
15	1200	1250	1050	1100

Алгоритм пересчета состава продуктов сгорания основан на вычислении суммарного содержания элементов в конденсированной фазе при температуре «замораживания». Именно на эту величину снижаются первоначальные значения материальных постоянных элементов системы.

Концентрации сульфатов калия и натрия в газовой фазе, вычисленные без учета и с учетом образования алюмосиликатов и «замораживания», представлены на рис. 4. Результаты демонстрируют максимальные значения без учета алюмосиликатов и минимальные с их учетом. «Замораживание» увеличивает содержание сульфатов калия и натрия в газовой фазе на 4-5 порядков по сравнению с данными, полученными без учета этого фактора.

Увеличение T_{fr} приводит к более высоким значениям концентраций конденсирующихся веществ в газовой фазе. При $T_{fr} = 1900\text{K}$ связывание натрия в алюмосиликаты не происходит для некоторых из рассмотренных углей, что объясняет совпадение кривых 1 и 2 на рис. 4 справа. Однако концентрации сульфата калия остаются на 1-2 порядка ниже значений без учета алюмосиликатов.

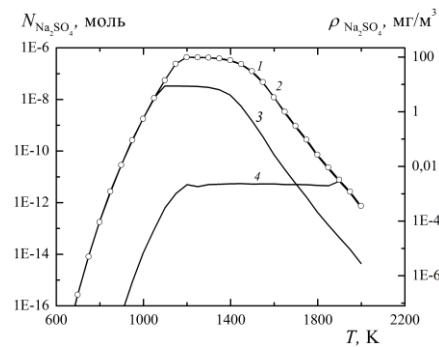
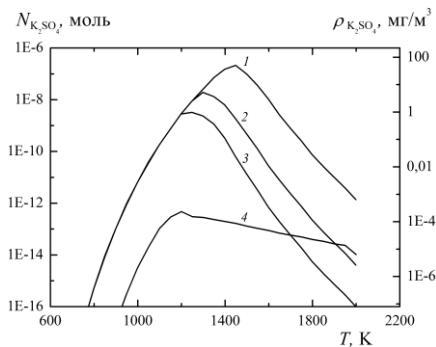


Рисунок 4 – Концентрация сульфата калия (слева), сульфата натрия (справа) в продуктах сгорания угля №2: без учета алюмосиликатов (1), с учетом образования алюмосиликатов и «замораживания» $T_{fr} = 1900K$ (2) и $T_{fr} = 1700K$ (3), 4 – с учетом образования алюмосиликатов без «замораживания».

Во второй части главы приведены результаты кинетического расчета образования субмикронных частиц сульфата калия и натрия в продуктах сгорания углей с учетом гипотезы «замораживания» и удаления алюмосиликатов со шлаком и летучей золой, а также сравнение результатов расчетных и экспериментальных данных.

Результаты моделирования (рис. 5) приведены для углей с наибольшей (№5) и наименьшей (№2) убылью калия при образовании алюмосиликатов. Учет «замораживания» при образовании алюмосиликатов приводит к снижению массовой концентрации образующихся частиц (рис. 5 слева). Снижение содержания сульфата калия в газовой фазе приводит к росту числа субмикронных частиц и уменьшению их размера (рис. 5 справа), что важно учитывать при организации пылеулавливания для очистки продуктов сгорания.

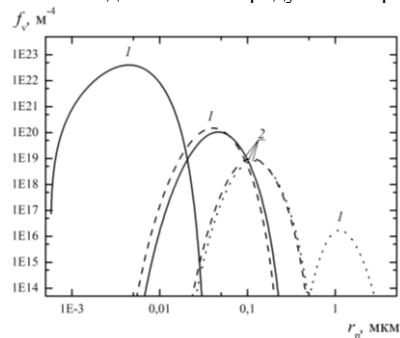
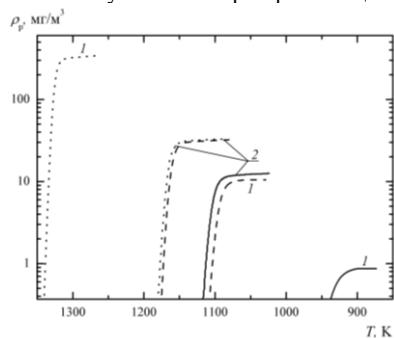


Рисунок 5 – Изменение массовой концентрации частиц (слева), функция распределения по размерам частиц (справа). 1 – уголь №5 (с наибольшей убылью калия «замораживанием»), 2 – уголь №12 (с наименьшей убылью калия при «замораживании»); без учета образования алюмосиликатов – пунктирные, с учетом образования алюмосиликатов и «замораживания»: штриховые (Tfr = 1900K), сплошные (Tfr = 1700K)

На рис. 6 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных по фракционному составу частиц для углей № 12 ($Ca/Si = 1,4$) и № 13 ($Ca/Si = 0,22$). Экспериментальные данные соответствуют бимодальному распределению частиц по размерам. Авторами эксперимента выделяются две категории частиц: субмикронная фракция ($d < 1 \text{ мкм}$), формируемая за счет конденсации паров металлов, и крупнодисперсная ($d > 1 \text{ мкм}$) – за счет прямого уноса минеральной части золы. При сравнении рассматривались данные первой категории частиц.

Установлено, что для угля № 12 расчетные данные близки к экспериментальным при температуре «замораживания» $T_f=1700$ К и коэффициенте конденсации (α) в диапазоне от 0,3 до 1,0. Повышение T_f до 1900 К требует снижения коэффициента α до 0,1...0,3. Для угля № 13 сближение результатов достигается при $T_f=1900$ К и $\alpha=0,3$, что обусловлено ростом концентрации паров конденсирующихся веществ. Вариация параметров T_f и α в рамках разработанной модели позволяет адекватно описывать дисперсные характеристики частиц для углей с различным значением соотношения Ca/Si.

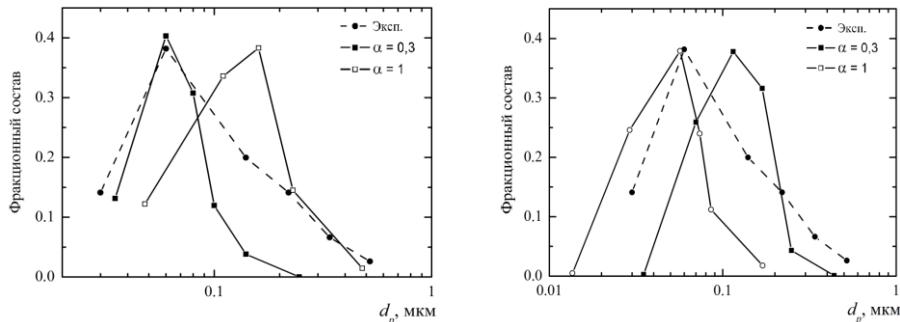


Рисунок 6- Фракционный состав частиц, образовавшихся при сжигании угля № 12

Третья часть главы содержит результаты моделирования параметров субмикронных частиц в продуктах сгорания углей с учетом влияния запыленности потока. При описании кинетики гомогенно-гетерогенной конденсации принималось, что в потоке имеется две группы капель: 1) микрокапли, образующиеся вследствие гомогенной нуклеации в объеме парогазовой смеси, 2) макрокапли, формирующиеся при конденсации пара на частицах пыли.

Результаты численного моделирования образования субмикронных частиц (капель) в продуктах сгорания угля Yanzhou при гомогенно-гетерогенной конденсации сульфата калия представлены на рис. 7-10. Варьировались концентрация и размер пылинок, а также температурный градиент в зоне конденсации. Анализ результатов показал, что влияние пылинок возрастает с увеличением скорости конденсации пара на них, которая определяется выражением счетной концентрации капель $n_d = \rho \Omega_0$. При моделировании размер пылинок варьировался от 10 мкм и выше, скорость конденсационного роста гетерогенных капель при таких размерах становится обратно пропорциональной радиусу (диффузионный режим роста), следовательно влияние пылинок должно определяться комплексом $n_p r_p^2$, что подтверждено расчетами при варьировании n_p и r_p .

Из рис. 7 видно, что кривые убыли концентрации пара делятся на два участка: начальный, с плавным изменением концентрации пара при гетерогенной конденсации, и заключительный, с резким изменением концентрации пара при гомогенной конденсации. С увеличением $n_p r_p$ протяженность зоны гетерогенной конденсации на пылинках возрастает ее вклад в убыль пара, в то время как зона гомогенной конденсации смещается в область более низких температур и концентраций пара и одновременно более высоких степеней пересыщения, что приводит к увеличению количества капель, образующихся при гомогенной нуклеации и снижению их массы (рис. 8).

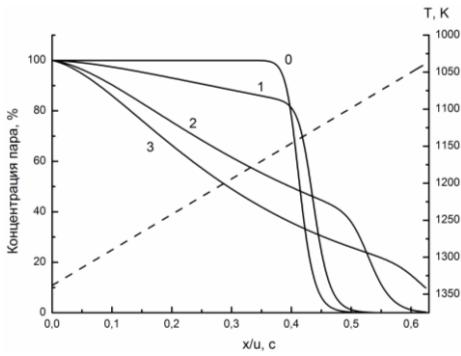


Рисунок 7- Изменение концентрации пара –
сплошные кривые, изменение температуры
(штриховая кривая) вдоль оси канала

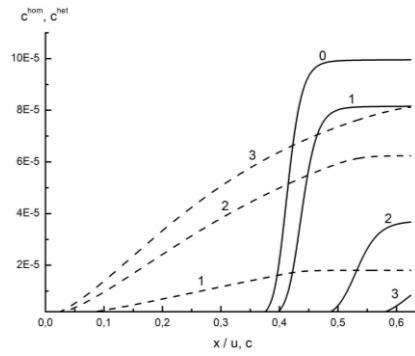
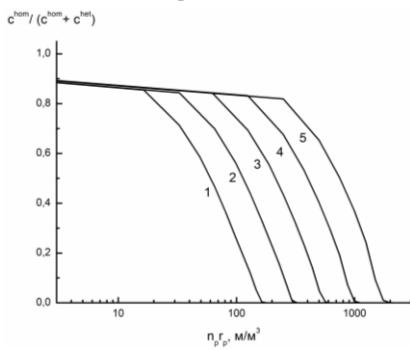


Рисунок 8 - Изменение массовой доли
конденсата при гомогенной (сплошные кривые)
и гетерогенной (штриховые кривые)
конденсации вдоль оси канала

Изменение вклада гомогенной конденсации в массовую долю конденсата в зависимости от комплекса $n_p r_p$ при различной скорости изменения температуры dT/dt представлено на рис. 9 слева. С увеличением dT/dt влияние гетерогенных центров на конденсацию уменьшается. Так, одинаковое уменьшение вклада гомогенной конденсации достигается при больших значениях комплекса $n_p r_p$. На основании проведенных расчетов было установлено, что расчетные точки (рис. 9 слева) можно описать зависимостью от параметра $\xi = n_p r_p (dT/dt)^{-0.89}$ (рис. 9 справа). Опыт расчетов показывает, что dc^{hom}/dx при максимальной степени пересыщения и $n_p r_p = 0$ линейно зависит от dT/dt . С другой стороны, dc^{het}/dx линейно зависит от $n_p r_p$. Таким образом, по физическому смыслу параметр ξ является отношением скорости конденсации на пылинках к скорости гомогенной конденсации при максимальной степени пересыщения.



$$1 - dT/dt = 30, 2 - 60, 3 - 120, 4 - 240, 5 - 480 \text{ K/c}$$

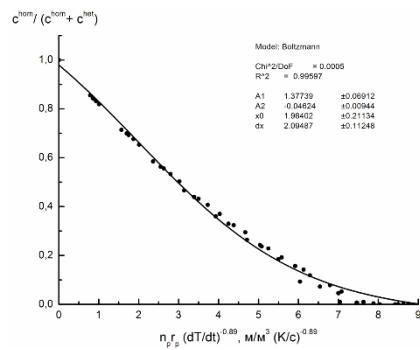


Рисунок 9 - Изменение вклада гомогенной конденсации в увеличение массовой доли конденсата в зависимости от $n_p r_p$ (слева), в зависимости от критерия ξ (справа) при различной скорости изменения температуры

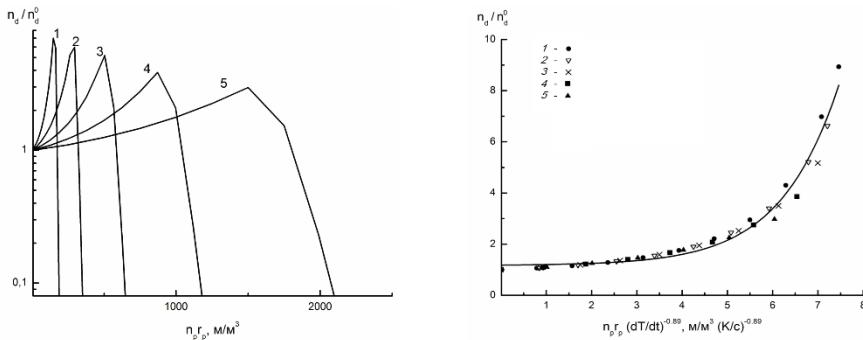


Рисунок 10 - Изменение относительного числа капель, образующихся при гомогенной нуклеации, в зависимости от величины комплекса $n_p r_p$ (слева), в зависимости от обобщающего критерия ξ (справа) при различной скорости изменения температуры

Влияние гетерогенных центров на число образующихся капель характеризуется отношением n_d/n_d^0 , где n_d^0 – число образующихся капель при отсутствии гетерогенных центров. Зависимость n_d/n_d^0 от комплекса $n_p r_p$ при различной скорости изменения температуры dT/dt представлена на рис.10 слева. С увеличением dT/dt влияние гетерогенных центров (комплекса $n_p r_p$) на число образующихся капель уменьшается. В частности, одинаковое значение n_d/n_d^0 достигается при больших значениях комплекса $n_p r_p$.

Использование параметра ξ позволяет с хорошей точностью представить данные, соответствующие восходящим ветвям кривых на рис. 10 слева, единой кривой (рис 10 справа).

В четвертой главе рассмотрены результаты анализа влияния гомогенно-гетерогенной конденсации паров цезия на осаждение аэрозолей в первом контуре реакторной установки при тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР.

Рассматривается стационарное одномерное течение парогазовой смеси цезий-гелий, содержащей аэрозоли, с постоянной скоростью в канале и заданным осевым градиентом температуры. Параметры потока и геометрические характеристики канала выбраны на основе данных эксперимента FALCON ISP-1. Моделирование проводится в два этапа: 1) кинетический расчет гомогенно-гетерогенной конденсации согласно методике моделирования запыленного парогазового потока; 2) расчет осаждения аэрозольных частиц в виде кумулятивной массы аэрозолей цезия, осевших на внутренней поверхности канала.

В качестве рабочего участка моделировалась горизонтальная труба длиной 500 мм и диаметром 20 мм. Для анализа переноса и осаждения аэрозолей модель трубы была разбита на 15 участков. Исходя из предварительного анализа положения зоны объемной конденсации, первая половина трубы разбита на пять участков по 50 мм, вторая половина – на 10 участков по 25 мм.

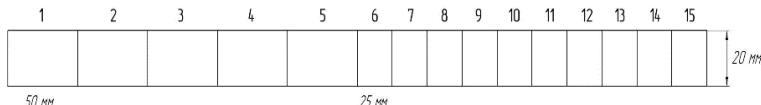


Рисунок 11 – Схема моделируемого рабочего участка

Поток в моделируемом участке состоит из несущего газа (гелий), паров цезия, твердых аэрозольных частиц – гетерогенных центров конденсации диаметром 1 мкм, концентрация которых варьировалась. Массовые расходы несущего газа и паров цезия

соответствовали данными эксперимента FALCON-ISP-1 и равнялись 10^{-5} кг/с и 2×10^{-7} кг/с соответственно. Общее давление системы в рабочем участке принималось равным атмосферному, температура несущего газа изменялась по длине рабочего участка в соответствии с заданным профилем изменения температуры.

На первом этапе выполнена серия расчетов кинетики объемной конденсации с различным содержанием гетерогенных центров конденсации в парогазовом потоке. Начальное содержание твердых аэрозольных частиц в потоке и массовая доля конденсата в виде капель приведены в таблице 4. Также были рассмотрены предельные варианты процесса конденсации.

Таблица 4 - Начальное содержание аэрозольных частиц и массовая доля конденсата

Параметр	Вариант				
	1	2	3	4	5
Массовая доля аэрозольных частиц в потоке $c_{particles} \cdot 10^{-7}$	—	2.05	5.10	7.18	9.10
Доля конденсата на частицах, %	—	20	60	90	100
Доля конденсата в виде капель, %	100	80	40	10	—

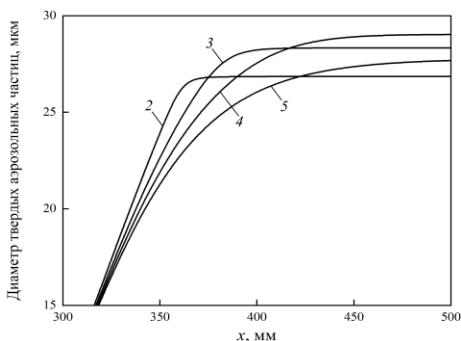
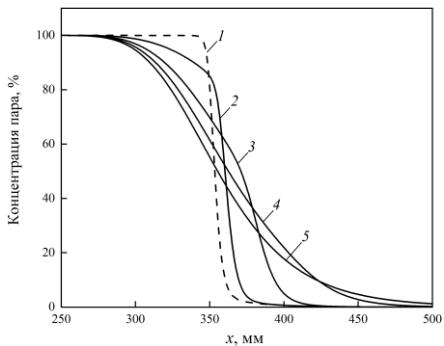
С увеличением содержания твердых частиц зона гомогенной конденсации смещается вниз по потоку (рис. 12 слева), степень пресыщения и концентрация капель увеличиваются, а средний размер капель уменьшается (рис. 12 справа). Конденсация на поверхности твердых аэрозольных частиц приводит к значительному увеличению их диаметра (до 26.9 – 29.0 мкм), что вызвано увеличением площади поверхности частицы. При этом диаметр капель, сформированных за счет объемной конденсации, составляет 2.0 – 2.5 мкм (рис. 13 слева).

Анализ результатов кинетического расчета показал, что увеличение содержания гетерогенных центров конденсации в потоке способствует расширению зоны гетерогенной конденсации и смещает зону гомогенной конденсации вниз по потоку. При этом наблюдается увеличение максимального значения среднего размера аэрозольных частиц, что приводит к более интенсивному осаждению.

Моделирование осаждения частиц в рассматриваемой модели канала реализовано с помощью кода МАВР-ТА. Результаты расчета осаждения аэрозольных частиц представлены в виде кумулятивной массы цезия, осевшего на внутренней поверхности трубы, при подаче цезия и несущего газа в течение 25 мин (рис. 13 справа).

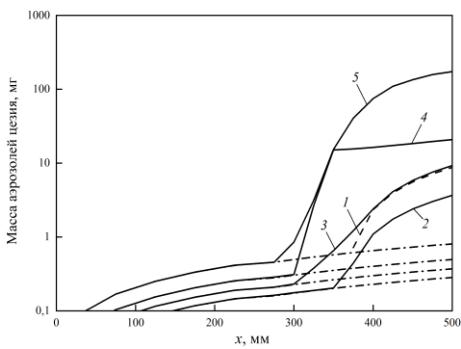
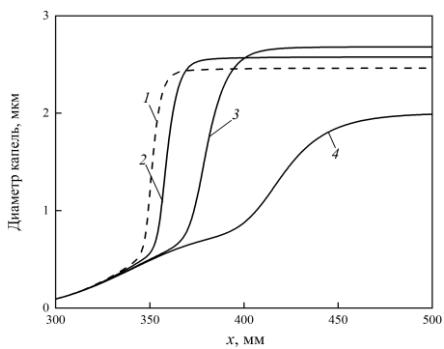
Учет объемной конденсации значительно влияет на осаждение аэрозольных частиц, увеличивая размеры ранее введенных аэрозолей и включая формирование капель по гомогенному механизму. С увеличением начального содержания твердых аэрозольных частиц в потоке, наблюдается увеличение скорости осаждения. Наибольшее осаждение получено при моделировании второго предельного случая - чисто гетерогенной конденсации. При массовой доле твердых аэрозольных частиц в потоке менее 5×10^{-7} влияние объемной конденсации является преобладающим.

Таким образом, в случаях малого содержания аэрозольных частиц в потоке значительное влияние на осаждение может оказывать формирование капель по гомогенному механизму. Во всех остальных случаях, где имеет место гомогенная конденсация, присутствие образовавшихся капель в зоне конденсации снижает общую скорость осаждения из-за их малого размера по сравнению с выросшими аэрозольными частицами, следовательно, такие частицы дольше остаются во взвешенном состоянии.



Вариант: 1 – 0; 2 – 1; 3 – 2; 4 – 3; 5 – 4 (см. таблицу 4)

Рисунок 12 – Изменение концентрации пара (слева), размера твердых аэрозольных частиц (справа) вдоль оси канала в зоне объемной конденсации.



Вариант: 1 – 0; 2 – 1; 3 – 2; 4 – 3; 5 – 4 (см. таблицу 4)

Рисунок 13 – Изменение размера капель вдоль оси канала в зоне объемной конденсации (слева); изменение массы аэрозольных частиц цезия вдоль оси канала (справа)

Основные результаты и выводы

1) Сравнительный анализ состава продуктов сгорания 15 энергетических углей с учетом и без учета формирования алюмосиликатов позволил сформулировать модель образования конденсационных аэрозолей на основе гипотезы «замораживания» формирования алюмосиликатов.

2) Разработан алгоритм компьютерной реализации модели на основе двухстадийного комплексного подхода.

3) Согласно результатам, полученным на основе модели, с учетом «замораживания» при образовании алюмосиликатов расчетные параметры конденсационного аэрозоля в продуктах сгорания углей изменяются двояко. С одной стороны, массовая концентрация образующихся частиц уменьшается, с другой стороны, снижение содержания сульфата калия в газовой фазе приводит к росту числа образующихся субмикронных частиц при одновременном уменьшении их размера.

4) Полученные расчетные данные по концентрации и распределению по размерам частиц, образующихся при объемной конденсации в продуктах сгорания углей, согласуются с экспериментальными данными по фракционному составу.

5) На основе анализа результатов численного моделирования гомогенно-гетерогенной конденсации с учетом запыленности парогазового потока продуктов

сгорания углей предложен критерий для учета влияния гетерогенных центров конденсации и скорости изменения температуры потока на параметры конденсационного аэрозоля.

6) Проведен анализ влияния гомогенно-гетерогенной конденсации газообразных продуктов деления на осаждение аэрозолей. Установлено, что интенсивность осаждения существенно зависит от массовой доли гетерогенных центров конденсации. Показано, что при массовой доле гетерогенных центров конденсации в потоке менее 5×10^{-7} влияние объемной конденсации является преобладающим, что приводит к формированию мелких капель и способствуют более длительному нахождению частиц радиоактивных продуктов деления во взвешенном состоянии.

Список публикаций по теме диссертации:

Публикации в научных журналах, включенных в перечень рецензируемых научных изданий, входящих в список ВАК, Scopus, Web of Science:

1. N.M. Kortsensteyn, V.Y. Levashov, A.K. Yastrebov, L.V. Petrov. Numerical simulation of homogeneous-heterogeneous condensation and interphase heat transfer in a dusty vapour-gas flow: Controlling the homogeneous condensation process // International Journal of Thermal Sciences 2024, Volume 200
2. Yury Shmelkov, Yu.A. Zvonarev, N.V. Shutov, L.V. Petrov Development and validation of the MAVR-TA code for analyzing the release and transport of fission products during a severe accident at a nuclear power plant with VVER. Part 2 – Modelling of the fission products transport in the primary circuit and inside the containment // Nuclear Engineering and Design. 2021. Volume 382
3. Петров Л.В., Шмельков Ю.Б., Корценштейн Н.М. Влияние объемной конденсации паров цезия на перенос аэрозолей в I контуре реакторной установки при тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР // Теплоэнергетика 2020 № 9 С. 55-60
4. Корценштейн Н.М., Герасимов Г.Я., Петров Л.В., Шмельков Ю.Б. Программный комплекс для моделирования физико-химических процессов и свойств рабочих тел // Теплоэнергетика. 2020 №9. С. 6-19
5. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Влияние запыленности продуктов сгорания и процессов коагуляции на параметры субмикронных частиц, образующихся при сжигании углей // Коллоидный журнал. 2019. № 3. С. 317–325.
6. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Численное моделирование параметров субмикронных частиц, образующихся при сжигании углей // Теплоэнергетика. 2018. № 7. С. 33–41.
7. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Численное моделирование процесса объемной конденсации при истечении парогазовой смеси через сопло // Коллоидный журнал. 2017. Т. 79. № 3. С. 276-283.
8. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Термодинамический анализ образования субмикронных частиц при сжигании углей // Химия твердого топлива. 2017. № 3. С. 43-50.
9. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Numerical simulation of submicron particles formation by condensation at coals burning // Journal of Physics: Conference Series. 2017. Vol. 891.
10. Н.М. Корценштейн, Л.Н. Лебедева, Л.В. Петров, Е.В. Самуйлов. Моделирование параметров субмикронных частиц, образующихся в продуктах сгорания углей // Коллоидный журнал. 2015. Т. 77. №2. С. 174-180.

Публикации в сборниках тезисов и докладов:

1. Naum M. Kortsensteyn, Leonid V. Petrov, Artem V. Rudov, Arseny K. Yastrebov. On The Interaction Between the Processes of Intensive Evaporation and Bulk Condensation Near the Interfacial Surface // Тезисы конференции «9th International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer» CHT-24, г. Стамбул, Турция, 25 - 30 мая 2024 г, pp. 54-55

2. N.M. Kortsensteyn, L.V. Petrov. Bulk condensation at intensive evaporation from the interfacial surface // Материалы IV Международной конференции «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (СПГЭ). Москва, 21-25 октября 2024 г. – М.: Издательство МЭИ, 2024, С. 194-195

3. Naum Kortsenshteyn, Leonid Petrov, Arseniy Yastrebov. On the possibility of controlling the process of bulk condensation in a dusty vapor-gas flow. // Proceedings of 17th International Heat Transfer Conference, August 14–18, 2023. Cape Town, South Africa. IHTC Digital Library. Begell House Publishers, Inc.

4. Корценштейн Н.М., Левашов В.Ю., Ястребов А.К., Синкевич О.А., Петров Л.В. Объемная конденсация в запыленном парогазовом потоке и возможность управления этим процессом // Тезисы XIII всероссийского съезда по теоретической и прикладной механике 21-25 августа 2023г. Санкт-Петербург. Т.2 Механика жидкости и газа – СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, С. 995-997.

5. Петров Л.В., Корценштейн Н.М. Численное моделирование формирования субмикронных частиц при сжигании углей с учетом коагуляции и запыленности продуктов сгорания // Материалы Всероссийской научной конференции с международным участием «XI Семинар вузов по теплофизике и энергетике», 21–23 октября 2019 года Санкт-Петербург. С. 306-307.

6. Л. В. Петров, Н. М. Корценштейн. Submicron particles formation by condensation at coals burning. Numerical simulation // Proceedings of 16th International Heat Transfer Conference, August 10–15, 2018. Beijing, China. IHTC Digital Library. Begell House Publishers, Inc.

7. Н. М. Корценштейн, Л. В. Петров. Моделирование параметров субмикронных частиц, образующихся при сжигании углей // Труды Седьмой Российской национальной конференции по теплообмену (РНКТ 7). 22 - 26 октября 2018 г., Москва. Т. 1. — М.: Издательский дом МЭИ. С. 406–409.

8. Л. В. Петров, Н. М. Корценштейн. Modeling of the formation of ultrafine particles as coals burning // Abstracts of International Conference Combustion Physics and Chemistry, July 24-28, 2018. Samara, Russian Federation. “Insoma-press” typography.

Свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ:

1. Корценштейн Н.М., Петров Л.В., Шмельков Ю.Б. COND-KINET-1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017664075. 2017.

2. Шмельков Ю.Б., Шутов Н.В., Петров Л.В. Программа для расчета процессов осаждения продуктов деления на поверхностях защитной оболочки. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2020616355, 16.06.2020. Заявка № 2020614898 от 18.05.2020.