

УДК 621.039.534

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕМНОЙ КОНДЕНСАЦИИ ПАРА В КОДЕ КУПОЛ-М

Годизов А.Г., Лукьянов А.А., Шаньгин Н.Н.
(ГНЦ РФ — ФЭИ им. А.И. Лейпунского)

Код КУПОЛ-М предназначен для расчета тепломассопереноса в защитной оболочке АЭС с ВВЭР при течах теплоносителя. Объемная конденсация пара является одним из процессов, который во многом определяет перенос радиоактивных продуктов деления и их трансформацию при протекании аварии. Объемная конденсация пара включает в себя рост капель в атмосфере защитной оболочки, их коагуляцию, седиментацию и осаждение на поверхностях стен и оборудования.

Наиболее полная математическая модель объемной конденсации [1] и переноса основана на системе трехмерных интегрально-дифференциальных уравнений, описывающих как турбулентное движение парогазокапельной среды, так и эволюцию микрофизических параметров продуктов деления. Эти параметры определяются функцией распределения капель по размеру, содержанием в них гигроскопических веществ, размером нерастворимых ядер конденсации, а также изменением полей концентрации летучих и малолетучих продуктов деления. Реализация таких трехмерных моделей в расчетных кодах представляет собой трудоемкую задачу, и перспектива ее решения определяется развитием численных методов и вычислительной техники [2, 3].

Упрощенная математическая модель объемной конденсации реализована в коде КУПОЛ-М [4], в котором описание тепломассопереноса в объеме защитной оболочки при авариях с потерей теплоносителя основано на модели в сосредоточенных параметрах. Для описания переноса продуктов деления требуется показать, что модель объемной конденсации позволяет определять не только макроскопические показатели (расход пара при конденсации на капли), но и микрохарактеристики обводненного аэрозоля. С учетом малости потоков на поверхности стен и оборудования, определенных в эксперименте НПО «Тайфун» [5], в исходном уравнении заранее ими пренебрежем. В этой связи исходное кинетическое уравнение для функции распределения капель по размеру представляет собой уравнение Лиувилля в пространстве размеров с источниками в правой части, которые моделируют физические процессы, приводящие к деформации спектра, исключая конденсационный рост капель. Это уравнение имеет вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}(rf) = -\frac{2}{9} \frac{\rho_w g}{\eta l_1} r^2 f + \frac{f_0}{\tau_0} + \frac{1}{2} \int_0^V K(V, V - V_1) f(V - V_1) f(V_1) dV_1 - \\ - f(V) \int_0^\infty K(V, V_1) f(V_1) dV_1, \quad (1)$$

где f — функция распределения капель по размеру; t — время; r — радиус капли; ρ_w — плотность воды; η — динамическая вязкость газовой атмосферы; g — ускорение силы тяжести; l_1 — характерный линейный размер; f_0/τ_0 — источник капель в объеме; $K(V, V - V_1)$ — ядро коагуляционного интеграла; V — объем.

Первое слагаемое в правой части описывает седиментацию капель, второе определяет источник капель в рассматриваемом объеме, третье и четвертое слагаемые — коагуляционные интегралы.

Представляя скорость роста одиночной капли в максвелловском виде

$$\dot{r} = \frac{D_n}{\rho_w} [\rho_n - \rho_{n,n}(T)] \frac{1}{r},$$

где D_n — коэффициент диффузии пара; ρ_n — плотность пара в атмосфере; $\rho_{n,n}(T)$ — плотность насыщенного пара, выберем форму спектра в виде γ -функции (эта форма удовлетворительно описывает распределение капель в естественных облаках и туманах)

$$f(r) = F \exp -\beta r r^\alpha. \quad (2)$$

В коде КУПОЛ-М используется распределение (2) при фиксированном параметре $\alpha = 2$ (распределение Хргиана—Мазина [6]). В этом случае при нормировании спектра на счетную концентрацию капель имеем

$$f(r) = \frac{n\beta^3}{2} r^2 \exp -\beta r. \quad (3)$$

Задаваясь постоянным ядром коагуляции ($K(r, r_1) = \text{const}$) и интегрируя уравнение (1), получим уравнения для счетной концентрации капель n и среднего радиуса капли $\bar{r}$ в виде

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = -\frac{8}{27} \frac{\rho_{вг}}{\eta l_1} n(\bar{r})^2 - \frac{8}{3} \bar{n} C n^2(\bar{r})^2 + \frac{n_0}{\tau_0}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{r}}{\partial \tau} = \frac{3}{2} \frac{D_n}{\rho_{в}} \frac{\rho_n - \rho_{n,n}(T)}{\bar{r}} - \frac{32}{27} \frac{\rho_{вг}}{\eta l_1} (\bar{r})^3 + \frac{40}{9} \pi C n(\bar{r}^3) - \frac{\bar{r}}{n} \frac{n_0}{\tau_0} \left(1 - \frac{\bar{r}_0}{\bar{r}}\right). \quad (5)$$

Средний, модальный и среднекубический радиусы капли связаны с параметром β соотношениями

$$\bar{r} = \frac{1}{n} \int_0^\infty r f(r) dr = \frac{3}{\beta}; \quad r_{\text{mod}} = \frac{2}{\beta}; \quad \sqrt[3]{\langle r^3 \rangle} = \frac{1}{n} \int_0^\infty r^3 f(r) dr = \frac{\sqrt[3]{60}}{\beta}. \quad (6)$$

Время фазовой релаксации пара определяется как

$$\tau_V^{-1} = 4\pi D_n n \bar{r} = \frac{12\pi D_n n}{\beta}. \quad (7)$$

При численном решении системы уравнений (4), (5) оптимально перейти от неизвестной $\bar{r}$ к неизвестной $(\bar{r})^2$, тогда уравнение (5) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\bar{r})^2}{\partial \tau} = & 3 \frac{D_n}{\rho_{в}} (\rho_n - \rho_{n,n}(T)) - \frac{64}{27} \frac{\rho_{вг}}{\eta l_1} [(\bar{r})^2]^2 + \\ & + \frac{80}{9} \pi C n [(\bar{r})^2]^2 + \frac{2}{n} \frac{n_0}{\tau_0} \left(\bar{r}_0 \sqrt{(\bar{r})^2} - (\bar{r})^2 \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Источник капель n_0/τ_0 представляется в виде

$$\frac{n_0}{\tau_0} = \frac{N_0}{\tau_0} \frac{(\rho_n - \rho_{n,n}(T))}{\rho_{n,n}(T)},$$

где N_0 — начальная концентрация ядер конденсации.

Уравнения (4) и (8) с зависимостями (3), (6) и (7) определяют изменение во времени параметров спектра капель по размеру в каждом помещении. Обмен капель между помещениями в коде КУПОЛ-М учитывается интегральным образом, а именно переносом плотности капельной составляющей (массы капель в единице объема). Уравнение переноса плотности капельной составляющей имеет вид

$$V_b^i \frac{d\rho_D^i}{dt} = \sum_j \rho_D^j U^j S^j + J_n^i - \gamma_c^i \rho_D^i,$$

где ρ_D — плотность капельной составляющей; V — объем помещения; S — сечение связи; U — скорость смеси в связи; i — индекс помещения; j — индекс связей данного помещения со смежными; $J_n = V_b \tau_V^{-1} \left[\rho_n - \rho_{n,n}(T) \left(1 + \frac{B}{r} \right) \right]$; $B = 2\sigma\mu_n/\rho_b RT$ — критический радиус капли [7]; μ_n — молекулярная масса пара; σ — коэффициент поверхностного натяжения; R — универсальная газовая постоянная; $\gamma_c = 8/27 V_b \times (\rho_b g/\eta l_1) (\bar{r})^2$ — коэффициент при стоке капель за счет седиментации.

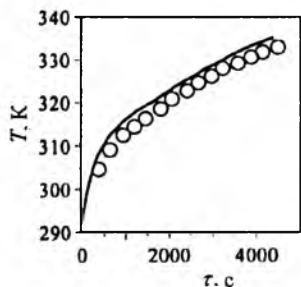
Локальную верификацию представленной математической модели объемной конденсации пара проводили на экспериментальных данных, полученных на модели защитной оболочки объемом 3200 м^3 [5]. Свободный объем модели заполняли насыщенным паром, при этом измеряли давление и температуру атмосферы, температуру внутренней поверхности оболочки, а также характеристики дисперсной среды.

В расчетной схеме свободный объем модели представлялся одним помещением с заданной зависимостью температуры стен от времени, которую определяли в эксперименте (рис. 1). Большой свободный объем экспериментальной модели позволяет предположить, что основной определяющей интегральные характеристики атмосферы является объемная конденсация. Как показали результаты расчета, слив конденсата со стен камеры лишь в 5 раз превышает слив конденсата из объема. Более того, теплоемкость капельной составляющей атмосферы сравнима с теплоемкостью газовой фазы.

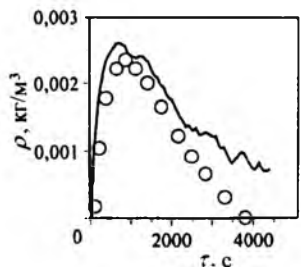
Решение системы уравнений (4), (8) в значительной мере зависит от мощности источника капель. При верификационном расчете предполагалось, что начальная концентрация ядер конденсации N_0 размером $0,01 \text{ мкм}$ составляла 10^8 м^{-3} . Предварительная оценка константы коагуляции равна $\sim 2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$.

На рис. 2 приведена экспериментальная и расчетная зависимость плотности капельной составляющей от времени. Расхождение расчетных и экспериментальных данных в конце процесса объясняется, возможно, неконтролируемой утечкой газокapельной среды из объема камеры. Рис. 3 иллюстрирует сопоставление модельного спектра капель по размеру с экспериментальным спектром на начальном этапе процесса. Неполное соответствие расчетных и экспериментальных данных определяется жестко заданным функциональным видом спектра, который характерен для облачных образований с размером капель в диапазоне $2\text{--}20 \text{ мкм}$ [7].

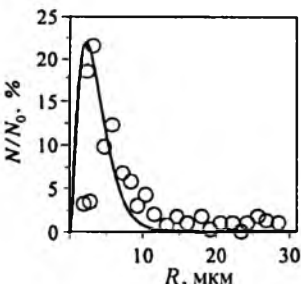
Расчет термодинамических параметров атмосферы, который проводили с помощью кода КУПОЛ-М, не требует точного соответствия макроскопической обстановке микрофизических характеристик объемной конденсации пара. Однако специализированный блок в составе кода в сосредоточенных параметрах для расчета динамики аэрозолей должен основываться на более представительной математической модели, включающей кинетическое уравнение для спектра частиц по размеру и составу.



Р и с. 1. Изменение температуры газа во времени: —, ○ — расчет и эксперимент соответственно



Р и с. 2. Изменение плотности капельной составляющей атмосферы во времени: —, ○ — расчет и эксперимент соответственно



Р и с. 3. Функция распределения капель по размеру за 600 с: —, ○ — расчет и эксперимент соответственно

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Степанов А.С. Исследование микрофизических процессов в дисперсных средах. Дис. на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук. Л., Главная геофизическая обсерватория им. А.И. Воейкова, 1977.
2. Годизов А.Г., Канухина С.В., Шаньгин Н.Н. Объемная конденсация в контейнменте при авариях на ВВЭР с потерей теплоносителя. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 1998, вып. 1, с. 66—70.
3. Годизов А.Г. Физико-математические модели переноса и эволюции обводненного аэрозоля в приложении к тяжелым авариям на АЭС с ВВЭР. — Там же, 1999, вып. 2, с. 90—96.
4. Ефанов А.Д., Лукьянов А.А., Шаньгин Н.Н., Юрьев Ю.С. Расчеты нестационарного тепломассопереноса в защитных оболочках с использованием кода КУПОЛ. — Там же, с. 96—102.
5. Расчетные и экспериментальные исследования тепломассопереноса в защитной оболочке при тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР. Под ред. А.Д. Ефанова. Сб. трудов, ч. 2, гл. 3. Гос. научный центр РФ ФЭИ, Обнинск, 1995.
6. Хргиан А.Х., Мазин И.П. Анализ способов характеристики спектров распределения облачных капель. — Труды ЦАО, 1956, вып. 17, с. 121—126.
7. Седунов Ю.С. Физика образования жидкокапельной фазы в атмосфере. Л.: Гидрометеиздат, 1972.

Поступила в Редакцию 27.07.01

УДК 621.315.592:621.039.512

СРАЩИВАНИЕ ПЛАСТИН КРЕМНИЯ ПОСРЕДСТВОМ ХИМИЧЕСКОЙ СБОРКИ ПОВЕРХНОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫМ НАСЛАИВАНИЕМ И ГАЗОВЫМ СКАЛЫВАНИЕМ

*Суворов А.Л., Графутин В.И., Залужный А.Г., Козодаев М.А.,
Прокопьев Е.П., Шарков Б.Ю. (ГНЦ РФ — ИТЭФ),
Тимошенков С.П., Чаплыгин Ю.А. (Московский институт электронной техники),
Реутов В.Ф. (ОИЯИ)*

В настоящей работе описаны методы получения структур кремний на изоляторе посредством химической и термической обработки кремниевых пластин. Для очистки и получения поверхности заданного химического состава, активирования и модифицирования пластины предлагается термообрабатывать во влажных условиях (включая и химическую сборку) с последующим газовым скалыванием [1—5]. Эти методы являются перспективными для получения многослойных структур и структур путем прямого сращивания пластин кремния [6—8]. Известно [9], что группы Si—OH, полученные молекулярным наслаиванием, полимеризуются при низкой температуре с образованием сильных ковалентных связей Si—O—Si. На этом явлении базируется модифицированная модель и технология сращивания гидрофильных пластин кремния, которая позволяет увеличить прочность сращивания при низкой температуре отжига [10—13]. Рассмотрены различные технологические стадии производства структур посредством химической сборки поверхности молекулярным наслаиванием [4, 5]. Обсуждаются экспериментальные данные, полученные при изготовлении структур кремний на изоляторе сращиванием рабочей пластины кремния, облученной протонами, с опорной пластиной в процессе термообработки при 450—800 °C во влажных условиях, а также свойства (структурные, поверхностные и радиационные) пластин. Предлагаемая термообработка кремния во влажных условиях (включая химическую сборку молекулярным наслаиванием) и газовое скалывание (аналог smart-cut технологии [1, 3—5, 9]) позволяют изготавливать высококачественные структуры, пригодные для получения специальных интегральных схем, полупроводниковых приборов, микромеханических устройств и сенсоров.