

Тепловые процессы в технике. 2023. Т. 15. № 2. С. 62–71
Thermal processes in engineering, 2023, vol. 15, no. 2, pp. 62–71

Научная статья
УДК 533.1; 536.23
DOI: 10.34759/tpt-2023-15-2-62-71

Разработка методики расчета термодинамических и кинетических свойств индивидуальных газов и многокомпонентных смесей для программы GasProp

С.С. Базюк¹✉, Д.А. Ягнятинский¹

¹ НИИ НПО «ЛУЧ», Подольск, Россия
bazukss@sialuch.ru✉

Аннотация. К реакторным установкам класса водо-водяных энергетических реакторов с толерантным топливом и проектируемым высокотемпературным газоохлаждаемым реакторам предъявляются повышенные требования безопасности при эксплуатации. В случае аварий легководных реакторных установок, вызванных всплеском реактивности или потерей теплоносителя, тепловыделяющие элементы нагреваются до 850–950 °С. Повышенное давление гелия с газовыми продуктами деления (¹³³Xe, ⁸⁹Kr, ¹³⁵I) под оболочкой определяет герметичность твэла. При развитии аварии и росте температуры до 1500–2000 °С перегретый пар совместно с водородом и газовыми продуктами деления будет существенно влиять на деградацию активной зоны. Для этих условий актуально уточнение свойств многокомпонентных смесей. Представленная в статье программа *GasProp* позволяет прогнозировать термодинамические и кинетические свойства индивидуальных газов и смесей на основе вириального разложения уравнения состояния реального газа и выводов молекулярно-кинетической теории.

Ключевые слова: теоретическое обоснование, вириальное разложение, реальный газ, вязкость, теплопроводность, трех- и четырехкомпонентные газовые смеси, продукты деления, окислительная среда, повышенное давление, расчет, верификация

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом», грант РФФИ-Росатом № 20-21-00076.

Для цитирования. Базюк С.С., Ягнятинский Д.А. Разработка методики расчета термодинамических и кинетических свойств индивидуальных газов и многокомпонентных смесей для программы GasProp // Тепловые процессы в технике. 2023. Т. 15. № 2. С. 62–71. DOI: 10.34759/tpt-2023-15-2-62-71

Original article

Developing a technique for computing thermodynamic and kinetic properties of individual gases and multi-component mixtures with the GasProp software

S.S. Bazyuk¹✉, D.A. Yagnyatinskii¹

¹ LUCH JSC, Podol'sk, Russia
bazukss@sialuch.ru✉

Abstract. Increased safety requirements are being placed to the designed High-Temperature Gas-cooled Reactors while WWER class reactor facilities (RF) operation. In case of light-water RF accidents caused by the reactivity surge or coolant loss, the heat-producing elements are being heated up to 850–950 °C. The increased helium pressure with gas fission products (^{133}Xe , ^{89}Kr , ^{135}I) under the cladding determines the fuel element tightness. On the accident progression and temperature rise up to 1500–2000°C the overheated steam in conjunction with hydrogen will significantly affect the active zone degradation. The multi-component mixtures properties clarification is up-to-date for these conditions. The GasProp software presented in the article allows predicting thermodynamic and kinetic properties of both individual gases and mixtures based on virial expansion of the real gas state equation and inferences of molecular-kinetic theory.

Keywords: theoretical justification, virial expansion, real gas, viscosity, thermal conductivity, ternary and quaternary gas mixtures, fission products, oxidizing environment, computation, increased pressure, verification

Funding. The reported study was funded by RFBR and ROSATOM according to the research project № 20-21-00076.

For citation: Bazyuk S.S., Yagnyatinskii D.A. Developing a technique for computing thermodynamic and kinetic properties of Individual gases and multi-component mixtures with the GasProp software. *Thermal processes in engineering*, 2023, vol. 15, no. 2, pp. 62–71. (In Russ.). DOI: 10.34759/tp-2023-15-2-62-71

Введение

При повышении интенсивности режимов эксплуатации действующих и проектируемых реакторных установок (3+ и 4-го поколений) применяемые теплоносители и образующиеся газы испытывают повышенный нагрев. Так, в технологии производства водорода с применением высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов (ВТГР) охлаждающий сферическое топливо или цилиндрические компакты гелий разогревается до 1150 °C при нормальной эксплуатации топлива. В условиях аварий легководных реакторных установок (РУ) класса водородных энергетических реакторов (ВВЭР), вызванных всплеском реактивности (RIA) или потерей теплоносителя (LOCA), накопившиеся под оболочкой твэла газовые продукты деления (^{133}Xe , ^{89}Kr , ^{135}I) совместно с ^4He оказывают существенное влияние на работоспособность твэла. Таким образом, уточнение теплофизических свойств газов и смесей на их основе актуально для обоснования безопасности и повышения технико-экономических показателей ядерных энерготехнологий.

К настоящему времени накоплена обширная база экспериментальных и расчетных данных по свойствам водяного пара (H_2O), азота (N_2), кислорода (O_2), гелия (He) [1–6]. Инертные аргон (Ar), ксенон (Xe), криптон (Kr) изучены наиболее полно [7–9]. Тем не менее обзор доступных научно-технических источников показал, что надежные данные по свойствам водяного пара получены до температуры 1073 К

и давления до 200 МПа. Для инертных газов предельными являются температура 1500 К и давление 2000 МПа, что недостаточно для проведения реалистичного анализа топлива РУ ВВЭР и ВТГР в аварийных условиях. В настоящее время известны расчетные значения коэффициентов вязкости и теплопроводности до 3000 К [10], однако все результаты отнесены к разреженному газу. Трех- и многокомпонентные смеси, образующиеся при экспериментальном исследовании аварийных процессов в штатных и толерантных твэлах ВВЭР-1000 на основе аргона, водяного пара и водорода, остаются не рассмотренными.

Учеными С. Чепменом и Д. Энскогом разработана строгая молекулярно-кинетическая теория, описывающая теплофизические свойства многокомпонентных газовых смесей на основе решения кинетического уравнения Больцмана [11]. Точность результатов в рамках этой теории наиболее высока в случае разреженных одноатомных газов, для двухатомных и полиатомных газов разработаны поправки [12]. Созданное аналитическое обоснование в значительной степени надежно для прогнозирования теплофизических свойств газовых смесей за пределами диапазонов физических измерений в отличие от эмпирических методик [13], что особенно важно при численном моделировании и экспериментальном исследовании деградиационных процессов в твэлах РУ ВВЭР и ВТГР при авариях LOCA и DLOFC соответственно [14, 15].

Целью данной работы является создание методики первой версии программы *GasProp* для расчета теплофизических свойств газов и смесей на их основе применительно к нормальным условиям работы и аварийным ситуациям реакторных установок ВВЭР и ВТГР. В качестве практического применения вычисляются кинетические свойства смесей Ar–H₂O–H₂ и He–Xe–Kr в диапазоне температур до 2000 К и давлений – до 20 МПа.

Методика расчета свойств индивидуальных газов и смесей

Методика основывается на вириальном разложении уравнения состояния реального газа [16] при расчете плотности индивидуального газа $\rho(p, T)$ по соотношению:

$$p = R_{\mu} T \sum_{k=0}^{N_{BK}} \rho \cdot F_k^* \cdot (b_0 \rho)^k, \quad (1)$$

где p – давление, Па; T – температура, К; $R_{\mu} = R/M$, $R = 8.314$ Дж/(моль·К) – универсальная газовая постоянная, M – молекулярная масса, кг/моль; b_0 – удельный объем газа, м³/кг. Безразмерные вириальные коэффициенты F_k^* (BK), задаются полиномами:

$$F_k^*(T) = \sum_{j=0}^N x_{k,j} \cdot (T^*)^j, \quad (1.1)$$

где $T^* = T/(\varepsilon/k_B)$, ε – энергия межмолекулярного взаимодействия, Дж; $k_B = 1.381 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – константа Больцмана. При расчете учитываются пять BK, для их аппроксимации используются до 12 индивидуальных коэффициентов x_j . Соотношение (1) решается итерационно относительно плотности, начальным приближением задается величина $p/(R_{\mu} T)$.

Энтальпия индивидуального газа $H(p, T)$ вычисляется с использованием поправок на неидеальность и вид рассматриваемого газа:

$$H(p, T) = p/\rho - R_{\mu} T + R_{\mu} T \sum_{j=1}^{N_{BK}} (b_0 \rho)^j / j \cdot T \sum_{k=0}^N k \cdot x_{k,j} \cdot (T^*)^k + \Delta H_{add}(T) + \Delta H_0, \quad (2)$$

где ΔH_0 – начало отсчета энтальпии при температуре 0 К. Функция $\Delta H_{add}(T)$ зависит от атомности и степени отклонения действительного строения молекул от теоретической модели:

$$\Delta H_{add}(T) = (i + 2) R_{\mu} T / 2, \quad (2.1)$$

где $i = 3$ и $i = 5$ – для одно- и двухатомного инертного газов соответственно. В случае реального и полиатомного газа используется формулировка (2.2):

$$\Delta H_{add}(T) = R_{\mu} T \sum_{j=0}^N \delta_j (K/T)^j. \quad (2.2)$$

Энтропия газа $S(p, T)$ вычисляется при заданных температуре и давлении:

$$S(p, T) / R_{\mu} = \ln(p / (\rho R_{\mu} T)) - \sum_{k=1}^{N_{BK}} (b_0 \rho)^k / k \cdot d(F_k^* \cdot T) / dT + \Delta S_{add}(T) / R_{\mu}; \quad (3)$$

$$\Delta S_{add}(T) = R_{\mu} [A_0 + 5/2(\ln(T) - \ln(A_1))]. \quad (3.1)$$

Параметры A_0, A_1 индивидуальны для каждого из рассматриваемых газов.

Удельная изохорная теплоемкость $c_v(p, T)$ вычисляется интегрированием функции $T(\partial^2 p / \partial T^2)_V$ по удельному объему в диапазоне плотности от 0 до текущего значения с дополнением идеально-газовым слагаемым:

$$c_v(p, T) = -R_{\mu} \sum_{k=1}^{N_{BK}} (b_0 \rho)^k / k \left[2T \frac{dF_k^*}{dT} + T^2 \frac{d^2 F_k^*}{d^2 T} \right] + \Delta c_{vadd}(T). \quad (4)$$

Дополнение $\Delta c_{vadd}(T)$ для одно- и двухатомных газов принято в идеально-газовом приближении (4.1). Для реальных газов используется полиномиальная аппроксимация по обратным температурам в виде (4.2):

$$\Delta c_{vadd}(T) = i R_{\mu} / 2, \quad (4.1)$$

$$\Delta c_{vadd}(T) = R_{\mu} \left(\sum_{j=0}^N \theta_j (K/T)^j - 1 \right). \quad (4.2)$$

Удельная изобарная теплоемкость $c_p(p, T)$ индивидуального газа получена на основе дифференциальной связи с энтальпией:

$$c_p(p, T) = c_v(p, T) + R_{\mu} \sum_{k=0}^{N_{BK}} (b_0 \rho)^k \cdot \left(F_k^* + T \frac{dF_k^*}{dT} \right) + \frac{\sum_{k=0}^{N_{BK}} (k+1) \cdot (b_0 \rho)^k \cdot F_k^*}{\sum_{k=0}^{N_{BK}} (b_0 \rho)^k}. \quad (5)$$

Расчет термодинамических свойств газовых смесей реализован с использованием правил смешения [2]. Для ν -компонентной смеси свойство φ вычисляется как:

$$\varphi_{см} = \sum_{i=0}^{\nu} \sum_{j=0}^{\nu} y_i y_j \cdot \varphi_{ij}, \quad (6)$$

где y – мольная доля газа. Применимы модели алгебраического и геометрического средних значений ($\varphi = (\varphi_i + \varphi_j)/2$ и $\varphi = (\varphi_i \times \varphi_j)^{1/2}$).

Неравновесные свойства газов и смесей на их основе включают коэффициенты теплопроводности $\lambda(p, T)$ и динамической вязкости $\mu(p, T)$ и для индивидуального разреженного газа вычисляются по соотношениям молекулярно-кинетической теории Чепмена – Энскога [3]:

$$\mu_0(T) = 5/16 \cdot (2/3)^{2/3} \left(\pi k_B^3 N_A \right)^{1/6} \times \sqrt{MT} / (M \cdot b_0)^{2/3} \cdot f_{\mu}^{(3)} / \Omega^{(2,2)*}; \quad (7)$$

$$\lambda_0(T) = 75/64 \cdot (2/3)^{2/3} \cdot R \cdot \left(\pi k_B^3 N_A \right)^{1/6} \times \sqrt{T/M} / (M \cdot b_0)^{2/3} \cdot f_{\lambda}^{(3)} / \Omega^{(2,2)*}, \quad (8)$$

где $N_A = 6.023 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ – число Авогадро; $\Omega^{(2,2)*}$ – интеграл парных столкновений, отнесенный к интегралу столкновений молекул газа по модели твердых сфер.

Приближения третьего порядка для коэффициентов вязкости $f_{\mu}^{(3)}$ и теплопроводности $f_{\lambda}^{(3)}$ вычисляются с использованием полиномиальной аппроксимации в диапазоне приведенной температуры $T^* = 0.30-400$:

$$f^{(3)} / \Omega^{(2,2)*} = \sum_{k=0}^{N_f} a_k \cdot (T^*)^{(k-5)/2}. \quad (9)$$

Зависимости кинетических свойств для плотных индивидуальных газов учитываются путем поправок в виде, аналогичном уравнению в вириальной форме [16]:

$$\mu(p, T) = \mu_0(T) \cdot \left(1 + \sum_{i=1}^{N_{\mu}} \Phi_i^{\mu*} \cdot (b_0 \rho)^i \right), \quad (10)$$

$$\lambda(p, T) = \lambda_0(T) \cdot \left(1 + \sum_{i=1}^{N_{\lambda}} \Phi_i^{\lambda*} \cdot (b_0 \rho)^i \right). \quad (11)$$

Неравновесные вириальные коэффициенты Φ_i^* представлены в виде степенных функций:

$$\Phi_i^{\mu*} = \sum_{z=0}^{num_{\mu}} k_{i,z}^{\mu} \cdot (T^*)^{s_{i,z}^{\mu}}, \quad (12)$$

$$\Phi_i^{\lambda*} = \sum_{z=0}^{num_{\lambda}} l_{i,z}^{\lambda} \cdot (T^*)^{s_{i,z}^{\lambda}}, \quad (13)$$

где верхние индексы μ, λ соответствуют рассматриваемому свойству. В настоящее время в программе учитывается до 12 коэффициентов num_{μ} и num_{λ} (от 0 до 11).

Неравновесные свойства газовых смесей вычисляются с использованием соотношений (7)–(13) с заменой молярной массы, диаметра и энергии взаимодействия молекул индивидуального газа на эффективные характеристики бинарной пары:

$$\begin{aligned} M_{ij} &= 2M_i M_j / (M_i + M_j), \\ \sigma_{ij} &= (\sigma_i + \sigma_j)/2, \\ \varepsilon_{ij} &= 64 \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \cdot \sqrt{\sigma_i \sigma_j} / (\sigma_i + \sigma_j). \end{aligned} \quad (14)$$

Индексами i и j обозначены молекулы газов соответствующих сортов.

Коэффициент вязкости разреженной ν -компонентной газовой смеси вычисляется с учетом парных взаимодействий молекул:

$$\mu_{см0}(T) = \frac{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1\nu} & y_1 \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2\nu} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & \dots & H_{\nu\nu} & y_{\nu} \\ y_1 & y_2 & \dots & y_{\nu} & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \dots & H_{1\nu} \\ H_{21} & H_{22} & \dots & H_{2\nu} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & \dots & H_{\nu\nu} \end{vmatrix}}. \quad (15)$$

Элементы детерминантов ($H \times y$) и H -матриц вычисляются следующим образом:

$$H_{ii} = y_i^2 / \mu_i + \sum_{k=1, k \neq i}^{\nu} 2y_i y_k / \mu_{ik} \cdot M_i M_k / (M_i + M_k)^2 \times \quad (15.1)$$

$$\begin{aligned} &\times (5/3 A_{ik}^* + M_k / M_i), \\ H_{ij} &= -2y_i y_j / \mu_{ij} \times \\ &\times M_i M_j / (M_i + M_j)^2 \cdot (5/3 A_{ij}^* - 1), \end{aligned} \quad (15.2)$$

где $A_{ik}^* = \Omega^{(2,2)*} / \Omega^{(1,1)*}$ – табулированная функция приведенной температуры, близкая к 1.

Коэффициент теплопроводности разреженной v -компонентной газовой смеси вычисляется аналогично коэффициенту вязкости с заменой H_{ij} коэффициентов на L_{ij} :

$$\lambda_{см0}(T) = 4 \cdot \det|L \times y| / \det|L|. \quad (16)$$

Элементы $(L \times y)$ и L -матриц являются функциями состава, вида смешиваемых газов и температуры:

$$L_{ii} = -4y_i^2/\lambda_i - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^v y_i y_k / \lambda_{ik} \times \frac{15M_i^2 + (25/2 - 6B_{ik}^*)M_k^2 + 8M_i M_k A_{ik}^*}{(M_i + M_k)^2 \cdot A_{ik}^* (1 + \Delta_{ij})}; \quad (16.1)$$

$$L_{ij} = y_i y_j / \lambda_{ij} \cdot M_i M_j / (M_i + M_j)^2 \times [55/2 - 6B_{ij}^* - 8A_{ij}^*] / A_{ij}^* \cdot (1 + \Delta_{ij}); \quad (16.2)$$

$$\Delta_{ij} = (6C^* - 5)^2 / (55 - 12B^* + 16A^*). \quad (16.3)$$

Безразмерные функции A^* , B^* и C^* , являющиеся сложными функциями отношений интегралов столкновений и зависящие от приведенной температуры, вычисляются в расчетной программе *GasProp* и незначительно отличаются от 1.

Влияние давления на вязкость и теплопроводность рассматривается с учетом зависимостей свойств индивидуальных газов и их мольных долей:

$$\mu_{см}(p, T) = \mu_{см0}(T) \cdot \sum_{i=0}^v y_i \left(1 + \sum_{i=1}^{N_{\mu}} \Phi_i^{\mu*} \cdot (b_0 \rho)^i \right); \quad (17)$$

$$\lambda_{см}(p, T) = \lambda_{см0}(T) \cdot \sum_{i=0}^v y_i \left(1 + \sum_{i=1}^{N_{\lambda}} \Phi_i^{\lambda*} \cdot (b_0 \rho)^i \right). \quad (18)$$

Методика расчета равновесных и кинетических свойств программы *GasProp* использует допущение об идеальном однородном газе в замкнутом объеме. В действительности среди мо-

лекул газа одного сорта и тем более в смесях присутствуют неравномерности температуры и концентрации вещества, что порождает потоки массы, импульса и энергии. Математическое описание диффузии было хорошо изучено в середине XX века [11, 12]. В настоящее время программа *GasProp* ограничена расчетным прогнозированием коэффициентов динамической вязкости и теплопроводности как наиболее важных свойств газов и их смесей, определяющих температурные режимы твэлов ВВЭР и топлива ВТГР при нормальных условиях эксплуатации и авариях с потерей теплоносителя. Последующая версия будет дополнена методикой расчета диффузии в многокомпонентной газовой смеси.

Реализация методики расчета свойств газов в коде *GasProp*

Методика расчета свойств газов и смесей на их основе закодированы в среде MathCAD v.14 [17], что позволило проводить отладку и выводить результаты в виде таблиц и графиков. В настоящее время ведется создание программы *GasProp* с использованием объектно-ориентированного программирования C#10.0 & .NET6 [18].

Молекулярно-кинетические характеристики индивидуальных газов содержатся в библиотеке – текстовом файле *Gas_data.dat*. Библиотека содержит данные по наиболее распространенным технически важным газам – инертным Ar, Xe, Kr, Ne, He, двухатомным H₂, N₂, O₂ и многоатомным – H₂O и воздуху (*Air* представлен эффективной средой). Запись для каждого газа содержит его наименование *Gas*, молекулярную массу, характеристическую температуру и соответствующую удельную плотность, безразмерный дипольный момент $D^* = \mu_{\text{магн}}/DM$, $DM = 3.33564 \cdot 10^{-30}$ Кл·м, значения термодинамических поправок ΔH_0 , A_0 и A_1 для вычисления энтальпии и энтропии соответственно, а также ключ *gas*, определяющий атомность газа. Пример организации хранения данных для нескольких газов представлен в табл. 1.

Таблица 1. Представление молекулярно-кинетических и термодинамических характеристик индивидуальных газов в библиотеке *Gas_data.dat*

<i>Gas</i>	<i>gas</i>	μ_j , г/моль	ε/k_B , К	b_0 , м ³ /кг	ΔH_0 , Дж/кг	A_0 , Дж/(кг·К)	A_1 , К	D^*
<i>Air</i>	2	28.96	100.36514	2.0226015E-3	2.534E5	0.0	0.0	---
Xe	1	131.30	327.963	0.666669E-3	120.76923E3	20.353718	293.15	---
H ₂	2	2.01594	34.8852	15.7478E-3	394.853	0.0	0.0	---
H ₂ O	2	18.015	277.864021	1.78945674E-3	0.0	0.0	0.0	1.71147905

Коэффициенты полиномов F_k^* (1.1) и множители для вириальных коэффициентов Φ_k^* (12, 13) заданы в файле **vir_coef.dat**. Результаты вычислений Ω -интегралов столкновений для расчетов коэффициентов переноса в первом, втором и высших приближениях затабулированы в файле **Collision_INT.dat**.

Расчет теплофизических свойств смесей Ar–H₂O–H₂ и He–Xe–Kr

Ниже приведены результаты расчетов теплофизических свойств трехкомпонентных смесей Ar–H₂O–H₂ и He–Xe–Kr в диапазоне температур 500–2000 К и давлений 0.1–20 МПа. Применение методик *GasProp* справедливо, поскольку степень диссоциации H₂O менее 1 %.

Зависимость динамического коэффициента вязкости смеси Ar–H₂O–H₂ при объемном содержании водорода 2 % от температуры представлена на рис. 1. В рассмотренном диапазоне вязкость смеси повышается в 3.1–3.6 раз, при этом большее изменение соответствует насыщению водяным паром. Влияние содержания H₂O возрастает с повышением температуры (рис. 2). Результаты расчетов показывают, что в диапазоне мольных содержаний водяного пара до 50 % можно принимать с хорошим приближением линейную зависимость динамического коэффициента вязкости от объемной доли H₂O. Программа *GasProp* автоматически совершает переход от трехкомпонентной смеси к бинарной при нулевом содержании одного из компонентов (рис. 2, область $y_{H_2O} = 0$).

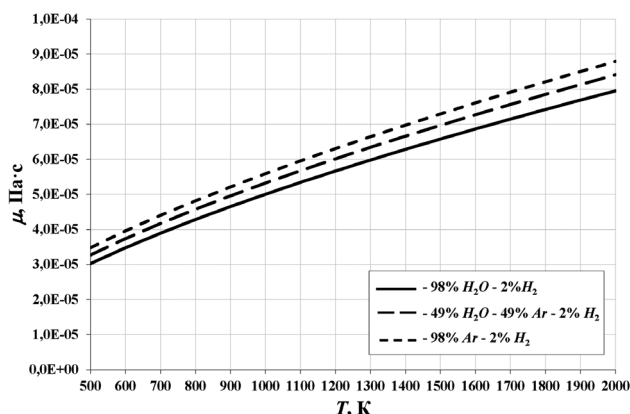


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента вязкости смеси Ar–H₂O–H₂ при содержании 2 % (об.) H₂

Коэффициент теплопроводности смеси Ar–H₂O–H₂ практически монотонно повышает-

ся в диапазоне температур 500–2000 К (рис. 3), при этом с увеличением содержания H₂O перенос тепла между молекулами газа становится более интенсивным. В условиях, характерных для максимальной проектной и запроектной аварий РУ ВВЭР-1000 с потерей теплоносителя, коэффициент теплопроводности газовой смеси будет составлять около 85–119 мВт/(м·К). Полученная зависимость коэффициента теплопроводности газовой смеси от содержания водяного пара (рис. 4) показывает, что замещение H₂O инертными газами приводит к снижению коэффициента теплопроводности.

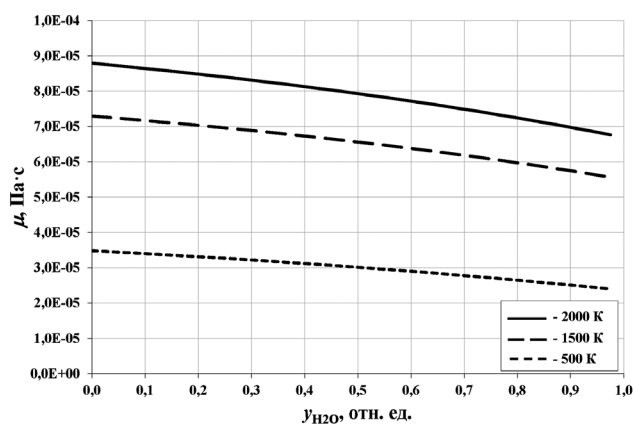


Рис. 2. Зависимость динамического коэффициента вязкости смеси Ar–H₂O–H₂ от содержания водяного пара

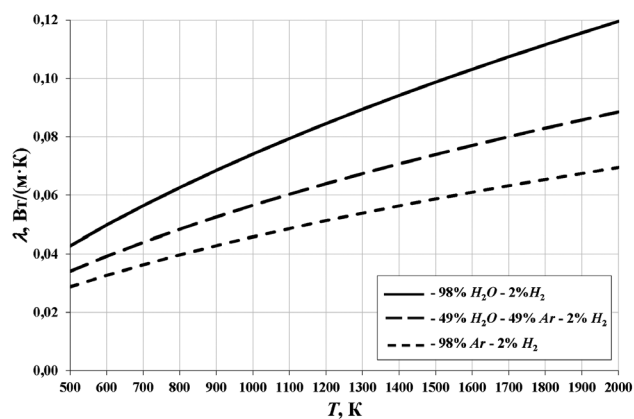


Рис. 3. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности смеси Ar–H₂O–H₂ при содержании 2 % (об.) H₂

Для He–Xe–Kr смеси характерно значительное соотношение размеров и масс молекул, различающихся более чем на порядок ($M_{H_2O} / M_{Ar} = 0.45$ и $M_{He} / M_{Xe} = 0.03$), что приводит к снижению точности расчетов кинетических свойств гелия с ГПД. Зависимости динамического коэффициента вязкости и теплопро-

водности He–Xe–Kr смеси от температуры при различном содержании газовых продуктов деления, что соответствует различным моментам кампании твэлов РУ ВВЭР-1000, представлены на рис. 5, 6. С ростом объемного содержания Xe и Kr до 0.5 коэффициент теплопроводности смеси значительно понижается и нелинейно деградирует при ее нагреве. В условиях аварий РУ ВВЭР-1000 коэффициент теплопроводности He–Xe–Kr среды в твэлах, содержащей до 5 % (об.) ГПД, ожидается на уровне 0.35–0.60 Вт/(м·К) (рис. 7).

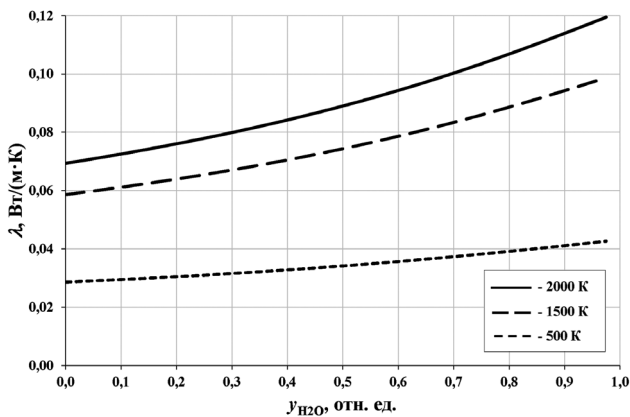


Рис. 4. Зависимость коэффициента теплопроводности смеси Ar–H₂O–H₂ от содержания водяного пара

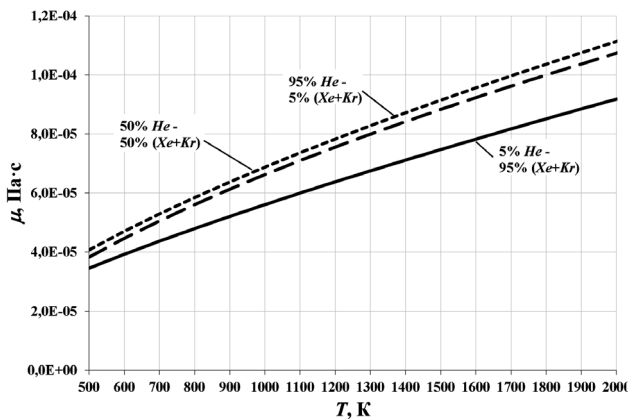


Рис. 5. Зависимость динамического коэффициента вязкости смесей He–Xe–Kr от температуры

Результаты расчетов кинетических свойств трехкомпонентных смесей с учетом повышенного давления представлены на рис. 8. Содержание ксенона и криптона в He–Xe–Kr смеси принималось 5 % (об.) (соответствует выгоранию 65 МВт·сут/кг U для твэлов ВВЭР-1000). Доля водорода 2 % (об.) выбрана для Ar–H₂O–H₂ смеси, при этом $у_{Ar}/у_{H_2O} \approx 0.1$. С ростом температуры влияние поправочного множителя сни-

жается от 1.34 до 1.05 для смеси, содержащей водяной пар, что согласуется с основными положениями МКТ.

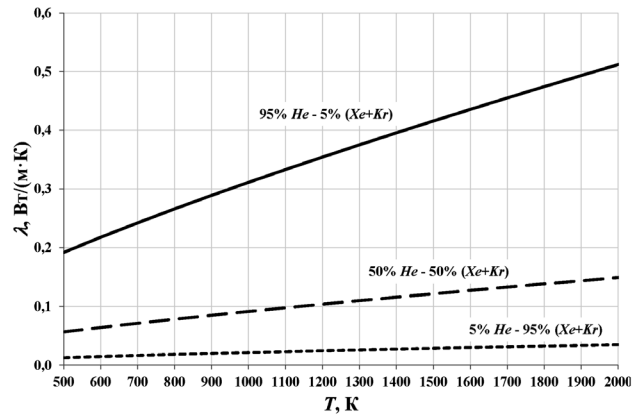


Рис. 6. Зависимость коэффициента теплопроводности смесей He–Xe–Kr от температуры

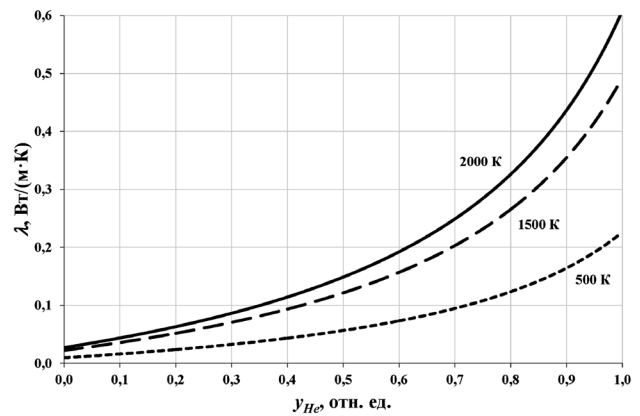


Рис. 7. Зависимость коэффициента теплопроводности смесей He–Xe–Kr от содержания ГПД

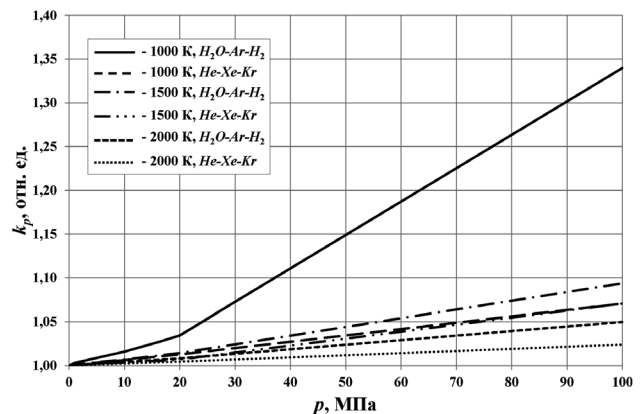


Рис. 8. Влияние давления на кинетические свойства трехкомпонентных смесей

Влияние давления проявляется нелинейной зависимостью, близкой к квадратичной в соответствии с (17). При нормальной эксплуатации

твэлов учет влияния давления на теплопроводность газовой среды под оболочкой твэла РУ ВВЭР-1000 показывает ее повышение на уровне 0.8 %. В условиях запроектных аварий РУ ВВЭР-1000 и ВТГР учет плотного газа является несущественным, поскольку максимальное увеличение кинетических свойств прогнозируется не более, чем на 3.4 % для насыщенной смеси на основе водяного пара.

Верификация полученных результатов

Для подтверждения корректности результатов расчета с помощью *GasProp* проведено сопоставление теплофизических свойств эквимоллярных составов трехкомпонентных смесей с данными [10]. Также расчетные значения коэффициентов вязкости и теплопроводности смесей сопоставлены со значениями, полученными в программе REFPROP 10.0 [19, 20].

Для бинарной смеси гелия и аргона с отношением молярных масс (M_{Ar}/M_{He}) = 10 установлено, что относительные расхождения по коэффициентам вязкости и теплопроводности не превышают 5.2 и 2.5 % соответственно (табл. 2).

Последующие расчеты показали, что указанное отклонение вызвано использованием различных потенциалов взаимодействия между молекулами гелия. В работе [10] и программе REFPROP 10.0 заложены индивидуальные потенциалы ^4He , в *GasProp* применен классический потенциал Леннарда – Джонса (6–12).

Для трех- и четырехкомпонентных эквимоллярных газовых смесей зависимости коэффициентов динамической вязкости и теплопроводности показаны на рис. 9.

Отклонения теплофизических свойств многокомпонентных газовых смесей, прогнозируемых с использованием *GasProp*, от данных Kestin et al. [10] составляют +2.8 – +3.0 % в диапазоне температур 500–2000 К.

Заключение

1. На основе методов равновесной термодинамики и МКТ разработана программа *GasProp* для вычисления «из первых принципов» свойств газов, верифицированная в диапазоне температур 500–2000 К и давлений 0,1–100 МПа.

Таблица 2. Сопоставление данных по коэффициентам динамической вязкости и теплопроводности смеси He–Ar

T, К	$\mu \times 10^{-7}$, Па·с						$\lambda \times 10^{-3}$, Вт/(м·К)					
	$y_{\text{He}} = 0.25$			$y_{\text{He}} = 0.50$			$y_{\text{He}} = 0.25$			$y_{\text{He}} = 0.50$		
	GP*	Kest	RP	GP	Kest	RP	GP	Kest	RP	GP	Kest	RP
500	357.2	344.8	344.0	358.1	344.8	347.7	48.25	47.20	47.52	79.19	77.26	78.23
1000	574.5	557.3	563.2	575.4	557.3	570.6	77.63	76.46	78.01	127.5	125.1	128.4
1500	758.6	736.3	736.9	760.9	736.3	н/д	103.0	101.0	102.7	169.4	166.0	н/д
2000	919.9	879.9	889.2	925.8	879.9	н/д	125.7	122.9	124.7	207.6	202.8	н/д

*GP – *GasProp*, Kest – [10], RP – REFPROP 10.0

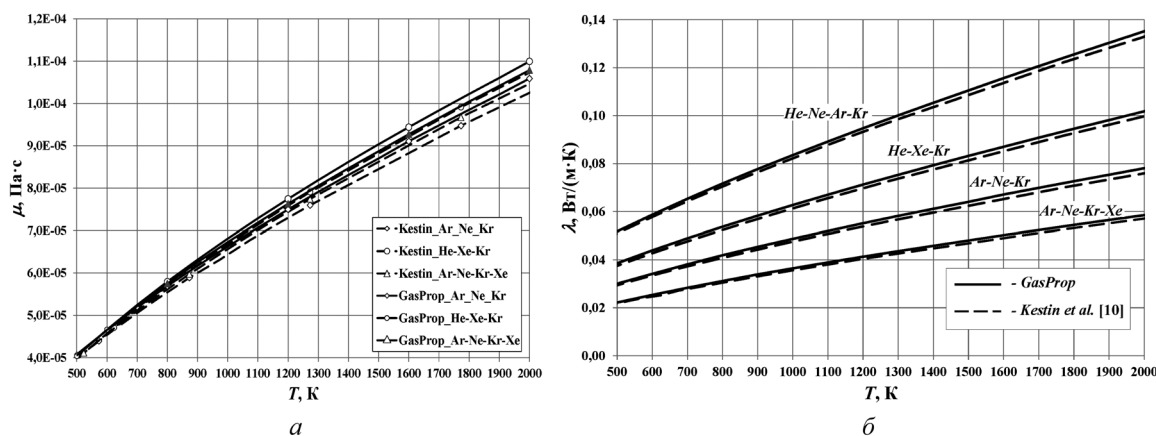


Рис. 9. Сопоставление результатов расчетов трех- и четырехкомпонентных эквимоллярных газовых смесей: а – динамический коэффициент вязкости $\mu_{см0}(T)$; б – коэффициент теплопроводности $\lambda_{см0}(T)$

2. Выполнены расчеты свойств трехкомпонентных смесей Ar–H₂O–H₂ и He–Xe–Kr в диапазоне температур от 500 до 2000 К и давлений от 0.1 МПа до 20.0 МПа. Для смеси на основе водяного пара с содержанием 2% (об.) водорода коэффициент теплопроводности прогнозируется в диапазоне 85–119 мВт/(м·К). В условиях аварий РУ ВВЭР-1000 коэффициент теплопроводности He–Xe–Kr среды в твэлах, содержащей до 5% (об.) ГПД, ожидается на уровне 0.35–0.60 Вт/(м·К).

3. Анализ результатов расчетов показал, что учет влияния давления на теплофизические свойства газов при давлениях до 20 МПа пренебрежимо мал.

4. Сопоставление результатов расчетов кинетических свойств эквимольных смесей He–Xe–Kr, He–Ne–Ar–Kr с использованием программы *GasProp* с надежными данными и сертифицированной программой REFPROP 10.0 показало завышение коэффициента динамической вязкости и теплопроводности, не превышающее 3%. Верификация результатов расчетов термодинамических свойств индивидуальных газов и смесей требует дальнейшего исследования.

5. Программа *GasProp* может быть использована для уточнения свойств газовой полости толерантных твэлов водо-водяных энергетических реакторов для детализации их режимов работы и снижения степени консерватизма. Дальнейшее развитие программы *GasProp* найдет практическое применение при проектном обосновании характеристик активных зон инновационных легководных и высокотемпературных газоохлаждаемых реакторов.

Список источников

1. Александров А., Григорьев Б. Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара. Москва, 1999. 168 с.
2. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. Термодинамические свойства азота. Москва, 1977. 352 с.
3. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. Термодинамические свойства воздуха. Москва, 1978. 276 с.
4. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. Термодинамические свойства кислорода. Москва, 1981. 304 с.
5. Сычев В.В., Вассерман А.А., Козлов А.Д. и др. Термодинамические свойства гелия. Москва, 1984. 320 с.
6. Гамбург Д.Ю., Семенов В.П., Дубовкин Н.Ф. Водород. Свойства, получение, хранение, транспортирование, применение: справочное издание. Москва, 1989. 672 с.
7. Arp V.D., McCarty R.D. Thermophysical Properties of Helium-4 From 0.8 to 1500 K With Pressures to 2000 MPa. National Institute of Standards and Technology, 1989, 142 p.
8. Jain P.C. Thermal conductivity of some rare gases according to the Lennard-Jones (12-6) potential. *Journal of Physics: Applied Physics*, 1980, vol. 13, pp. 29–32. DOI: 10.1088/0022-3727/13/1/011.
9. Faubert F.M., Springer G.S. Measurement of the Thermal Conductivity of Argon, Krypton, and Nitrogen in the Range 800-2000 °K. *The Journal of Chemical Physics*, 1972, vol. 57, no. 6, pp. 2333–2340. DOI: 10.1063/1.1678589
10. Kestin J. et al. Equilibrium and Transport Properties of the Noble Gases and Their Mixtures at Low Density. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1984, vol. 13, no. 1, pp. 229–303. DOI: 10.1063/1.555703
11. Chapman S., Cowling T.G. The mathematical theory of non-uniform gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge University Press, 1970, 448 p.
12. Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. Москва, 1961. 929 с.
13. Reid R., Prausnitz J., Poling B. The properties of gases and liquids. 4th ed. 1987, McGraw Hill, 741 p.
14. Skrzypek M., Skrzypek E., Stempniewicz M., Malesa J. Study on the DLOFC accident of the GEMINI+conceptual design of HTGR reactor with MELCOR and SPECTRA. *Journal of Physics: Conference Series 2048*, 2021, pp. 1–14. DOI: 10.1088/1742-6596/2048/1/012043
15. Prošek A. RELAP5 and TRACE Calculations of LOCA in PWR. NUREG/IA-0479, 2017, 35 p.
16. Зубарев В.Н., Козлов А.Д., В.М. Кузнецов В.М. и др. Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях: справочник. Москва, 1989. 232 с.
17. Очков В. MathCAD 14 для студентов и инженеров. Санкт-Петербург, 2009. 512 с.
18. Прайс М. C#10 и .NET6. Современная кросс-платформенная разработка. Санкт-Петербург, 2022. 848 с.
19. Huber M. Models for Viscosity, Thermal Conductivity and Surface Tension of Selected Pure Fluids as Implemented in REFPROP v10.0. NISTIR 8209. 2018, 271 p. DOI: 10.6028/NIST.IR.8209.
20. Lemmon E.W., Bell I.H. et al. REFPROP Documentation (rel. 10.0). 2018, 131 p.

References

1. Aleksandrov A., Grigor'ev B. Tablitsy teplofizicheskikh svoystv vody i vodyanogo para [Tables of thermophysical properties of water and steam]. Moscow, 1999, 168 p. (In Russ.)
2. Sychev V.V., Vasserman A.A., Kozlov A.D. et al. Termodinamicheskie svoistva azota [Thermodynamic properties of nitrogen]. Moscow, 1977, 352 p. (In Russ.)
3. Sychev V.V., Vasserman A.A., Kozlov A.D. et al. Termodinamicheskie svoistva vozdukh [Thermodynamic properties of air]. Moscow, 1978, 276 p. (In Russ.)
4. Sychev V.V., Vasserman A.A., Kozlov A.D. et al. Termodinamicheskie svoistva kisloroda [Thermodynamic properties of oxygen]. Moscow, 1981, 304 p. (In Russ.)
5. Sychev V.V., Vasserman A.A., Kozlov A.D. et al. Termodinamicheskie svoistva geliya [Thermodynamic properties of helium]. Moscow, 1984, 320 p. (In Russ.)
6. Gamburg D.Yu., Semenov V.P., Dubovkin N.F. Vodorod. Svoistva, poluchenie, khranenie, transportirovanie, primeneniye: spravochnoe izdanie [Hydrogen. Properties, production, storage, transportation, application]. Moscow, 1989, 672 p. (In Russ.)

7. **Arp V.D., McCarty R.D.** Thermophysical Properties of Helium-4 From 0.8 to 1500 K With Pressures to 2000 MPa. National Institute of Standards and Technology, 1989, 142 p.
8. **Jain P.C.** Thermal conductivity of some rare gases according to the Lennard-Jones (12-6) potential. *Journal of Physics: Applied Physics*, 1980, vol. 13, pp. 29–32. DOI: 10.1088/0022-3727/13/1/011
9. **Faubert F.M., Springer G.S.** Measurement of the Thermal Conductivity of Argon, Krypton, and Nitrogen in the Range 800-2000 °K. *The Journal of Chemical Physics*, 1972, vol. 57, no. 6, pp. 2333–2340. DOI: 10.1063/1.1678589
10. **Kestin J.** et al. Equilibrium and Transport Properties of the Noble Gases and Their Mixtures at Low Density. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1984, vol. 13, no. 1, pp. 229–303. DOI: 10.1063/1.555703
11. **Chapman S., Cowling T.G.** The mathematical theory of non-uniform gases. An account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases. Cambridge University Press, 1970, 448 p.
12. **Girshfel'der Dzh., Kertiss Ch., Bird R.** Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkosti [The molecular theory of gases and liquids.]. Moscow, 1961, 929 p. (In Russ.)
13. **Reid R., Prausnitz J., Poling B.** The properties of gases and liquids. 4th ed. 1987, McGraw Hill, 1987, 741 p.
14. **Skrzypek M., Skrzypek E., Stempniewicz M., Malesa J.** Study on the DLOFC accident of the GEMINI+conceptual design of HTGR reactor with MELCOR and SPECTRA. *Journal of Physics: Conference Series 2048*, 2021, pp. 1–14. DOI: 10.1088/1742-6596/2048/1/012043
15. **Prošek A.** RELAP5 and TRACE Calculations of LOCA in PWR. NUREG/IA-0479, 2017, 35 p.
16. **Zubarev V.N., Kozlov A.D., V.M. Kuznetsov V.M.** et al. Teplofizicheskie svoystva tekhnicheski vazhnykh gazov pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh: Spravochnik [Thermophysical properties of industry-valuable gases at high temperatures and pressures. Handbook]. Moscow, 1989, 232 p.
17. **Ochkov V.** MathCAD 14 dlya studentov i inzhenerov [MathCAD 14 for students and engineers]. Saint-Petersburg, 2009, 512 p.
18. **Prais M.** C# 10 i .NET 6. Sovremennaya kross-platfornennaya razrabotka [C#10 and .NET 6 – Modern Cross-Platform Development: Build apps, websites, and services with ASP.NET Core 6, Blazor, and EF Core 6 using Visual Studio 2022]. Saint-Petersburg, 2022, 848 p.
19. **Huber M.** Models for Viscosity, Thermal Conductivity and Surface Tension of Selected Pure Fluids as Implemented in REFPROP v10.0. NISTIR 8209. 2018, 271 p. DOI: 10.6028/NIST.IR.8209
20. **Lemmon E.W., Bell I.H.** et al. REFPROP Documentation (rel. 10.0). 2018, 131 p.

Статья поступила в редакцию 25.01.2022; одобрена после рецензирования 30.01.2023; принята к публикации 16.02.2023.

The article was submitted on 25.01.2022; approved after reviewing on 30.01.2023; accepted for publication on 16.02.2023.