

# 三维 CFD 仿真软件 GASFLOW 气溶胶 分析模块研发与应用

王方年<sup>1</sup>, 肖建军<sup>1,\*</sup>, 周志伟<sup>2,\*</sup>

(1. 卡尔斯鲁厄理工学院, 德国 卡尔斯鲁厄 76344; 2. 清华大学, 北京 100084)

**摘要:** 反应堆严重事故下, 放射性裂变产物以气溶胶的形式随水蒸气、氢气等一起大量释放至安全壳中。安全壳内气溶胶迁移与沉降受安全壳内热工水力深度影响。本文阐述了三维 CFD 仿真软件 GASFLOW 气溶胶分析模块研发方法, 利用该方法实现了安全壳内气体相和气溶胶颗粒相的三维耦合仿真与并行计算, 验证后的程序能准确评估气溶胶迁移、沉降及其在安全壳内的三维分布。大型先进压水堆典型事故序列下安全壳内气溶胶行为三维 CFD 分析表明: CFD 计算时间可接受, 具有较好工程实用性; 气溶胶的沉积和积悬浮总量与系统程序结果吻合较好; 气溶胶三维分布受气流场、浓度场、温度场影响; 气溶胶吸湿增长是气溶胶自然去除的关键因素等。该软件模块可拓展至安全壳喷淋去除气溶胶、氢爆下气溶胶再悬浮等其他复杂热工水力工况下气溶胶行为研究。

**关键词:** 气溶胶; 三维仿真; CFD; 核电安全壳; 安全壳热工水力; 气溶胶自然去除

**中图分类号:** TL364.4

## Development and Application of Aerosol Analysis Module in 3D CFD Code GASFLOW

WANG Fangnian<sup>1</sup>, XIAO Jianjun<sup>1,\*</sup>, ZHOU Zhiwei<sup>2,\*</sup>

(1. Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe 76344, Germany;

2. Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** In the event of a severe nuclear reactor accident, the radioactive fission products in the form of aerosols will be released in large quantities into the containment along with steam, hydrogen, and other gases. The transport and deposition of aerosols in the nuclear containment are significantly influenced by the thermal-hydraulic conditions of the containment. The development approach of a three-dimensional computational fluid dynamics (CFD) code called GASFLOW is outlined, specifically tailored to analyze the thermal-hydraulics and behavior of aerosols in the containment during severe accidents. The Eulerian-Lagrangian approach enables the mass, momentum, and energy two-way coupling between the continuous gas and the dispersed particles. This approach

\* 通信作者: 肖建军, 周志伟

is promising to model the behaviors of aerosols/droplets in 3D simulations of a full-scale nuclear containment. The particle group method is applied in the Lagrangian approach to track the particle trajectory. The ordinary differential equations, which couple the local heat and mass transfer between particles and the surrounding gas mixtures, are solved by the Runge-Kutta method. The GASFLOW aerosol analysis module is extensively validated by experiments, such as Gunn-Kinzer, Ranz-Marshall, CARAIDAS, and TOSQAN experiments, which respectively demonstrate good agreement with respect to each phenomenon: free-falling particles without heat and mass transfer, evaporation dynamics of an isolated stagnant droplet in dry air, the momentum and heat transfers of a single droplet under typical post-accident atmosphere conditions, and the gas mixing and depressurization in the containment by water spray. The validated program can accurately evaluate the three-dimensional distribution of aerosol transportation and deposition in the containment. The three-dimensional CFD analysis of aerosol behavior in the containment during a typical severe accident of a large advanced pressurized water reactor indicates that the CFD calculation time is acceptable and has good engineering practicality for large dry nuclear containment. The total deposited and suspended aerosol mass is in good agreement with the results predicted by the lumped parameter code MELCOR. The three-dimensional distribution of aerosols is influenced by the flow field, concentration field, and temperature field. Hygroscopic growth of aerosols is a key factor affecting the natural removal of aerosols. This aerosol analysis module in GASFLOW can be extended to study aerosol behavior in other complex thermal-hydraulic conditions, such as aerosol removal by containment spray and aerosol entrainment by intensive convection or hydrogen explosion.

**Key words:** aerosol; 3D simulation; CFD; nuclear containment; containment thermal-hydraulics; natural removal of aerosol

反应堆严重事故下,放射性裂变产物主要以气溶胶的形式通过一回路释放至安全壳内,气溶胶在安全壳内的迁移、沉降与再悬浮高度耦合安全壳内的热工水力,如气体流动、蒸汽冷凝、喷淋、氢气燃爆等<sup>[1]</sup>。微小气溶胶颗粒自身存在凝并、吸湿等现象。安全壳内气溶胶行为分析是一项在复杂安全壳结构下的多物理场多尺度的耦合研究。当前研究这一现象的手段主要是采用系统程序,如 MELCOR、CONTAIN、COCOSYS、ASTAC 等<sup>[2-5]</sup>,通过计算重力、热泳和扩散泳等作用下气溶胶的沉降速率,获得气溶胶在安全壳内的分布。该方法能够快速完成各类事故序列下安全壳内气溶胶行为分析以获得较高工程应用价值。近些年,计算流体力学(CFD)的发展,为气溶胶行为研究手段提供了另一个具有发展前景的选择<sup>[6-7]</sup>。CFD 技术能实现气溶胶的三维动力学模拟,获得精细的

气溶胶迁移、沉降与三维分布,可为核电站安全防护与应急决策提供更为全面的数据支撑。因此,三维 CFD 气溶胶分析软件的研发有其必要性、必然性。软件需在现象上实现安全壳内热工水力和气溶胶行为耦合仿真,数值上实现并行计算以达到工程化应用的目的。随着三代反应堆非能动安全技术的发展,安全壳喷淋措施的安全级别下降,安全壳内气溶胶的自然去除显得越发重要<sup>[8]</sup>。本文将介绍三维 CFD 仿真软件 GASFLOW 气溶胶分析模块研发目标与方法,并以大型先进压水堆为对象,研究其安全壳内气溶胶的自然去除与三维 CFD 分析。

### 1 三维 CFD 气溶胶分析模块开发

采用欧拉-拉格朗日方法实现安全壳内连续气体相(空气、水蒸气、氢气、惰性气体等)和离散颗粒相(气溶胶、液滴、粉尘等)耦合模拟,

具体如图 1 所示。欧拉方法应能模拟多组分气体扩散与混合、可燃气体燃烧与燃爆、热工水力（如壁面传热传质）、全流速气体湍流流动、大规模工程应用的亚网格模型（如氢气点火器、复合器、气体分离、抑压水池、热源、热阱等）等。拉格朗日方法应能模拟粒子动力学、随机湍流扩散、壁面沉积与再悬浮、相变与燃爆、大规模工

程应用的亚网格模型（如喷淋注入、颗粒释放、气溶胶过滤排放、粉尘过滤器等）等。三维 CFD 气溶胶模块的开发难点在于，气溶胶颗粒行为机理复杂，需在复杂三维几何结构中、可压缩全速流动工况下，完成多物理场多尺度耦合计算，算法需高效与精确，程序能够大规模并行计算，计算数据能够可视化。

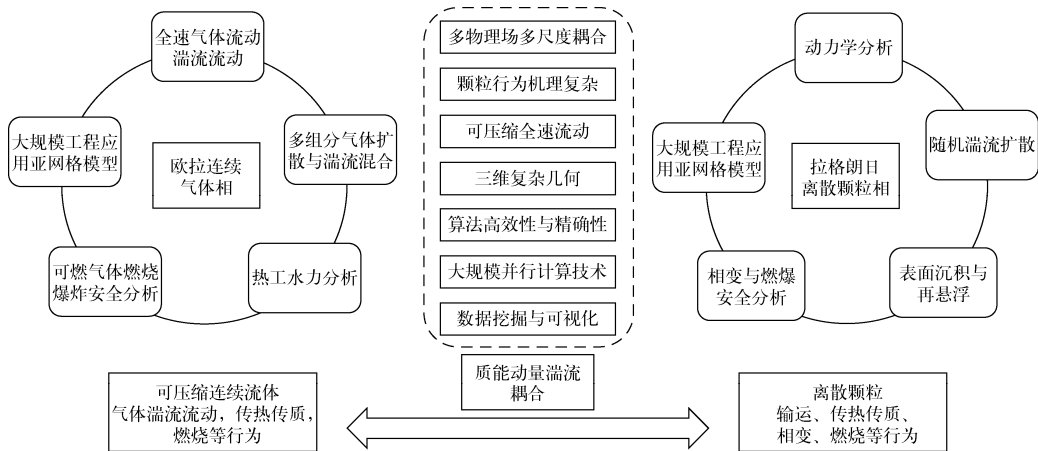


图 1 GASFLOW 中欧拉-拉格朗日方法

Fig. 1 Eulerian Lagrangian approach in CFD code GASFLOW

### 1.1 控制方程与算法

欧拉-拉格朗日方法的一般性控制方程表达如下：

$$V_g \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g \phi_g) + \nabla \cdot (\rho_g \phi_g \mathbf{u}_g) \right] dV_g = \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi_g) dV_g + S_{\phi, g} + S_{\phi, p} \quad (1)$$

$$\sum_{n=1}^N \left[ \frac{\partial (\rho_{p,n} V_{p,n} \phi_{p,n})}{t} \right] = S_{\phi, p} \quad (2)$$

式中： $\phi$  为一般性变量，可以是速度  $\mathbf{u}$ 、比内能  $I$ 、湍动能  $\kappa$ 、湍流耗散  $\epsilon$ ；下标  $g$  表示连续气体， $p$  表示离散颗粒； $\Gamma$  为一般性扩散系数，包含扩散系数  $D$ 、黏度  $\mu$ 、导热率  $\lambda$ 、比热容  $c_v$ 、湍流黏度  $\mu_t$ 、常数  $\sigma$  等相关参数； $S_{\phi, p}$  为相间耦合源项，下标  $\phi$  可代表质量、动量、能量、湍动能和湍流耗散。

针对连续气体相，采用有限体积法和并行化全流速流动 ICEd-ALE 算法求解三维可压缩纳维-斯托克斯 (N-S) 方程。针对离散颗粒相，跟踪每个粒子的质量、动量、能量和湍流的变化。连续气体相与离散颗粒相的具体耦合策略如图 2 所示。欧拉方法计算得到的各网格的

气体组分、速度、能量和湍流，用于计算处于该网格中拉格朗日离散粒子的运输、传热传质等。各网格内所有颗粒的质量、动量、能量和湍流变化量的总和作为相间源项传递至气体相，即气体相和颗粒相通过各控制方程的源项  $S_{\phi, p}$  进行相间耦合。源项  $S_{\phi, p}$  涵盖受力模型、随机湍流扩散模型、沉积模型、壁面碰撞模型、再悬浮模

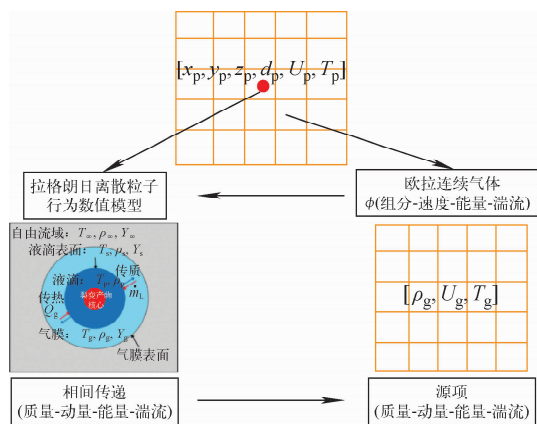


图 2 连续气体相与离散颗粒相的耦合策略

Fig. 2 Coupling approach between continuous gas and dispersed particle

型、气溶胶吸湿增长模型、颗粒过滤模型、液滴传热传质模型、液滴与气溶胶/粉尘相互作用模型、粉尘燃爆模型、核素衰变热模型、病毒气溶胶感染风险评估模型等。不同应用场景下,需开发特定的模型。

### 1.2 并行计算

真实情况下,气溶胶粒径小(微米级别)、粒子数多,由于计算资源的限制无法追踪每个真实气溶胶颗粒。通常采用粒子云概念将真实粒子分成一定数目的模拟粒子云,每个模拟粒子云中的粒子具有相同属性,即粒子的材质、速度、粒径、温度等相同。为保证气溶胶行为具有统计学意义,模拟粒子数不能过小。针对安全壳内气溶胶行为研究,模拟粒子数仍需要几十万至几百万。因此,离散粒子并行计算是气溶胶分析软件工程化应用的关键。

针对连续气体,GASFLOW 通过流体计算子域划分,将各计算子域分配至各中央处理器(CPU)中,并基于并行计算库 MPI 完成通信,如图 3 所示,将规则的计算域均分至 4 个 CPU 中完成并行计算。该方案加速比延展性较好,但 CPU 核间(节点间)通信量大,对通信效率和并行线性求解器/前处理器性能要求高。

针对离散粒子,GASFLOW 提供了两套方案。1) 基于流体计算子域的粒子混合并行方案(图 3a),粒子与所在流体网格分配在同一 CPU,信息本地交互,通信效率高,但分配到每个 CPU 的粒子数不相等,粒子计算负载可能极不均衡。CPU 核 1 与 CPU 核 4 二者载荷不均,载荷重的 CPU 核 4 的计算速度影响全局。2) 基于粒子的混合并行方案(图 3b),粒子按

编号均匀分配至每个 CPU,颗粒计算载荷均衡,但粒子与所在流体网格可能不在同一个 CPU,需要优化气体-粒子间通信效率。CPU 核 1 至核 4 之间,载荷相当,但每个 CPU 中可能承担了位于其他网格中粒子的计算。如在 CPU 核 3 中,蓝、紫、红色粒子计算分配在黄色流体网格中,气体-粒子间通信决定全局并行效率。

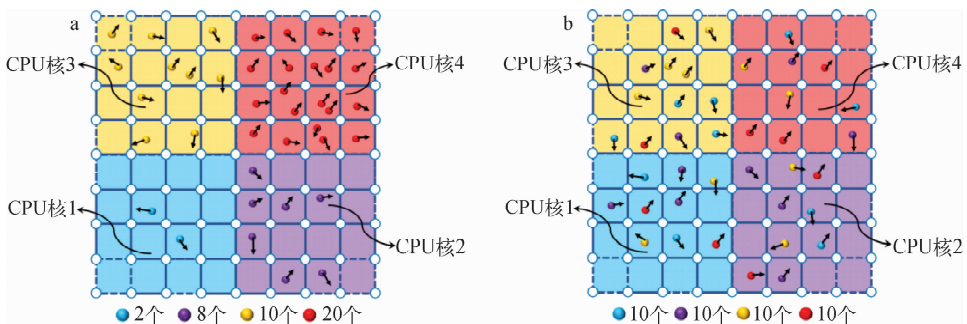
上述两类离散粒子并行计算节点间、节点内部均分别采用 MPI、OpenMP 多进程处理库进行数据传输。

### 1.3 程序验证

GASFLOW 在热工水力、氢气燃爆方面已有完整的程序验证,结果显示程序能准确完成安全壳内全流速流场<sup>[9]</sup>、湍流<sup>[10-11]</sup>、可燃气体燃烧与燃爆<sup>[12-16]</sup>、传热传质<sup>[17]</sup>等现象研究。针对气溶胶分析模块,验证矩阵如表 1 所列。验证分 3 部分进行:1) 在颗粒基本行为方面,完成了单个颗粒的速度、传热传质、湍流等现象的单项性能实验验证计算;2) 并在此基础上,完成了液滴群(如安全壳喷淋)对气体夹带、搅混、冷却等现象的实验验证计算;3) 在气溶胶方面,进行了气溶胶吸湿增长、气溶胶沉积与迁移、液滴群与气溶胶作用(如喷淋去除气溶胶)等实验的验证计算。计算结果吻合实验值,详见文献<sup>[18-20]</sup>。

## 2 大型先进压水堆安全壳内气溶胶行为三维 CFD 分析

本文以大型先进压水堆为对象,研究其大破口事故在堆芯注入工况下安全壳内气溶胶三维分布及其自然去除能力。



a——基于流体计算子域的粒子混合并行方案;b——基于粒子的混合并行方案

图 3 离散粒子并行计算方案

Fig. 3 Parallel computing method of dispersed particles



表 1 GASFLOW 气溶胶分析模块验证矩阵

Table 1 Validation matrix of aerosol analysis module in GASFLOW

| 编号 | 现象分类   | 验证现象                    | 验证实验                               |
|----|--------|-------------------------|------------------------------------|
| 1  | 颗粒基本行为 | 单个粒子自由落体终极速度            | Gunn-Kinzer 实验 <sup>[21]</sup>     |
| 2  |        | 单个静止液滴传热传质粒径随时间变化       | Ranz-Marshall 实验 <sup>[22]</sup>   |
| 3  |        | 单个运动液滴传热传质不同温度湿度环境下粒径变化 | CARAIDAS 台架 <sup>[23]</sup>        |
| 4  |        | 粒子在网格湍流中运动路径            | 网格湍流实验 <sup>[24]</sup>             |
| 5  |        | 湍流射流中粒子分布               | 湍流射流实验 <sup>[25]</sup>             |
| 6  | 液滴群    | 喷淋液滴开放空间气体夹带            | CALIST 试验台架 <sup>[26]</sup>        |
| 7  |        | 喷淋冷却安全壳内气体压力温度变化        | TOSQAN 台架 test 101 <sup>[27]</sup> |
| 8  |        | 密闭容器内喷淋液滴搅混气体浓度变化       | TOSQAN 台架 test 113 <sup>[28]</sup> |
| 9  |        | 喷淋冷却效率                  | THAI TH-19A/B/C <sup>[29]</sup>    |
| 10 | 气溶胶    | CsI 和 CsOH 干气溶胶吸湿增长     | Mishra 实验 <sup>[30]</sup>          |
| 11 |        | 安全壳喷淋与气溶胶行为             | THAI AW-4 A/B <sup>[29]</sup>      |
| 12 |        | 气溶胶迁移与沉积                | LACE 台架 LA4 实验 <sup>[31]</sup>     |
| 13 |        | 气溶胶迁移与沉积                | PHEBUS 台架 FP1/2/3 <sup>[32]</sup>  |

## 2.1 几何模型、事故序列与源项

安全壳三维几何结构如图 4 所示。安全壳为双层安全壳<sup>[33]</sup>，直径约 50 m、高约 75 m。GASFLOW 计算网格可由安全壳几何模型，如计算机辅助设计软件 CAD 几何建模生成 .stl 文件，通过程序自带前/后处理工具 Pyscan 生成。本文选取一回路冷管段发生双端断裂大破口事故，在堆腔注水冷却系统(CIS)投入、压力容器内熔融物堆内滞留(IVR)策略下，研究安全壳内压力和温度的变化，氢气、水蒸气分布以及各类裂变产物行为。安全壳相关安全系统投

入假设如下：安全壳喷淋系统不可用；非能动安全壳热量排出系统(PCS)可用；安全壳消氢系统不可用。冷却剂分别从破口两侧喷射到安全壳内隔间，破口等效直径为 0.54 m。由 MELCOR 计算得到的大破口事故源项<sup>[34-35]</sup>如图 5、6 所示，包括热工水力计算所需的压力容器侧和蒸汽发生器侧破口冷却剂流量、各组分比例，及其压力和温度；气溶胶行为计算所需的各类气溶胶注入质量流量、粒径分布(如有)等。本案例 GASFLOW 流体计算域网格约 35 万、气溶胶颗粒 100 万、问题时间 10 h(因绝大部分

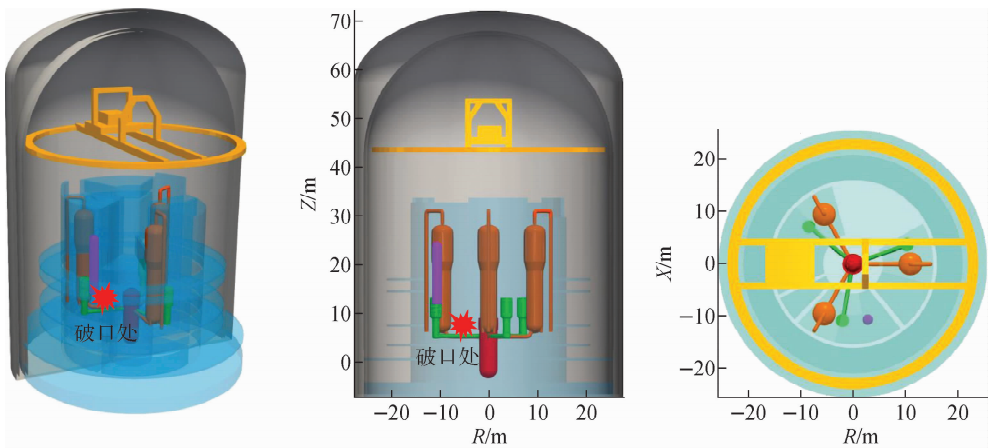


图 4 安全壳几何结构

Fig. 4 Geometry model of containment

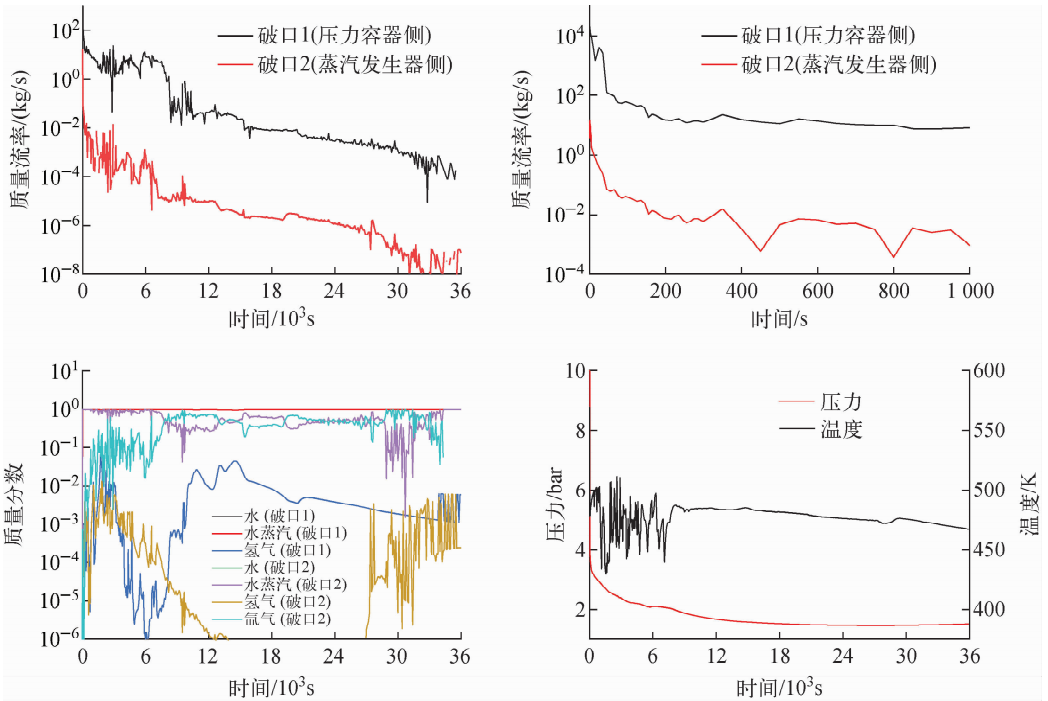


图5 GASFLOW 安全壳热工水力计算所需源项

Fig. 5 Source term using in GASFLOW simulation of containment thermal hydraulics

气溶胶如 CsI 已释放结束),采用 32 核 CPU 计算,所需墙钟时间为数天,计算成本可接受。PCS 在 22.6 h 后启动,对气溶胶行为影响较小,计算模型中未考虑。

力、温度在大破口初期阶跃上升,缘于大破口初期大量的质能释放。安全壳压力于事故后 0~25 s 内上升达到峰值,而后开始下降。压力下降原因包含安全壳内热构建传热冷却以及蒸汽释放量的减少。当安全壳冷却大于破口释热时,压力开始下降。在质能释放 3~4 h 后,释放量减小至与安全壳冷却能力平衡的状态,故安全壳响应在后期趋于稳定。安全壳响应整体体现了破口质能释放与安全壳冷凝传热的影响。GASFLOW 计算值在时程变化趋势上与 MELCOR 保持一致。差别主要来源于二者物理模型、几何模型(包括传热面积、自由容积等)的不同,但差别不大,这为后期进行气溶胶行为对比分析提供了可靠的热工水力基础。

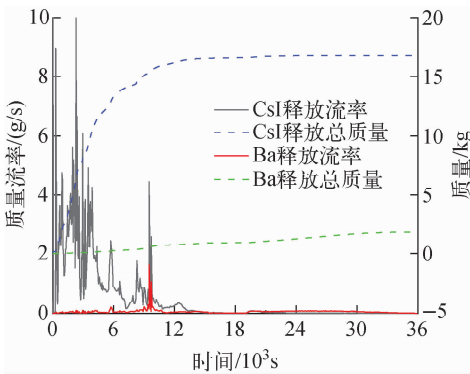


图6 GASFLOW 气溶胶行为计算所需源项

Fig. 6 Source term using in GASFLOW simulation of aerosol behavior

## 2.2 计算结果分析

### 1) 热工水力

安全壳内压力、平均温度响应如图 7 所示。MELCOR 取值位置在安全壳穹顶,GASFLOW 取值为所有流体计算域的平均值。安全壳压

安全壳内主要气体组分有氧气、氮气、水蒸气、氢气、氩气(或其他放射性惰性气体)。本算例中未启用消氢措施,氧气、氮气质量不变。其他气体组分随事故进程及安全壳冷却而变化。图 7 显示了安全壳内压力和温度的变化,其中压力变化趋势与水蒸气质量一致,说明安全壳内压力主要由水蒸气浓度变化决定。图 8 为安全壳内氢气与氩气的质量变化,氢气和氩气约在 24 000 s 时释放完毕,此时二者在安全壳内

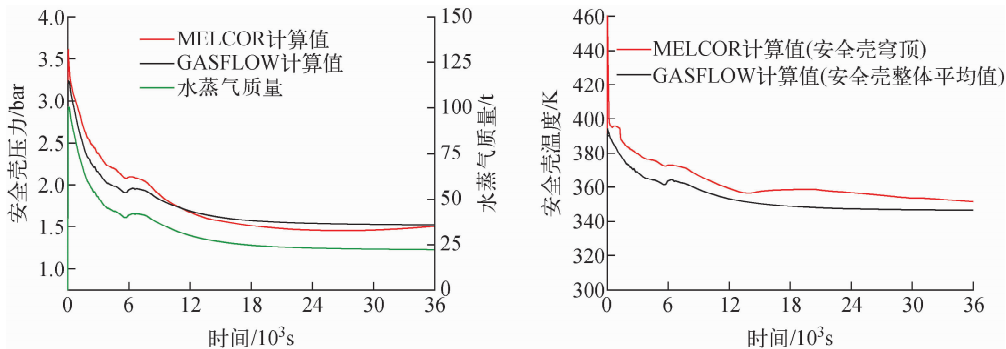


图7 安全壳内压力和温度的变化

Fig. 7 Change of pressure and temperature in containment

的质量会达到最大值。氢气主要在前2 500 s 释放；氙气则一直持续释放至24 000 s。二者在释放初期质量相当，由于氢气的密度远低于氙气（氙气密度约2 倍于空气），因此氢气的体积份额上升较快。释放结束时，氢气浓度整体未到2%，氙气浓度小于0.1%的水平。

安全壳内三维气体流场如图9所示。在质能释放初期(2 000 s)，水蒸气射流夹带着空气，

以较大流速冲至安全壳穹顶，并扩散开。该阶段气体以水蒸气为主，水蒸气的流动具有代表性。水蒸气相较于初始气体，空气温度高、密度小，在释放动能和自身浮升力作用下，进入安全壳上部后，挤压周围空气向安全壳靠近壁面的区域流动，形成循环流动，如图9中的速度矢量箭头所指。随后，安全壳内上部气流向安全壳下半部湍流扩散，形成搅混和漩涡。在事故中后期，即12 000 s，因质能释放的减少，气流场逐渐减弱，气体流速相对较大的区域集中在释放源附近，气体无法直接流动至安全壳顶部。

图10为安全壳内温度场的变化。质能释放初期，安全壳内温度较高，主要由源项的温度决定。事故后期，由于安全壳冷却，安全壳内气体温度逐渐降低。图10显示，事故初期，温度分层明显；在事故18 000 s后，温度在气体搅混和安全壳内热构件吸热双重作用下，分布较为均匀。因此，可以推断因温度梯度引起的气溶胶热泳作用在事故初期较为显著。

安全壳内三维水蒸气分布如图11所示。与气体流场变化趋势类似，在质能释放初期，水

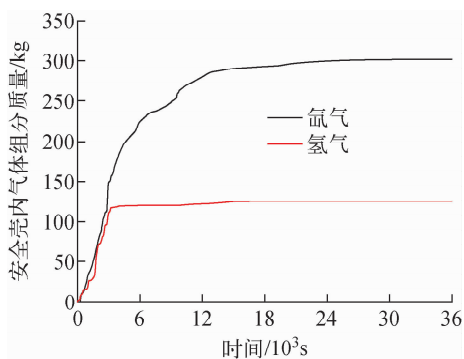


图8 安全壳内氢气和氙气的质量变化

Fig. 8 Mass change of hydrogen and xenon in containment

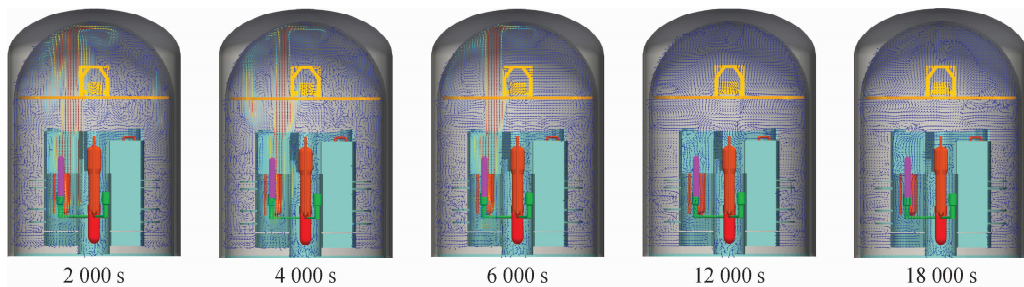


图9 安全壳内气体速度场

Fig. 9 Velocity vector of gas in containment

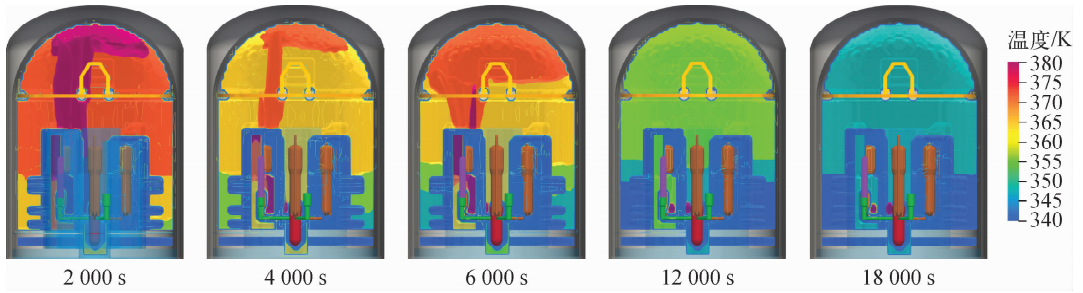


图 10 安全壳内气体温度场

Fig. 10 Gas temperature in containment

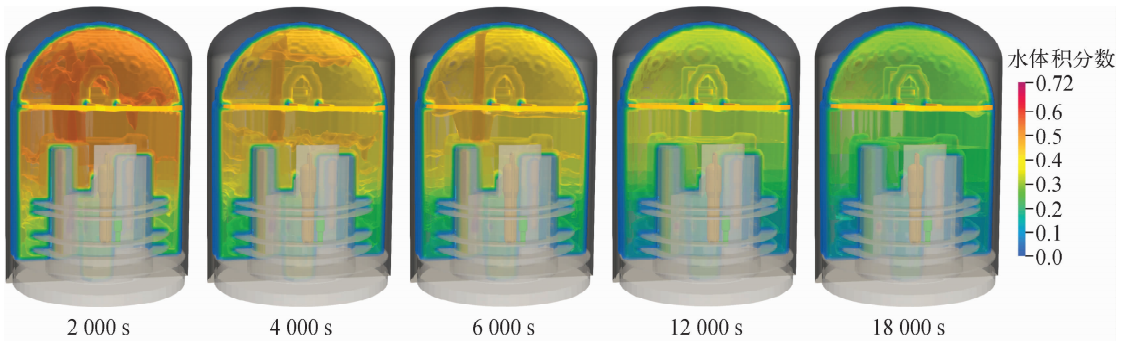


图 11 安全壳内水蒸气浓度场

Fig. 11 Steam volume fraction in containment

蒸气流速较大,冲至安全壳穹顶并扩散开,形成循环流动。事故中期,蒸汽向下扩散,安全壳下半部换热面积较大,其传热会促进蒸汽向下流动。安全壳内水蒸气存在分层,上部浓度较高,下部浓度较低,水蒸气分层会导致气溶胶扩散和吸湿增长出现差别,从而影响气溶胶的沉积与分布。本案例中,水蒸气浓度较高( $>30\%$ ),空气湿度基本接近饱和,因此气溶胶吸湿效果很好且相对均匀。但须强调,在事故末期,如果 PCS 启动,出现更强的蒸汽浓度分层,此时蒸汽冷凝会增强气溶胶扩散作用,但在蒸汽浓度减少的区域出现较小的气溶胶吸湿效应,需综合评估。

## 2) 气溶胶行为

本算例中,假设采用单一气溶胶直径  $0.1 \mu\text{m}^{[30]}$ ,即认为 CsI 和 Ba 颗粒核心平均粒径为  $0.1 \mu\text{m}$ ,CsI 和 Ba 气溶胶-液滴的平均粒径为干气溶胶吸湿增长后的平衡态直径。但程序是可以按粒径分布输入的,一般按指数正态分布分成若干组进行输入。图 12 为安全壳内气溶胶的三维分布。不同颜色的粒子代表速度

分布( $0\sim 1 \text{ m/s}$ ,截断速度范围为更好显示对比度)。事故初期(2 000 s前),气溶胶在蒸汽发生器隔间释放,随气体流场运动至安全壳穹顶并向两边扩散,形成循环,这与流场发展基本一致。被气流携带的气溶胶接触壁面后会出现碰撞、粘附、反弹,并可能沉积在壁面上。气溶胶颗粒速度较大区域也是气体流速较大的区域。气溶胶受冷凝、对流传热形成的蒸汽浓度场、温度场影响,隔间内部和安全壳壁面附近的气溶胶浓度明显高于其他自由空间。气溶胶受重力作用,释放一段时间后,地坑等水平壁面附近气溶胶数目明显增多,并一直持续至事故后期。气溶胶在地坑等水平壁面上方积聚、沉积的可能性增大。在事故中后期(12 000 s后),气体流场强度减弱,导致此时释放的气溶胶无法运动至安全壳上部空间,气溶胶迁移的空间主要在释放隔间以及隔间附近的安全壳壁面。

需要指出,图 12 中气溶胶模拟粒子的数目取决于程序用户的输入。为达到气溶胶行为的统计效果,一般在计算代价可接受范围内尽可能设置更多的模拟粒子数,特别在气溶胶释放



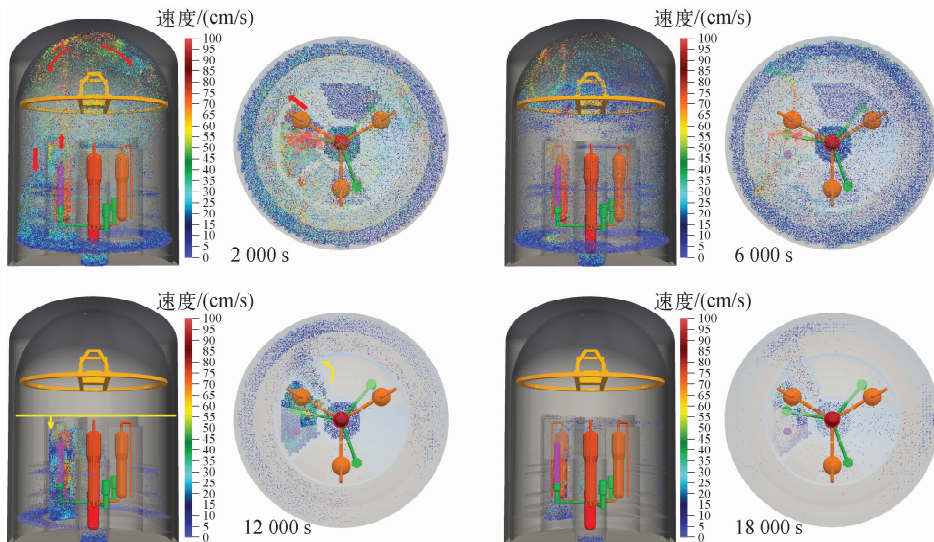


图 12 安全壳内气溶胶的三维分布

Fig. 12 3D distribution of aerosol in containment

质量流量较小时,气溶胶的沉积、分布统计效应比较敏感,因此需保证一定量模拟粒子数。针对当前反应堆安全壳真实几何和严重事故算例,采用 100 万左右的模拟粒子数可以满足条件。

图 13、14 分别为挥发性气溶胶 CsI 与非挥发性气溶胶 Ba 核心质量变化(即净裂变产物,扣除气溶胶中吸湿水的质量)。事故初期,气溶胶释放至安全壳内,空气中悬浮的气溶胶与气溶胶的注入量基本保持一致,说明此时还未有气溶胶沉积。经过一段时间(1 500 s)后,气溶胶在重力等作用下,开始沉降至安全壳壁面,气溶胶的沉降速率与其注入速率基本相当(蓝、黑两实线的斜率基本相当)。而后,气溶胶 CsI 注入放缓至完毕,气溶胶沉积速率也随后缓慢减

小至 0。与之对应的是安全壳空气中悬浮的气溶胶质量,事故开始存在的较多,事故末期时(36 000 s)空气中基本不存在悬浮的 CsI 气溶胶,说明释放至安全壳内的 16.7 kg 气溶胶 CsI 几乎全部沉降在安全壳壁面上。气溶胶 Ba 的注入相对滞后,气溶胶沉积一直保持一定速率,截止到计算时间 36 000 s,释放至安全壳内 1.8 kg 的气溶胶 Ba 约有 1.5 kg 沉降在安全壳壁面上。

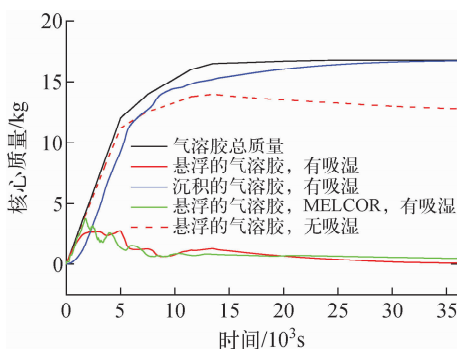


图 13 挥发性气溶胶 CsI 核心质量

Fig. 13 Nucleus mass of volatile aerosol CsI

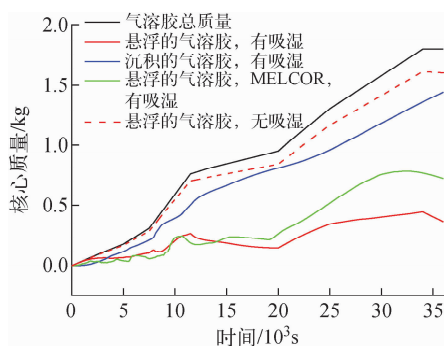


图 14 非挥发性气溶胶 Ba 核心质量

Fig. 14 Nucleus mass of non volatile aerosol Ba

与 MELCOR 对比,GASFLOW 计算的空气中悬浮的气溶胶略少、沉降效应较强,但发展趋势一致。气溶胶自然去除机制主要是在重力作用下产生的沉降、因蒸汽在壁面冷凝而形成的扩散泳、由温度梯度而引起热泳、气溶胶吸

湿增长等引起的粒径增加等。气溶胶沉降模型 LP 程序与 CFD 程序存在很大差别,LP 程序针对各沉降机制计算的沉积速度乘以沉积面积然后求和得到气溶胶沉积量。在 CFD 中,安全壳内温度梯度、浓度梯度是通过气体流场作用至气溶胶动力学行为上,气溶胶自身重力、吸湿增长等效应可直接反映在气溶胶颗粒动量方程中,当气溶胶抵达壁面时通过碰撞、粘附、反弹等模型计算气溶胶在壁面上的沉积量。Paw<sup>[36]</sup>提供的数据表明了临界速度  $U_i^*$  为粒子反弹概率为 50% 上下时速度的假设合理性。即对于粒子速度  $U_i < 0.5U_i^*$ , 粒子始终粘附,而对于  $U_i > 1.5U_i^*$ , 粒子始终反弹。速度范围为  $0.5U_i^* < U_i < 1.5U_i^*$  的粒子反弹的概率表示为:

$$0 \leq \frac{0.5U_i^* + U_i}{U_i^*} \leq 1 \quad (3)$$

GASFLOW 中提供了多个气溶胶吸湿增长模型,以经典的 Brechtel & Kreidenweis 模型<sup>[37]</sup>为例,有:

$$RH = 100 \exp\left(\frac{4M_w \sigma_s}{RT_{surf} \rho_w d} I_s \Phi_s M_w c\right) \quad (4)$$

其中:  $c = \frac{\rho_s d_0^3}{M_s \rho_w (d^3 - d_0^3)}$  为溶液的摩尔质量浓度; RH 为气溶胶所处位置气体的相对湿度; R 为理想气体常数;  $\rho$ 、 $M$  分别为密度、分子摩尔质量;  $I$  为 1 个溶质分子完全溶解后产生的离子数,一般取 2;  $\Phi$ 、 $\sigma$  分别为渗透系数、溶液表面张力系数; 下标 s 表示溶液, w 表示水;  $d$  为稀释后液滴直径;  $d_0$  为干气溶胶直径。

由图 13、14 可见,无吸湿模型下,悬浮的气溶胶数量远大于有吸湿模型下的结果。气溶胶吸湿增长,增大了气溶胶的质量与体积,气溶胶沉积作用显著增强。可见,在研究气溶胶的自然去除时,气溶胶的吸湿增长不可忽略。

还需注意,在事故初期凝并对气溶胶迁移行为有重要影响,凝并作用会增加气溶胶质量/体积,直观的理解应会促进气溶胶沉降。未来程序开发中,计划考虑这一现象至气溶胶颗粒的粒径分布中。

### 3 结论

本文介绍了三维 CFD 仿真软件 GASFLOW 气溶胶分析模块研发方法,该方法可完成安全

壳内气体相和气溶胶颗粒相的三维多物理场多尺度耦合仿真与并行计算。气溶胶分析模块在颗粒基本行为、液滴群搅混与冷却、气溶胶迁移与沉积等方面验证计算吻合实验结果。软件并行计算性能使得核电安全壳气溶胶 CFD 计算时间可接受,具有较好工程实用性。

大型先进压水堆安全壳内气溶胶自然去除与三维 CFD 分析表明:安全壳压力、温度响应和空气中悬浮的气溶胶质量与 MELCOR 程序结果趋势上和数值大小上基本一致。水蒸气浓度场、气体温度场的三维分布是影响气溶胶自然去除中扩散泳、热泳的重要参数。气体流场与微米级气溶胶颗粒的动量耦合决定着气溶胶输运。气溶胶的吸湿增长是影响气溶胶自然去除的关键因素,安全壳内水蒸气浓度场(空气湿度)非常重要。安全壳内三维热工水力计算是准确计算气溶胶行为的前提。采用欧拉-拉格朗日方法 CFD 程序是完成三维安全壳热工水力-气溶胶行为耦合分析的可靠工具。GASFLOW 提供的安全壳内气溶胶浓度场、气溶胶沉降的三维分布,可为后续气溶胶过滤排放(如有)等提供准确的边界条件,软件可拓展至安全壳喷淋去除气溶胶、氢爆下气溶胶再悬浮等其他复杂热工水力工况下气溶胶行为研究。下一步程序开发将重点关注气溶胶凝并,喷淋液滴与气溶胶的相互作用等,并计划采用大规模台架实验进行程序验证。

感谢国家重点研发计划(2020YFB1901401)对本项目中清华大学的支持。

### 参考文献:

- [1] ALLELEIN H J, AUVINEN A, BALL J, et al. State of the art report on nuclear aerosols in reactor safety: OECD Technical Report, NEA/CSNI/R5,5[R]. Paris: [s. n.], 2009.
- [2] GAUNTT R O, CASH J E, COLE R K, et al. MELCOR computer code manuals, Version 1.8.6, Vol 1: Primer and users' guide, NUREG/CR 6119 [R]. United States: Sandia National Laboratories, 2005.
- [3] WILLIAMS K M D, TILLS J, GRIFFITH R O, et al. Code manual for CONTAIN 2.0: A computer code for nuclear reactor containment analy



- sis, NUREG/CR 6533, SAND97 1735[R]. United States: Sandia National Laboratories, 1997.
- [4] KLEIN HESSLING W, ARNDT S, WEBER G, et al. COCOSYS v2.4 user's manual[R]. Germany: Gesellschaft für Anlagen und Reaktor sicherheit (GRS), 2015.
- [5] van DORSSELAERE J P, SEROPIAN C, CHATELARD P, et al. The ASTEC integral code for severe accident simulation[J]. Nuclear Technology, 2009, 165(3): 293 307.
- [6] KALTENBACH C, LAURIEN E. CFD simulation of aerosol particle removal by water spray in the model containment THAI[J]. Journal of Aerosol Science, 2018, 120: 62 81.
- [7] LIANG H, ERKAN N, SOLANS V, et al. Numerical simulation and validation of aerosol particle removal by water spray droplets with OpenFOAM during the Fukushima Daiichi fuel debris retrieval[J]. Frontiers in Energy Research, 2020, 8: 102.
- [8] 付亚茹, 耿珺, 孙大威, 等. AP1000 核电厂安全壳内气溶胶自然去除分析[J]. 原子能科学技术, 2017, 51(4): 700 705.
- FU Yaru, GENG Jun, SUN Dawei, et al. Aerosol natural removal analysis in containment for AP1000 nuclear power plant[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2017, 51(4): 700 705 (in Chinese).
- [9] XIAO J, BREITUNG W, KUZNETSOV M, et al. GASFLOW MPI: A new 3 D parallel all speed CFD code for turbulent dispersion and combustion simulations, Part I: Models, verification and validation[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(12): 8 346 8 368.
- [10] ZHANG H, LI Y, XIAO J, et al. Detached eddy simulation of hydrogen turbulent dispersion in nuclear containment compartment using GASFLOW MPI[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(29): 13 659 13 675.
- [11] ZHANG H, LI Y, XIAO J, et al. Large eddy simulations of the all speed turbulent jet flow using 3 D CFD code GASFLOW MPI[J]. Nuclear Engineering and Design, 2018, 328: 134 144.
- [12] XIAO J, TRAVIS J, KUZNETSOV M. Numerical investigations of heat losses to confinement structures from hydrogen air turbulent flames in ENACCEF facility[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015, 40(38): 13 106 13 120.
- [13] XIAO J, KUZNETSOV M, TRAVIS J R. Experimental and numerical investigations of hydrogen jet fire in a vented compartment[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43(21): 10 167 10 184.
- [14] XIAO J, BREITUNG W, KUZNETSOV M, et al. Numerical investigations of turbulent slow deflagration of premixed H<sub>2</sub> air H<sub>2</sub>O mixture in THAI test HD 22 using CFD code GASFLOW MPI[C]//17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH 17). Xi'an: [s. n.], 2017.
- [15] XIAO J, BREITUNG W, KUZNETSOV M, et al. Development and validation of the parallel all speed CFD code GASFLOW MPI for detonation of premixed H<sub>2</sub> air mixture in a hemispherical balloon[C]// International Conference on Nuclear Engineering. American Society of Mechanical Engineers. Shanghai: [s. n.], 2017.
- [16] WANG F, XIAO J, JORDAN T. GASFLOW MPI analysis on deflagration in full scale hydrogen refueling station experiments: H<sub>2</sub> air premixed cloud and high pressure H<sub>2</sub> jet[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(32): 14 725 14 739.
- [17] LI Y, ZHANG H, XIAO J, et al. Numerical investigation of natural convection inside the containment with recovering passive containment cooling system using GASFLOW MPI[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018, 114: 1 10.
- [18] XIAO J, SVISHCHEV A, JORDAN T. Development and validation of two way fluid particle coupling in turbulent flows for a CFD code[C]// International Conference on Nuclear Engineering. Chengdu: [s. n.], 2013.
- [19] WANG F, XIAO J, JORDAN T. Extension of spray droplet/aerosol heat transfer model in containment atmosphere under severe accident[J]. Annals of Nuclear Energy, 2023, 193: 110060.
- [20] WANG F, XIAO J, JORDAN T. Two way Eulerian Lagrangian coupling approach in GASFLOW code for containment spray modelling[J]. Nuclear Engineering and Design, 2023, 413: 112495.
- [21] GUNN R, KINZLER G D. The terminal velocity of fall for water droplets in stagnant air[J].

- Journal of Atmospheric Sciences, 1949, 6(4): 243-248.
- [22] RANZ W E, MARSHALL W R. Evaporation from drops: Part I & II [J]. Chemical Engineering Progress, 1952, 48: 173-180.
- [23] MALET J, GELAIN T, MIMOUNI S, et al. Spray model validation on single droplet heat and mass transfers for containment applications SARNET 2 benchmark [C] // The 14th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal hydraulics. Canada: [s. n.], 2011.
- [24] WELLS M R, STOCK D E. The effects of crossing trajectories on the dispersion of particles in a turbulent flow [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1983, 136: 31-62.
- [25] MODARRESS D, WUERER J, ELGHOBASHI S. An experimental study of a turbulent round two phase jet [J]. Chemical Engineering Communications, 1984, 28(4-6): 341-354.
- [26] MALET J, MIMOUNI S, MANZINI G, et al. Gas entrainment by one single French PWR spray, SARNET 2 spray benchmark [J]. Nuclear Engineering and Design, 2015, 282: 44-53.
- [27] MALET J, LEMAITRE P, PORCHERON E, et al. Modelling of sprays in containment applications: Results of the TOSQAN spray benchmark (Test 101) [C] // Proceedings of The First European Review Meeting on Severe Accident Research, ERSMAR 2005. France: [s. n.], 2005.
- [28] MALET J, HUANG X. Influence of spray characteristics on local light gas mixing in nuclear containment reactor applications [J]. Computers & Fluids, 2015, 107: 11-24.
- [29] GUPTA S, SCHMIDT E, FREITAG M, et al. Experimental investigations on containment spray performance under severe accident conditions [C] // Proceedings of 8th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR). Warsaw: [s. n.], 2017.
- [30] MISHRA G, MANDARIYA A K, TRIPATHI S N, et al. Hygroscopic growth of CsI and CsOH particles in context of nuclear reactor accident research [J]. Journal of Aerosol Science, 2019, 132: 60-69.
- [31] MCCORMACK J D, HILLIARD R K, SALGADO J M. Final report of experimental results of LACE test LA4 Late containment failure with overlapping aerosol injection periods [R]. USA: Westinghouse, 1987.
- [32] LAURIE M, MARCH P, SIMONDI TEIS SEIRE B, et al. Containment behaviour in Phébus FP [J]. Annals of Nuclear Energy, 2013, 60: 15-27.
- [33] XING J, SONG D, WU Y. HPR1000: Advanced pressurized water reactor with active and passive safety [J]. Engineering, 2016, 2(1): 79-87.
- [34] 夏兆阳. 先进反应堆严重事故放射性气溶胶分布特性研究 [D]. 北京:清华大学, 2022.
- [35] 夏兆阳, 周志伟, 石学焱, 等. 大型先进压水堆 IVR 策略评估和裂变产物分布计算 [J]. 原子能科学技术, 2022, 56(7): 1308-1320.
- XIA Zhaoyang, ZHOU Zhiwei, SHI Xueyao, et al. Evaluation of IVR strategy and calculation of fission product distribution for large advanced pressurized water reactor [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2022, 56(7): 1308-1320 (in Chinese).
- [36] PAW U, THA K. The rebound of particles from natural surfaces [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1983, 93(2): 442-452.
- [37] BRECHTEL F J, KREIDENWEIS S M. Predicting particle critical supersaturation from hygroscopic growth measurements in the humidified TDMA, Part I: Theory and sensitivity studies [J]. Journal of the Atmospheric Sciences, 2000, 57(12): 1854-1871.