

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук



# СБОРНИК ТЕЗИСОВ



# НАУЧНОЙ ШКОЛЫ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ





# ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

# СБОРНИК ТЕЗИСОВ ХХІV НАУЧНОЙ ШКОЛЫ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ИБРАЭ РАН

22—23 апреля 2025 г.

Москва, 2025

УДК 621.039 ББК 314 С23

Сборник тезисов XXIV научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 22—23 апреля 2025 г. / под общ. ред. акад. РАН Л. А. Большова ; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук. — М. : ИБРАЭ РАН, 2025. — 93 с. : ил. (в пер.).

Настоящий сборник содержит тезисы работ, представленные на XXIV научной школе молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 22-23 апреля 2025 года. Авторами являются студенты, аспиранты и молодые специалисты, обучающиеся и работающие в ИБРАЭ РАН, а также участники из других организаций, работающие по смежным направлениям. Тематика представленных докладов перекрывает большую часть научных направлений, развиваемых в Институте. Они посвящены проблеме тяжелых аварий на АЭС, экологическим проблемам атомной энергетики. методам математического моделирования, вероятностному анализу безопасности, информационным технологиям и экономике энергетики.

ISBN 978-5-907375-15-8

Abstracts of the XXIII Scientific School of IBRAE RAN Young Scientists, held April 22—23, 2025. / Ed. by L. A. Bolshov ; Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (IBRAE RAN). — Moscow : IBRAE RAN, 2025. — 93 p. : ill. (bound)

This volume contains abstracts of reports presented at the XXIV Conference of IBRAE RAN Young Scientists, held April 22—23, 2025. The authors are students, postgraduate students and young specialists learning and working at the Nuclear Safety Institute as well as participants from other institutes working in adjacent directions. The presented reports cover the most part of scientific activity aspects of the Institute. They are devoted to the problem of severe accidents at NPP, ecological problems, numerical modeling methods, probabilistic safety analysis, information technologies, and economics of energy industry.

ISBN 978-5-907375-15-8

© ИБРАЭ РАН, 2025 © Коллектив авторов, 2025

# Содержание

Баранов Д.Ю., Мурлис Д.В., Понизов А.В., Верещагин П.М.	
Оценка сорбционных свойств инженерных барьеров пунктов захоронения радиоактивных отходов с использованием геохимических расчетов	7
Болатказыев Е. А., Комаров П. А.	
Моделирование радиационных полей и расчет биологической защиты ускорителя электронов MT-25 с использованием программного пакета FLUKA	10
Бриллиантов Б.Д., Бочкарев В.В.	
Схема нормализации факторов в системе поддержки принятия решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии	10
Бриткина В.С., Ефремов Р.О.	
Кросс-верификация нейтронно-физических программ MCU-FR, TDMCC и SCALE в ячеечных расчетах реактора BBЭP-1000	12
Бутаков Н.Ю.	
Расчёт гидродинамических параметров для Арктики с использованием совместной модели атмосфера-океан-морской лёд	14
Власенко А. Е.	
Доработка теплогидравлического кода HYDRA-IBRAE/LM в части моделирования кризиса теплообмена	16
Воривончик М. В.	
Моделирование миграции трития в системах УТС: разработка программного инструмента для анализа безопасности	18
Глушак А.А.	
Метод молекулярной динамики для оценки поведения радионуклидов в растворах и при взаимодействии с цементными фазами	20
Горянова Е.А.	
Возможность нарушения целостности направляющих труб СУЗ в процессе гидроиспытаний на герметичность первого контура ВВЭР-1000	22
Губкина А.И., Галицкая Р.Р., Юсупов А.Н.	
Верификация программного средства MicroShield для расчёта задач радиационной защиты от источников гамма-излучения	24
Гупало-Осадчая К.В.	
Опыт изучения последствий аварии на ЧАЭС в сельском населенном пункте в части оценок доз внешнего облучения на примере с. Новые Бобовичи Новозыбковского района Брянской области	26
Делова М.И., Юдина Т.А., Филиппов М.Ф.	
Химическое взаимодействие цезия и йода в теплогидравлических условиях защитной оболочки, влияющее на выброс активности в окружающую среду при тяжёлых авариях	28
Денисов В.А.	
Особенности использования технологий параллельных вычислений для решения задач горения газовых смесей	29

#### Дроздов О.О.

Оптимизационный подход к моделированию обращения с радиоактивными отходами в информационно-аналитической системе
Ефремов Р.О., Кизуб П. А., Халиков Р. С., Кирнева Н.А., Хвостенко А. П.
Многовариантное моделирование радиационной обстановки вблизи токамака Т - 15МД в дейтериевом режиме работы
Жилин В.А.
Исследование эффективности CWENOZ схем для дискретизации трёхмерных задач переноса на неструктурированных сетках
Игнатьев И.А., Березнев В.П., Блохина Г.С., Колташев Д.С.
Кросс-верификация кодов MCU-FR и ODETTA-F применительно к задачам расчета радиационной защиты установок управляемого термоядерного синтеза на основе экспериментов из базы данных SINBAD
Идрисов Д.М.
Моделирование центральной блокировки в 37-стержневой сборке с помощью ячейкового кода SUBCHANNEL-Na
Казаков А.Д., Калинина М.С., Савельев Е.Г.
Интеграция данных теплофизического профилирования керна и стандартных ГИС для прогноза тепловых свойств, оценки трещиноватости и состава пород участка «Енисейский»
Казиева С.Т., Катаев Е.В.
Анализ влияния неопределенностей состава материала и плотности потока нейтронов на расчетные значения активности конструкционных материалов ВВЭР-440
Киселев К.К., Литвинович Е.А.
Поиск бозонной темной материи нейтринным детектором iDREAM на Калининской атомной электростанции
Клятецкий С.А., Галоян Н.А.
Модернизация автоматизированной системы управления рисками при строительстве АЭС как элемента автоматизированной системы управления предприятием на всех этапах жизненного цикла44
Ковешников К.С.
Моделирование процессов в ампуле-петле с естественной циркуляцией натрия
Коняев П.А., Киселев А.А., Игнатов Р.Ю., Бутаков Н.Ю.
Анализ применения кода «РОМ 2.1» в связке с диагностической и прогностической моделями динамики атмосферы на данных трассерных экспериментов
Корчагина О.О.
Интегральная модель захоронения долгоживущих РАО методом самопогружения
Леонов К.В.
Асимптотическая теория переноса примеси на больших временах в модели двупористой резко контрастной среды с крупномасштабными неоднородностями
Лобашев Е.А.
Атомистический расчёт температуры декомпозициинитрида урана
Матвеев А.Л.
Асимптотический подход к описанию адвекции-диффузии в анизотропных средах с крупномасштабными неоднородностями56

Меньшикова-Тонян И.Р., Семенкова А.С., Свительман В.С., Крупская В.В., Романчук А.Ю., Калмыков С.Н.	
Моделирование сорбции цезия на бентонитах различных месторождений	58
Муратов Е.Т., Долганов К.С., Мелихов О.И.	
Расчёт термодинамических свойств системы Zr-O для повышения реалистичности моделирования процесса деградации оболочек твэлов	60
Никулин Д.Ю., Шурыгин Р.Е.	
Разработка обменных модулей для интеграции нейтронно-физических кодов в 3D код для связанного мультифизического моделирования	61
Острижный Д.А.	
Разработка аппаратуры для измерений тепловых свойств пород при пластовых термобарических условиях	63
Петрова М.Н.	
Численное моделирование жидкосолевого реактора по коду ЕВКЛИД/ЖСР	65
Пешков С.В.	
Анализ реактивностных характеристик реакторной установки с натриевым теплоносителем при моделировании аварии с неконтролируемым набросом мощности	67
Пивиков Д.А.	
Отработка методики отбора проб подземных вод из наклонных скважин глубиной 165 метров на участке Енисейский	68
Пилюгин Л.С., Лобашев Е.А., Антропов А.С.	
Моделирование взаимодействия дислокации и газового нанопузырька в кристалле	70
Попов И.В., Шмельков Ю.Б.	
Сопоставление подходов к анализу чувствительности при моделировании поведения продуктов деления в условиях тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР	72
Сигаев А.Д.	
Расширение геологической базы данных участка Енисейский при научном сопровождении строительства подземной исследовательской лаборатории	74
Смирнов К.Д.	
Интерпретация данных опытно-фильтрационных работ с использованием пакерной установки на участке Енисейский	76
Сошников В.М., Катаев Е.В., Казиева С.Т.	
Расчетные оценки влияния параметров активной зоны реакторов типа ВВЭР на характеристики нейтронных полей	78
Тарганов И.Е.	
Моделирование последствий нарушений нормальной эксплуатации при тепловом взрыве технологических сред радиохимических предприятий	80
Титкова Л.Д., Ширнин М.Ю.	
Оценка эффективности геотехнических сооружений в контексте прогнозирования доз при анализе долговременной безопасности для типового хвостохранилища	81
Халиков Р.С., Кизуб П.А., Ефремов Р.О., Хвостенко А. П.,Хвостенко П.П., Хрипунов В.И., Кирнева Н.А.	
Оценка радиационных характеристик конструкционных материалов токамака Т - 15МД в различных режимах работы с дейтериевым топливом	82

Хнкоян Г.В., Николаев В.С.
Термодинамические свойства кислородо- и водородосодержащих молекулярных примесей в расплаве свинца: первопринципные метадинамические расчёты
Цветкова Д.Д.
Оценка влияния погрешности эффективности РО СУЗ на результаты моделирования проектных аварий
Чекаленко М.Е.
Исследование влияния изотопного состава плутония на основные нейтронно-физические характеристики реактора типа БН87
Чумаков А.А.
Определение критерия классификации трещин по водопроводимости в массиве горных пород методом ультразвукового каротажа88
Шурыгин Р.Е.
Моделирование микрокампании экспериментальной сборки в активной зоне быстрого реактора с помощью связанного 3D кода90
Юсупов А.Н., Губкина А.И., Ивахнова А.А., Галицкая Р.Р., Шарапова Т.В.
Обоснование радиационной безопасности технологии обращения с радийсодержащими материалами91

## Оценка сорбционных свойств инженерных барьеров пунктов захоронения радиоактивных отходов с использованием геохимических расчетов

Баранов Д.Ю., Мурлис Д.В., Понизов А.В., Верещагин П.М.

ФБУ «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности»

Тел.: (499) 753-05-42, эл. почта: baranov@secnrs.ru

Инженерные барьеры безопасности (ИББ) являются необходимыми элементами сооружений пунктов захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО), которые препятствуют распространению радионуклидов и обеспечивают безопасность населения и окружающей среды, включая долговременную. В настоящее время актуальным является вопрос захоронения радиоактивных отходов (РАО) в виде солевого плава. Солевой плав образуется при переработке жидких РАО атомных электростанций методом глубокого упаривания. Солевой плав является смесью кристаллогидратов и хорошо растворим в воде. Он характеризуется значительным содержанием нитратов (более 100 г/кг) и боратов натрия (более 20 г/кг), а также кристаллизационной влаги (до 34 масс. %) [1]. Основными дозообразующими радионуклидами являются <sup>137</sup>Cs, <sup>60</sup>Co и <sup>63</sup>Ni. РАО в виде солевого плава относится к 3-му и 4-му классам и подлежит захоронению в приповерхностном ПЗРО. В качестве первичных упаковок для захоронения солевого плава применяют металлические бочки, при этом долговечность материала бочки по мнению авторов [1] не превышает 20 лет. В случае разгерметизации металлической бочки образуется раствор компонентов солевого плава в подземных водах, который будет взаимодействовать с материалом ИББ ПЗРО. Одним из наиболее распространенных материалов ИББ является бетон, который используется в качестве материала контейнеров (например, НЗК-150-1,5П), в ряде случаев - для заполнения пространства между контейнерами, а также в строительных конструкциях ПЗРО [3]. Целью работы являлась оценка сорбции элементов Cs и Ni (Co не рассматривался ввиду малого периода полураспада) на материале ИББ (бетон) при контакте с раствором солевого плава, в зависимости от изменения начального рН.

Для оценки сорбционной способности бетона по отношению к Сs и Ni использовалась расчетная модель, разработанная в программе для ЭВМ PHREEQC. В расчетной модели принято, что бетон контактирует с раствором солевого плава. Состав солевого плава в модели следующий: (г/л) Na – 55; K – 18; Ca – 23; Mg – 6; Cl – 5; NO<sub>3</sub> – 129; BO<sub>3</sub> – 29; SO<sub>4</sub> – 41; CO<sub>3</sub> – 3,2; Ni –  $2 \cdot 10^{-3}$ ; Cs –  $4 \cdot 10^{-3}$ ; значение pH варьировало от 7 до 10. В модели было учтено образование водных форм нитратов, боратов, сульфатов, гидроксидов Ni, а также хлоридов и гидроксидов Cs, которые способны образовываться в условиях, характерных для приповерхностных ПЗРО. Моделирование химических взаимодействий проведено с использованием встроенной в программу для ЭВМ PHREEQC базы данных констант химических реакций llnl.dat.

Оценка сорбции осуществлялось согласно реакциям комплексообразования и ионного обмена Cs и Ni, с учетом образования их водных комплексов. Эти параметры дополняли встроенную базу данных (таблица 1). Согласно [4] емкость катионного обмена бетона составляет 85 мг-экв/100г; согласно [5] площадь удельной поверхности – 290 м<sup>2</sup>/г; плотность сорбционных центров – 10 участков/нм<sup>2</sup>.

Водные комплексы	Log K	Комплексообразование Log K		Ионный обмен	Log K
$Cs^+ + H_2O = CsOH + H^+$	-15,68	$\equiv SiOH + Cs^+ \Leftrightarrow \equiv SiO - Cs + H^+$	-2,7	$Cs^+ + NaX = CsX + Na^+$	7
$Ni^{2+} + H_2O = Ni (OH)^+ + H^+$	-9,5	$\equiv \text{SiOH} + \text{NiOH}^+ \Leftrightarrow \equiv \text{SiO} \\ - \text{NiOH} + \text{H}^+$	-8,6	$Ni^{2+} + CaX_2 = NiX_2 + Ca^{2+}$	1,3
$Ni^{2+} + B(OH)_3 = NiBO_2OH + 2H^+$	-16.6	$\equiv SiOH + Ni^{2+} \Leftrightarrow \equiv SiO - Ni^{+} + H^{+}$	-0,3		
$Ni^{2+} + 3B(OH)_3 =$ $NiB_3O_4(OH)_3 + 2H^+$ $+2H_2O$	-11.1	$\equiv SiOCa^{+} + Ni(OH)_{3}^{-} \Leftrightarrow \equiv SiO - CaNi(OH)_{3}$	-30,1		

Таблица 1 – Реакции образования водных комплексов Ni, Cs, комплексообразования и ионного обмена, используемые в моделировании [5,6,7]

Сорбционная способность бетона оценивалась по значению коэффициента распределения (K<sub>d</sub>), который равен соотношению сорбированного элемента к его начальной концентрации с учетом объема раствора и массы реагирующего твердого вещества. На рисунке 1 представлены значения коэффициента распределения Ni и Cs в зависимости от изменения pH.



Рисунок 1 – Значения коэффициентов распределения Cs и Ni в зависимости от изменения pH.

По результатам моделирования было установлено, что изменение pH оказывает существенное влияние на сорбцию Ni: в щелочной обстановке, характерной для растворения бетона, сорбция снижается, а в слабощелочной и нейтральной возрастает. Это связано с формированием устойчивых комплексов гидроксоборатов [NiB<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(OH)<sub>2</sub>; NiB<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(OH)<sub>3</sub>]. При снижении pH их концентрация в растворе резко снижается с  $2,7 \cdot 10^{-7}$  моль при pH = 10 до  $6,4 \cdot 10^{-9}$  моль при pH = 8; для pH = 7 характерно преобладание нитратных комплексов в растворе, образование которых не влияет на сорбцию Ni. По сравнению с Ni сорбция Cs меняется незначительно: при возрастании pH значение K<sub>d</sub> Cs увеличивается с  $5,5 \cdot 10^5$  до  $5,9 \cdot 10^5$  мл/г. Изменение исходного pH растворенного солевого плава не влияет на форму нахождения Cs в растворе, по данным расчетов, доминирующей формой является ионная.

Таким образом, изменение pH растворенного солевого плава будет оказывать значительное влияние на сорбцию Ni за счет нахождения в растворе борат-ионов. Сорбция Cs меньше зависит от изменения pH, что обусловлено ионной формой нахождения элемента в растворе. При контакте растворенных компонентов солевого плава с бетоном, щелочная обстановка будет сохраняться в течение длительного периода времени, что может снизить сорбционную способность бетона по отношению к Ni.

- 1. Сорокин В.Т. Обоснование безопасности захоронения солевого плава, образующегося на установках глубокого упаривания АЭС, размещенного в контейнерах НЗК-150-1,5П. Радиоактивные отходы, 2019. Т. 2. №. 7. С. 31-40.
- Бабенко К.Ю., Мельников А.П., Драмарецкий К.В. Проблемы обращения с радиоактивными отходами на НВАЭС/ Сборник тезисов конференции" Радиоактивные отходы. Хранение, транспортировка, переработка. Влияние на человека и окружающую среду". – С-Петербург, 1996. – С. 8.
- Материалы обоснования лицензии на размещение и сооружение приповерхностного пункта захоронения твердых радиоактивных отходов 3 и 4 классов, Томская область, городской округ ЗАТО Северск. – 2019. – Т.1. – 293 С.
- 4. Coleman N.J. Synthesis, structure and ion exchange properties of 11 A° tobermorites from newsprint recycling residue. Materials Research Bulletin, 2005. T. 40. C. 2000-2013
- 5. Ochs M., Pointeau I., Giffaut E. Caesium sorption by hydrated cement as a function of degradation state: Experiments and modelling Waste management, 2006. T. 26. №. 7. C. 725-732.
- 6. Bradbury M. H., Baeyens B. A generalized sorption model for the concentration dependent uptake of caesium by argillaceous rocks. Journal of Contaminant Hydrology, 2000. T. 42. C. 141 163
- Missana T., García-Gutiérrez M., Alonso U., Almendros-Ginestá O. Nickel retention by calcium sikicate hydrate phases: Evaluation of the role of the Ca/Si ratio on adsorption and precipitation processes. – Applied Geochemistry, 2022. – T. 137. – № 1 – C. 1-7.

## Моделирование радиационных полей и расчет биологической защиты ускорителя электронов МТ-25 с использованием программного пакета FLUKA

Болатказыев Е. А.<sup>1,2</sup>, Комаров П. А.<sup>1</sup>

Научный руководитель: к.ф.-м.н., с.н.с. ЛЯР ОИЯИ Тетерев Ю. Г.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Лаборатория ядерных реакций им. Г. Н. Флерова, Объединенный институт ядерных исследований <sup>2</sup>Евразийский национальный университет им. Л. Н. Гумилева

тел.: 8 (999) 807-91-75, эл. почта: bea@jinr.ru

Эксплуатация циклического ускорителя электронов МТ-25 в современных физических экспериментах требует работы на предельных параметрах — энергии электронов до 23 МэВ и интенсивности пучка 20 мкА [1]. Это приводит к значительному увеличению уровней ионизирующего излучения, что актуализирует вопросы радиационной безопасности. В сложившихся условиях необходимо провести детальную переоценку системы радиационной защиты, выявить возможные слабые места и реализовать меры по их устранению для обеспечения безопасной работы ускорителя [2].

Расчет полей излучения за пределами биологической защиты ускорителей может быть выполнен с помощью программ для моделирования физических процессов с использованием метода Монте-Карло. Для данной работы в качестве программы для моделирования был выбран программный пакет FLUKA. Специализированный программный пакет FLUKA [3], основанный на этом методе, является мощным инструментом для моделирования взаимодействия частиц с веществом и проведения расчетов биологической защиты.

К сожалению, работ по экспериментальной верификации данного программного пакета для ускорителей низких энергий практически нет. На основании этого, одной из задач данной работы было проведение первичного сравнительного анализа измеренных и расчетных (FLUKA) данных.

Точность расчетов методов Монте-Карло зависит от числа реализаций стохастического (случайного) процесса, поэтому расчеты проводились в современной и мощной гетерогенной платформе «HybriLIT» ЛИТ ОИЯИ [4].

- A. G. Belov, G. V. Buklanov, Yu. S. Korotkin, Yu. Ts. Oganessian, G. Ja. Starodub, V. E. Zhuchko. Microtron MT-25 and its areas of use // Workshop on application of microtrons in nuclear physics. – 1993. – p. 20.
- Основные санитарные правила обеспечения радиационной безопасности (ОСПОРБ 99/2010). Санитарные правила и нормативы СП 2.6.1.2612-10. Москва: Федеральный центр гигиены и эпидемиологии Роспотребнадзора, – 11 авг. 2010 г. – с. 17.
- 3. A. Ferrari, P.R. Sala, A. Fasso`, and J. Ranft. FLUKA: a multi-particle transport code // CERN-2005-10, INFN/TC\\_05/11, SLAC-R-773. 2005.
- 4. Официальный сайт Гетерогенной платформы «HybriLIT» [электронный ресурс] / Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ Дубна, 2019. Режим доступа: http://hlit.jinr.ru/

## Схема нормализации факторов в системе поддержки принятия решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии

Бриллиантов Б.Д., Бочкарев В.В.

Научно-технический центр ядерной и радиационной безопасности, Москва, Россия

#### тел.: 8(499)753-55-01, эл.почта: brilliantov@secnrs.ru

#### Научный руководитель: д.ф.-м.н., проф. НИЯУ МИФИ Крянев А.В.

В ходе разработки руководства по безопасности (далее – РБ-153-18) [1] был разработан метод поддержки принятия решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии, основанный на методике выбора оптимального варианта из множества альтернатив.

Используемый в РБ-153-18 [1] подход нормализации значений факторов (приведение факторов к безразмерной форме), и его улучшенные версии [2, 3] ограничивают лицо, принимающие решение, в возможности выбора предпочтительного значения, для данных факторов: предпочтительным может быть только либо максимальное значение, либо минимальное. Однако практика показала необходимость повышения гибкости этой системы.

Для возможности более точно учитывать предпочтения лица, принимающего решения, предлагается для каждого фактора ввести целевой (предпочитаемый) диапазон  $G_j = [G_{j,min}, G_{j,max}]$ . Тогда, при указывании лицом, принимающим решения, целевого диапазона для каждого фактора *j*, расчет нормализованных значений факторов для каждой альтернативы *i* происходит следующим образом:

1. Каждое значение каждого фактора для всех альтернатив m<sub>ij</sub> заменяется на значение расстояния от целевого диапазона по следующей формуле:

a. 
$$m_{ij}^* = \begin{cases} 0, \ m_{ij} \in [G_{j,min}, G_{j,max}] \\ G_{j,min} - m_{ij}, \ m_{ij} < G_{j,min} \\ m_{ij} - G_{j,max}, \ m_{ij} > G_{j,max} \end{cases}$$
 (1)

2. Для нормализации значений факторов используется следующая формула:

$$\frac{m_{max,j}^* - m_{ij}^*}{m_{max,j}^* - m_{min,j}^*} = m_{ij}^{\rm H}$$
(2)

где i – номер альтернативы, j – номер фактора,  $m_{ij}^*$  – степень удаленности значения фактора j при альтернативе i от целевого диапазона для данного фактора,  $m_{max,j}^*$  ( $m_{min,j}^*$ ) – максимальное (минимальное) из значений  $m_{ij}^*$  фактора j.

Следует отметить, что при таком подходе лицо, принимающее решение, может, вместо диапазона, задать целевой показатель в виде одного значения. В таком случае  $G_j = G_{j,min} = G_{j,max}$  и формула (1) приобретает следующий вид:

$$|m_{ij} - G_j| = m_{ij}^* \tag{3}$$

Если же предпочтения лица, принимающего решения, заключаются в максимизации (или минимизации) значений фактора, то, при данном подходе, можно указать предпочтения в виде максимального (или минимального) значения целевого показателя: для этого целевой показатель стоит задать равным максимальному (или минимальному) значению фактора.

Такой подход позволяет существенно повысить гибкость процесса принятия решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии. Введение целевых значений для каждого фактора обеспечивает возможность более точного учета индивидуальных предпочтений лиц, принимающих решения, что особенно важно в условиях неопределенности и множественности критериев оценки. Такой подход не только расширяет спектр возможных вариантов действий, но и повышает точность и обоснованность выбора оптимальной стратегии вывода из эксплуатации.

- 1. РБ-153-18 «Рекомендации по обоснованию выбора варианта вывода из эксплуатации объектов использования атомной энергии». Утверждено приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 29 декабря 2018 г. № 666, 22 с.
- 2. Применение математических методов при выборе оптимального варианта обращения с радиоактивными отходами / В. В. Бочкарев, Б. Д. Бриллиантов, А. В. Крянев // Ядерная и радиационная безопасность. 2020. № 4(98). С. 35-46. DOI 10.26277/SECNRS.2020.98.4.004. EDN FSYBLO.
- 3. Система поддержки принятия оптимальных решений при выводе из эксплуатации объектов использования атомной энергии / В. В. Бочкарев, Б. Д. Бриллиантов, В. В. Иванов [и др.] // Письма в журнал Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2022. Т. 19, № 6(245). С. 669-681. EDN UUXICM.

# Кросс-верификация нейтронно-физических программ MCU-FR, TDMCC и SCALE в ячеечных расчетах реактора BBЭP-1000

Бриткина В.С., инженер ИБРАЭ РАН, Ефремов Р.О., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: с.н.с. ИБРАЭ РАН Кизуб П.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: +7 (495) 955-23-89, эл. почта: britkina@ibrae.ac.ru

Для проведения нейтронно-физических исследований, связанных с анализом безопасности объектов ядерного топливного цикла, существует достаточно широкий набор инструментов в виде различных программных комплексов, в том числе аттестованных в НТЦ ЯРБ в отношении упомянутых выше установок. Различные программные комплексы основаны на разных подходах в части алгоритмов. Так, для моделирования переноса ионизирующего излучения используются различные программы для электронно-вычислительных машин, разделяющиеся на инженерные (например, FACT-BR [1]) и прецизионные, которые в свою очередь включают детерминистические (например, ODETTA [2]) и использующие метод Монте-Карло (например, MCU-FR [3]). Кроме того, программы одного класса могут содержать набор уникальных библиотек ядерно-физических констант. Тем не менее, назначение программы в ее аттестационном паспорте может пересекаться для различных комплексов, так что при проведении аналогичных расчетов пользователь должен получать аналогичный результат. Тем самым у пользователя может стоять выбор расчетного инструмента для проведения исследования. Ранее проведенные во всем мире исследования о повторяемости результата различными программными комплексами в большей степени направлены на проверку работоспособности программ, однако не нацелены на раскрытие особенностей подготовки моделей и интерпретации полученных результатов.

Цель данной работы – апробация различных прецизионных кодов при анализе нейтроннофизических характеристик в ячеечных расчетах реактора ВВЭР-1000, предложенных национальной лабораторией Оак-Ридж в качестве бенчмарка [4].

В работе проведены следующие исследования:

Задача 1. Анализ критичности ТВС в бассейне выдержки при его осушении;

Задача 2. Расчет потока и мощности дозы нейтронов «сухой» ТВС со свежим топливом, хранящейся без контейнера;

Задача 3. Расчет потока и мощности дозы нейтронов ТВС со свежим топливом, хранящейся в контейнере.

Для исследования выбраны три программных комплекса, которые используются в организации для решения задач, связанных с обоснованием безопасности ядерных установок, в том числе при выводе из эксплуатации:

1. TDMCC [5] (с набором ядерных констант MCCNUC), разработанная в ФГУП «РФЯЦ– ВНИИЭФ» и предназначенная для моделирования взаимодействия нейтронного и гамма-излучений с веществом в трехмерной геометрии методами Монте-Карло в том числе, для решения задач с заданными источниками излучения;

2. MCU-FR [3] (с использованием поточечных сечений на основе файлов оцененных ядерных данных Росфонд [6]), разработанная на базе программного пакета MCU-6 и предназначенная для моделирования раздельного и совместного переноса нейтронов, фотонов и электронов методом Монте-Карло в моделях ядерных реакторов с быстрым спектром нейтронов;

3. модули CSAS и MONACO, входящие в ПК SCALE [7] (с групповыми сечениями на основе ENDF-BVII [8]).

При подготовке моделей и интерпретации результатов были выявлены особенности, на которые следует обращать внимание для достижения сходимости результатов, получаемых по программам MCU-FR, TDMCC, SCALE. Результаты расчетов показали:

В ячеечных расчетах на критичность ТВС реактора ВВЭР-1000 для всех топлив все программы

показали хорошую сходимость с бенчмарком: в пределах 1-2% в части расчета  $K \not \Rightarrow \phi \phi \phi$  за исключением низких плотностей воды, где отклонения составили 6-8%. Также исключением стали результаты по MCU-FR для MOX-R топлива, когда среднее отклонение от бенчмарка составило 13%, а максимальные расхождения около 20% при низких плотностях воды.

В задаче расчета дозовых характеристик TBC в сухом хранилище программа MCU-FR обеспечила хорошую сходимость с бенчмарком мощности дозы нейтронов (около 10%), но показала большие расхождения (около 20%) с бенчмарком в части расчета плотности потока нейтронов. Обратный эффект получен по программам TDMCC и SCALE: получена хорошая сходимость (около 10%) в части оценки плотности потока нейтронов и плохая в части расчета мощности дозы нейтронов (20-50%).

В расчетах дозовых характеристик упакованной в контейнер ТВС с МОХ-топливом программа ТDMCС продемонстрировала наименьшие отклонения, особенно в случае с MOX-W топливом (отклонения от бенчмарка оказались меньше 10% на всех расстояниях от TBC). Плотности потока и мощности нейтронов при всех видах топлива, полученные по программе SCALE, характеризовались отклонениями 30-40% от бенчмарка.

Анализ полученных данных показывает, что при воспроизведении результатов нужно большое внимание уделять выбору используемых ядерных констант и нормировке результатов.

Дальнейшие исследования будут направлены на решение задачи расчета нейтронно-физических и радиационных характеристик ТВС с отработавшим ядерным топливом с привлечением программы нуклидной кинетики TRACT [9], проходящего в настоящий момент аттестацию в НТЦ ЯРБ.

- Баринов С.В., Радкевич А.П. Использование системы подготовки многогрупповых нейтронных данных CONSYST/ABBN в программном комплексе FACT-BR для трехмерных нейтроннофизических расчетов реактора БРЕСТ-ОД-ЗОО // Сб. докладов семинара «Нейтроника-99», Обнинск, 1999.
- Селезнев Е. Ф., Березнев В. П., Белоусов В. И. Расчетный код для решения задач переноса нейтронов и гамма-квантов в многогрупповом SnPm приближении методом конечных элементов на неструктурированных тетраэдральных сетках, включая работу с сеточными данными. Учебная версия 1.0 (ODETTA/E1. 0). – 2019.
- 3. Эмметт М. Б. Расчетные задачи для топливного цикла на основе смешанных оксидов для реактора ВВЭР-1000. Национальная лаборатория Ок-Ридж (ORNL), Ок-Ридж, Теннесси (США), 2000. №. ORNL/TM-1999/207.
- 4. Программа TDMCC (Time Dependent Monte Carlo Code). Житник А.К., Рослов В.И., Семенова Т.В. и др. Свидетельство о государственной регистрации №2010614412 ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ».
- 5. Гуревич М. И. и др. Характерные особенности MCU-FR //Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2016. №. 5. С. 17-21.
- 6. Забродская С.В., Игнатюк А.В., Кощеев В.Н., Манохин В.Н., Николаев М.Н., Про-няев В.Г. РОСФОНД – российская националь-ная библиотека нейтронных данных // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 2007, вып. 1-2, с. 3–21.
- SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations, NUREG/CR-0200, Rev. 7 (ORNL/NUREG/CSD-2RY), Vols, I, II, and III, May 2004 (DRAFT). Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-725.
- 8. Chadwick M. B. et al. ENDF/B-VII. 0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology //Nuclear data sheets. 2006. T. 107. №. 12. C. 2931-3060.
- 9. Блохин А.И., Блохин П.А., Сипачев И.В. Возможности расчетного кода TRACT для решения задач характеризации радионуклидного состава РАО и ОЯТ // Радиоактивные отходы. 2018. № 2 (3). С. 95-104.

# Расчёт гидродинамических параметров для Арктики с использованием совместной модели атмосфера-океан-морской лёд

Бутаков Н.Ю., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: д.ф.-м.н. зав. лаб. ИБРАЭ РАН Рубинштейн К.Г.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (953) 371-08-13, эл. почта: butakov@ibrae.ac.ru

Численное моделирование является важным инструментом для исследования физических процессов в атмосфере, океане и морском льду. Отдельные модели позволяют анализировать динамику каждого из этих компонентов, однако их взаимодействие играет ключевую роль в формировании природных условий, особенно в высокоширотных районах. Совместное моделирование атмосферы, океана и морского льда дает возможность учитывать их взаимное влияние, что повышает точность прогнозов и расширяет возможности прикладных исследований.

Совместные модели позволяют учитывать влияние атмосферы на циркуляцию воды и поведение морского льда, прогнозировать ледовые условия на основе метеорологических данных, а также оценивать воздействие океанических процессов на погодные явления. Такой подход особенно важен для судоходства, добычи природных ресурсов и проектирования инженерных сооружений (в том числе АЭС), так как он позволяет более точно рассчитывать риски и оптимизировать решения.

Таким образом, совместные модели атмосферы, океана и морского льда представляют собой мощный инструмент для научных исследований и прикладных задач.

В рамках данного исследования была реализована совместная система прогноза параметров состояния атмосферы, океана и морского льда для района Белого моря. Для расчёта атмосферных параметров использовалась модель WRF-ARW [1], для расчёта океанических параметров применялась модель ROMS [2], параметры состояния морского льда считались при помощи модели CICE [3]. Все 3 представленные модели были объединены в единую прогностическую систему, что позволило учесть двухсторонние взаимодействия между атмосферой, океаном и морским льдом. Разрешение всех 3-х моделей было выбрано равным 1.2 км, что позволяет учесть сложные процессы, происходящие в Артике.

Ниже на рисунке 1 в качестве примера представлены карты с результатами расчётами сплочённости морского льда, температуры поверхности моря и приземной температуры воздуха с заблаговременности 120 ч.







a)





в)

Рисунок 1 – Результаты расчёта

а) сплочённости морского льда; б) температуры поверхности моря; в) приземной температуры воздуха

- 1. WRF Users Guide documentation. Available at: https://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/wrf\_users\_guide/build/html/physics.html#surface-physics.
- 2. Hedstrom K.S. Technical Manual for a Coupled Sea-Ice/Ocean Circulation Model (Version 5). 2010. URL: https://www.myroms.org/wiki/images/3/3b/Manual\_2010.pdf (дата обращения: 02.02.2025).
- 3. CICE Consortium. CICE Documentation. Версия 6.2.0. 2021. URL: https://cice-consortium-cice.readthedocs.io/ (дата обращения: 02.02.2025).

### Доработка теплогидравлического кода HYDRA-IBRAE/LM в части моделирования кризиса теплообмена

Власенко А. Е., младший научный сотрудник ИБРАЭ РАН Научный руководитель: к.ф.-м.н., снс ИБРАЭ РАН Палагин А. В. Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН тел.: (495) 955-23-94, эл. почта: vlasenko@ibrae.ac.ru

Кризис теплообмена является важным фактором, ограничивающим мощность активной зоны реакторов с водяным теплоносителем. Принятие мер, препятствующих наступлению кризиса теплообмена, может привести к существенному росту тепловой мощности. Явление сопровождается резким скачком температуры нагреваемой поверхности вследствие уменьшения площади контакта жидкости с нагреваемой поверхностью и соответствует одному из двух возможных сценариев: 1) разрушения пристенного слоя жидкости при высоком недогреве жидкости до температуры насыщения и малом паросодержании; 2) испарения жидкой плёнки при дисперсно-кольцевом режиме течения.

В данной работе приводятся общие положения о явлении кризиса теплообмена и обзор литературы в части существующих подходов к определению критического теплового потока (КТП) и граничного паросодержания в трубах. Оценка погрешности отобранных корреляций для определения точки наступления кризиса производилась за счёт реализации отобранных корреляций в канальном теплогидралическом коде HYDRA-IBRAE/LM [0], после чего была проведена валидация на экспериментальных данных.

Отсутствие общепринятой методики прямого расчёта КТП привели к тому, подавляющее большинство теплогидравлических кодов использует эмпирические и полуэмпирические корреляции для расчёта КТП, либо граничного паросодержания. Так как подобные корреляции фактически используют зависимость параметров течения в точке наступления кризиса для прогнозирования данного явления в подобных условиях, то корреляции зачастую не разделяют причины и тип кризиса теплообмена. В данном исследовании были проверены следующие отобранные в литературе подходы к определению точки наступления кризиса: таблицы AECL-ФЭИ 1995 г. [3], корреляцию Beazy [5], Корреляция Yildiz [4], Корреляция В.В. Сергеева [6], Корреляция Дорощука [7], Корреляция Каtto [8], Модернизированная корреляция Конькова [9, 10].

Реализованная корреляция для граничного паросодержания была проверена на экспериментальных данных Беккера [11]. Экспериментальный стенд представлял собой замкнутый контур, включающий тестовую секцию, циркуляционный насос, конденсатор, нагреватель и фильтр. Результатом эксперимента служило распределение температуры стенки, измеряемой в тестовой секции. Результаты расчётов приведены на рисунке 1 и в таблице 1.



Рисунок 1 – Сравнение расчётных значений координаты кризиса теплообмена с экспериментальными данными

т с	1 11 -		••				
Гаолина	$I - I I 0 \Gamma$	решности	расчета	по отор	ранным	коррел	яниям
1 worninger .		p •	p		p minibility	mopp	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,

Метод расчёта КТП	Среднее отклонение, м	СКО, м	Отн. среднее отклонение, %	Отн. СКО, %
Таблицы AECL-ФЭИ 1995	0,79	1,23	15,35	29,63
Корреляция Yildiz	0,33	0,64	9,10	17,11
Корреляция Сергеева	-0,28	0,64	-5,55	15,87
Модернизированная корреляция Конькова	0,03	0,54	1,15	14,30
Корреляция Katto	0,17	0,72	4,57	18,08
Корреляция Дорощука	0,21	0,67	5,35	17,42
Корреляция Веагу	0,23	1,05	6,09	25,59

Тестовая секция представляла собой трубу длинной 7 м. Экспериментаторами рассматривались 2 различных внутренних диаметра трубы: 10 мм и 14,9 мм. Параметры экспериментальных режимов охватывали следующий диапазон: давление 3 – 20,5 МПа; массовая скорость 500 – 3000 кг/(м<sup>2</sup>·с); плотность теплового потока 9 – 125 Вт/см<sup>2</sup>.

Результаты расчётов с использованием таблиц AECL-ФЭИ 1995 находятся преимущественно ниже диагонали, то есть при расчёте кризис наступает ниже по течению, чем в условиях эксперимента. Схожая ситуация наблюдается при использовании корреляции Сергеева. Таким образом, расчёты с использованием базовых таблиц AECL-ФЭИ 1995 и корреляции Сергеева можно считать более консервативными. Результаты расчётов координаты кризиса теплообмена с использованием корреляций Дорощука, Katto и Yildiz переоценивают граничное паросодержание. При использовании модернизированной корреляции Конькова существенная часть точек лежит выше диагонали, что означает меньшую консервативность, но большую точность. Таким образом, при использовании данной корреляции достигается максимальная точность опредления координаты кризиса.

Результатом проведённого исследования стала реализация в основной версии кода HYDRA-IBRAE/LM модернизированной корреляции Конькова.

- 1 Alipchenkov V. M. et al. Fundamentals, current state of the development of, and prospects for further improvement of the new-generation thermal-hydraulic computational HYDRA-IBRAE/LM code for simulation of fast reactor systems //Thermal Engineering. 2016. T. 63. C. 130-139.
- 2 Зейгарник Ю. А. Об универсальной модели кризиса кипения недогретой жидкости в каналах //Теплофизика высоких температур. – 1996. – Т. 34. – №. 1. – С. 52-56.
- 3 Бобков В.П., Виноградов В.Н., Греневельд Д., Кириллов П.Л. и др. Скелетная таблица версии 1995 г. Для расчета критического теплового потока в трубах// Теплоэнергетика. 1997. №10. С. 43-53.
- 4 Yildiz S., Bartsch G. A new correlation for the limiting quality of critical heat flux at low mass fluxes and low pressures //International journal of energy research. 2004. T. 28. №. 12. C. 1101-1112.
- 5 TRAC-M/FORTRAN 90 (VERSION 3.0) LA-UR-00-910. Theory manual / J.W. Spore, J.S. Elson, S.J. Jolly-Woodruff, T.D. Knight, J.-C. Lin, R.A. Nelson, K.O. Pasamehmetoglu, R.G. Steinke, and C. Unal. Los Alamos National Laboratory, July 2000.
- 6 Справочник по теплогидравлическим расчётам в ядерной энергетике. Т. 1. Теплогидравлические процессы в ЯЭУ / Под ред. Кириллова П.Л. М.: ИздАт, 2010.
- 7 Doroshchuk V. Е. Кризисы теплообмена при кипении воды в трубах. Энергоатомиздат, 1983.
- 8 Katto Y. A generalized correlation of critical heat flux for the forced convection boiling in vertical uniformly heated round tubes //International Journal of Heat and Mass Transfer. 1978. T. 21. №. 12. C. 1527-1542.
- 9 Wu W. et al. A new correlation for the prediction of critical quality in tubes // Annals of Nuclear Energy. 2021. Vol. 150. 107796.
- 10 Kon'Kov A. S. Experimental study of the conditions under which heat exchange deteriorates when a steamwater mixture flows in heated tubes //Teploenergetika. – 1965. – T. 13. – №. 12. – C. 77.
- 11 Becker K. M. et al. An experimental investigation of post dryout heat transfer. Royal Inst. of Tech., 1983. №. KTH-NEL--33 (V. 1, 2).

# Моделирование миграции трития в системах УТС: разработка программного инструмента для анализа безопасности

Воривончик М. В., аспирант 4 года ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: к.ф.-м.н., ст. науч. сотрудник ИБРАЭ РАН Сорокин А.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: +7 (985) 742-83-05, эл. почта: vorivonchik.mv@ibrae.ac.ru

Тритий, радиоактивный изотоп водорода, является ключевым компонентом реакций термоядерного синтеза, однако его применение сопряжено с рисками радиационной безопасности. Изучение закономерностей поведения данного изотопа в технологических системах критически важно для минимизации рисков и обеспечения безопасной эксплуатации установок управляемого термоядерного синтеза (УТС) [1]. В ИБРАЭ РАН продолжается разработка моделей и программного кода TRITIUM-F для расчета миграции трития и других изотопов водорода в технологических системах установок управляемого термоядерного синтеза.

Уравнения моделей в программе TRITIUM-F основаны на рассмотрении закона сохранения массы для каждого из изотопов водорода (трития, протия и дейтерия) для связанной последовательности пространственных ячеек или контрольных объемов, аппроксимирующих каналы и трубопроводы установок УТС с жидким или газообразным теплоносителем.

Для всех рассматриваемых в модели компонентов изменение концентрации компонента  $C_i$  в потоке теплоносителя рассматривается в одномерном (канальном) приближении:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + V_f \frac{\partial C_i}{\partial x} = \sum_k G_i^k , \qquad (1)$$

где  $V_f$  – скорость несущей среды,  $G_i^k$  – источник (сток) і-го компонента вследствие действия k-го физико-химического процесса, x – продольная координата по длине канала. Метод решения общей системы уравнений основан на рассмотрении закона сохранения массы моделируемых компонентов в некотором выделенном объеме. Численная реализация решения системы уравнений основана на методе расщепления по физическим процессам с целью учета детальной кинетики для каждого процесса.

Проницаемость изотопов водорода через металлические стенки трубопроводов определяет появление нестационарного и неравномерно распределенного по длине трубопровода источника изотопов водорода в «соседний канал». При этом интенсивность проницаемости зависит, в первую очередь, от концентрации изотопов и фазового состояния теплоносителя (газ, жидкость) по обе стороны от стенок.

Процесс проницаемости изотопов водорода через слой металла включает последовательную реализацию следующих явлений [2,3]:

 адсорбция молекулярного водорода, состоящего в общем случае из смеси изотопов, на поверхности металла со стороны более высокого давления компонента;

- диссоциация молекул на атомы на поверхности металла;
- диффузия изотопов водорода через металлическую решетку;

– захват изотопов на различных дислокациях в объеме металлического слоя (газовые пузырьки, границы зерен и др.);

 обратная рекомбинация изотопов водорода на поверхности металла со стороны более низкого давления примеси;

— десорбция молекулярных соединений, состоящих из смеси изотопов водорода, с обратной поверхности стенки в объем среды.

Как следствие, проницаемость изотопов водорода  $P_m$  через металлическую мембрану определяется диффузией и растворимостью изотопов в металле,  $P_m = D \times S$ , где S – растворимость и D – коэффициент диффузии изотопа в металле. Соответственно в моделях для расчета проницаемости часто используется только один параметр для проницаемости и не рассматривается стадия накопления изотопов в объеме металла. Косвенно при этом предполагается, что процесс накопления изотопов водорода в объеме металлического слоя быстро выходит на стационар и, следовательно, потоки изотопов внутрь слоя и из слоя равны.

В программе TRITIUM-F реализованы модели для основных процессов, влияющих на поведение изотопов водорода в элементах термоядерного реактора, включая перенос с теплоносителем, радиоактивный распад, проницаемость через стенки трубопроводов из конструкционных материалов, извлечение из теплоносителя, адсорбцию/десорбцию на поверхностях.

Представлены результаты верификации расчетного модуля на тестовых задачах и валидации на экспериментах по проницаемости протия через мембраны из прототипных сталей, которые подтвердили правильность реализации моделей в расчетном коде. Полученные результаты показали, что программа TRITIUM-F может эффективно использоваться для моделирования миграции трития в технологических системах установок УТС и обоснования радиационной безопасности таких установок.

Работы выполнены в рамках Государственного задания от 27.04.2024 № 075-00330-24-01 по теме: «Развитие законодательной и нормативной базы в области использования атомной энергии, включая новые типы ядерных установок, термоядерные и гибридные системы».

- Богданович Р.Б., Аксенова А.Е., Березнев В.П., Блохин А.И., Блохин П.А., Вепрев Д.П., Воривончик М.В., Ефремова О.В., Колташев Д.А., Мосунова Н.А., Петрова М.Н., Сорокин А.А., Усов Э.В., Чуданов В.В. Требования к интегральному коду EUCLID-F для детерминистического анализа аварий в термоядерных реакторах // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. – 2023. – Т. 46, №. 1. – С. 12—28.
- 2. Гольцов В.А. Водород в металлах. М: Атомиздат, 1978.
- 3. Беловодский Л.Ф. Тритий. М.: Энергоатомиздат, 1985.

# Метод молекулярной динамики для оценки поведения радионуклидов в растворах и при взаимодействии с цементными фазами

Глушак А.А., м.н.с. НИУ ВШЭ

Научный руководитель: к.ф.-м.н. зав. лаб. НИУ ВШЭ Смирнов Г.С.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

#### эл. почта: aglushak@hse.ru

Метод молекулярной динамики активно применяются в последние десятилетия для обоснования безопасности создаваемых пунктов захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО). Одной из основных целей модельных расчетов является оценка сорбционно-осадительных свойств инженерных барьеров безопасности, в роли которых рассматривают в основном либо бентонит, либо бетон на основе портландцемента. Макроскопические явления, происходящие на молекулярном масштабе, значительно влияют на сорбционные свойства барьеров, что приводит к необходимости их изучения [1].

Радионуклиды хлора и иода крайне важны в контексте захоронения радиоактивных отходов. Они не только представляют опасность для человека и природы, но также являются важными маркерами радиационного загрязнения [2]. В тоже время радиоактивные изотопы селена, например <sup>79</sup>Se считаются одними из основных радионуклидов, определяющих дозу облучения, а также воздействующих на биосферу в геологическом масштабе времени [3-5]. В контексте условий хранилищ радиоактивных отходов, изотопы селена способны формировать различные оксианионы в водных растворах [4]. В условиях, актуальных для хранилищ радиоактивных отходов, селен с наибольшей вероятностью представлен в виде селенита Se(IV)O<sub>3</sub><sup>2-</sup> или селената Se(VI)O<sub>4</sub><sup>2-</sup>.

Одним из возможных материалов для барьеров для ПЗРО являются портландцемент. Одной из его минорных фаз является кальциевый алюминат – АFm фаза, которая рассматривается в качестве эффективного адсорбента радиоактивных отходов. AFm фаза относится к классу анионных глин и может служить в качестве модельного минерала этого класса. Её слоистая структура формируется искаженным октаэдрами Ca(OH)<sub>6</sub> и Al(OH)<sub>6</sub>, а межслоевое пространство характеризуется высокоупорядоченным расположением анионов и молекул H<sub>2</sub>O [6].

В работе представлены результаты компьютерного атомистического моделирования хлор- и иодсодержащих АFm фаз как адсорбента для радионуклидов <sup>36</sup>Cl, <sup>129</sup>I, <sup>137</sup>Cs с использованием силового поля ClayFF [7]. Изучены как свойства самих кристаллов, так и взаимодействие водных растворов CsCl и CsI с их поверхностью. Показана более сильная адсорбция анионов Cl<sup>-</sup>, по сравнению с I<sup>-</sup>, на поверхности AFm фаз, что можно объяснить разницей в ионных радиусах анионов, которые составляют 175 пм для хлора против 198 пм для иода. С помощью метадинамических расчетов изучены энергетические барьеры адсорбции и наиболее вероятные положения анионов на поверхности. В согласии с предыдущими работами [6], можно оценить, что диффузионная подвижность анионов Cl<sup>-</sup> и I<sup>-</sup> на поверхности AFm фаз уменьшается примерно на порядок, что ещё раз подтверждает, способность материала значительно задерживать миграцию радиоактивных анионов.

С помощью разработанного ClayFF-совместимого межатомного потенциала для оксианионов селена исследованы структурные, динамические и энергетические свойства селената и селенита. Результаты показывают, что число водородных связей в первой сольватационной сфере выше для SeO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, а также сеть водородных связей стабильнее по сравнению с SeO<sub>4</sub><sup>2-</sup>. Проведена оценка структурных свойств твердых гидротированных селенатных фаз, являющихся составляющими портландцемента, показана высокая точность воспроизведения структуры селеносодержащих минералов с помощью предложенных параметров по сравнению с методами квантовой молекулярной динамики.

#### Литература

1. Болдырев К.А., Глушак А.А., Писарев В.В., Смирнов Г.С., Тарарушкин Е.В., Михайлова П.С. Применение метода молекулярной динамики в задачах прогнозирования поведения материалов инженерных барьеров безопасности ПЗРО //Радиоактивные отходы. – 2024. – №. 3 (28). – С. 83-95.

- Kupper F. C., Feiters M. C., Olofsson B. et al. Commemorating two centuries of iodine research: an interdisciplinary overview of current research //Angewandte Chemie International Edition. 2011. T. 50. C. 11598-11620.
- 3. Aguerre S., Frenchou C. Development of a radiochemical separation for selenium with the aim of measuring its isotope 79 in low and intermediate nuclear wastes by ICPMS //Talanta. 2006. T. 69. №. 3 C. 565-571.
- 4. Frenchou C., Aguerre S., Degros J.-P. Improvement of a radiochemical separation for selenium 79: applications to effluents and nuclear wastes //Talanta. 2007. T. 72. №. 2 C. 229-240.
- 5. Grambow B. Mobile fission and activation products in nuclear waste disposal //Journal of Contaminant Hydrology. 2008. T. 102. C. 180-186.
- Kalinichev A.G., Kirkpatrick R.J., Cygan R.T. Molecular modeling of the structure and dynamics of the interlayer and surface species of mixed-metal layered hydroxides: Chloride and water in hydrocalumite (Friedel's salt) //American Mineralogist. – 2000. – T. 85. – C. 1046-1052.
- Cygan R.T., Greathouse J.A., Kalinichev A.G. Advances in Clayff molecular simulation of layered and nanoporous materials and their aqueous interfaces //Journal of Physical Chemistry C. – 2021. – T. 125. – C. 17573-17589.

# Возможность нарушения целостности направляющих труб СУЗ в процессе гидроиспытаний на герметичность первого контура ВВЭР-1000

Горянова Е.А., студент ИАТЭ НИЯУ МИФИ

Научный руководитель: к.т.н. доцент ОЯФиТ(О), ИАТЭ НИЯУ МИФИ Авдеев Е.Ф.

Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

тел.: +7 (961) 673-99-77, эл. почта: kravtcovaea20@oiate.ru

В докладе рассмотрен физический механизм возможного возникновения ударной волны в трубах СУЗ при гидроиспытаниях первого контура ВВЭР-1000 на этапе снижения давления и приведены расчетные обоснования локального повышения давления в ударных волнах. Показано, что созданию условий возникновения ударной волны предшествуют волна восстановления давления и следующие за ней волна разряжения.

В работе рассматриваются три возможных случая заполнения труб СУЗ при гидроиспытаниях на герметичность (рис. 1): а) труба СУЗ полностью заполнена водой; б) труба СУЗ частично заполнена водой; в) труба СУЗ полностью заполнена воздухом.



Рисунок 1 – Упрощенная схема расположения труб СУЗ

Физика указанных процессов рассмотрена при условиях: 1) наличие растворенной в воде газовой фазы, возникшей на этапе повышения давления; 2) учет особенностей распространения скорости звука в двухфазных средах; 3) давление в конкретной точке объема воды или смеси устанавливается при достижении этой точки звуковой волной.

Поскольку формула Вуда [1], используемая в большинстве источников при определении скорости звука в смеси, дает большую погрешность для условий поставленной задачи с высоким давлением (180 бар и ниже), получена приведенная в докладе новая формула. Для расчетной оценки понижения давления в волне разряжения использована приближенная формула Мишо для непрямых гидравлических ударов.

Так как суммарное время прохождения волн восстановления давления и разряжения по трубе СУЗ на порядок меньше скорости снижения давления в коллекторе, при достижении волной разряжения нижнего конца трубы СУЗ создаются условия для возникновения ударной волны.

Достигнув пробки трубы, высокое давление в ударной волне вызывает осевую силу и напряжение в материале стенки, одновременно и напряжение на разрыв в диаметральном направлении. Учитывая, что стенка трубы в районе пробки ослаблена резьбовым соединением, произойдет отрыв пробки или деформация именно в этом месте.

Для расчетов повышения давления в ударной волне использованы законы сохранения аналогичные классическим законам сохранения при ударных волнах в газах.

Аналог показателя изоэнтропы для смеси находился из условий равенства скорости звука по полученной авторами доклада формуле и адиабатической формуле скорости звука для смеси [2].

Для двух значений газосодержания за волной разряжения найдены осевые напряжения в стенках трубы, значительно превышающие допустимые напряжения на разрыв для материала трубы СУЗ.

В заключении доклада перечислены полученные результаты:

1) найдено новое выражение скорости звука для высоких давлений, достигаемых при гидроударах;

2) дано физическое обоснование возможности возникновения ударных волн при гидроударах на этапе понижения давления;

3) приведены фундаментальные причины возникновения ударных волн;

4) получены расчетные оценки повышения давления в ударной волне, осевые силы напряжения в стенке и их сравнение с допустимыми напряжениями.

#### Литература

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа: Учеб. для вузов – 7-е изд., испр. – М.: Дрофа, 2003

2. Авдеев Е.Ф., Ющенко Н.Е. Расчет гидравлических характеристик реакторного контура. Учебное пособие по курсу «Механика жидкости и газа». – Обнинск: ИАТЭ, 200

# Верификация программного средства MicroShield для расчёта задач радиационной защиты от источников гамма-излучения

Губкина А.И., Галицкая Р.Р., Юсупов А.Н.

Акционерное общество

«Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

#### тел.: (84235) 7-97-41, эл.почта: aigubkina@niiar.ru

Программное средство MicroShield является общепризнанным средством для проведения расчётов радиационной защиты от источников гамма-излучения. Основными его преимуществами является простота применения и быстрота получения результатов по сравнению с программными средствами на основе метода Монте-Карло. При проведении расчётов в области обоснования радиационной безопасности должны быть использованы программные средства, прошедшие экспертизу и процедуру аттестации [1]. Для проведения процедуры аттестации необходимо провести работы по верификации и валидации программного средства в соответствии с руководящими документами. В рамках данной работы рассмотрены результаты расчётов в области верификации – определения погрешности расчёта потоков гамма-излучения от источников различной геометрии.

Целью данной работы является проведение расчётного исследования для выявления погрешности расчёта потоков гамма-излучения от протяженных источников различной геометрии с помощью программного средства Microshield путём сравнения результатов расчёта с результатами расчёта по формулам.

В качестве протяженных источников гамма-излучения рассмотрены линейный, поверхностный (дисковый и прямоугольный), объёмный (сферический и цилиндрический). Расчёт потоков гамма-излучения от источников различной геометрии проводился по формулам, представленным в справочниках [2-5]. Расчёты проводились при отсутствии и наличии слоя защитного материала в виде свинца толщиной равной 2 длинам свободного пробега (д.с.п.). Точка детектирования располагались на поверхности источника. Расчёты проводились для стандартного 25-ти группового разбиения по энергиям.

Для линейного источника проводилось определение погрешности расчёта при вариации длины источника. В точке детектирования погрешность не превышает 4%. При наличии защитного материала в виде 2 д.с.п. свинца без учёта фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность составляет до 5% при максимальной длине источника, в диапазоне средних и высоких энергий погрешность не превышает 1%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне средних и высоких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность не превышает 1%.

Для поверхностных источников проводилось определение погрешности расчёта при вариации размеров источника (радиус для дискового, длины и ширины для прямоугольного). В точке на поверхности источника погрешность не превышает 5% и растет по мере увеличения размеров источника. При наличии защитного материала в виде 2 д.с.п. свинца без учёта фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность составляет до 5% при максимальных размерах источника, в диапазоне средних и высоких энергий погрешность не превышает 1%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне средних и источника, в диапазоне средних объека в диапазоне изких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность составляет до 4% при максимальных размерах источника, в диапазоне средних энергий до 10%, в диапазоне высоких энергий погрешность не превышает 20%.

Для объёмных источников проводилось определение погрешности расчёта при вариации размеров источника (радиус для сферического и радиуса и высоты для цилиндрического). В точке на поверхности источника в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность не превышает 10% и растет по мере увеличения размеров источника в диапазоне средних и высоких энергий погрешность не превышает 3%. При наличии защитного материала в виде 2 д.с.п. свинца без учёта фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность составляет 5% при максимальных размерах источника, в диапазоне средних и высоких энергий погрешность не превышает 20%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность не превышает 20%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 МэВ погрешность не превышает 20%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 мэВ погрешность не превышает 20%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне низких энергий 0,015-0,02 мэВ погрешность не превышает 20%. При учёте фактора накопления гамма-излучения в диапазоне средних и высоких энергий 0,015-0,02 мэВ погрешность составляет 5% при максимальных размерах источника, в диапазоне средних энергий 0,015-0,02 мэВ погрешность составляет до 5% при максимальных размерах источника, в диапазоне средних энергий до 20%, в диапазоне высоких энергий погрешность не превышает 15%.

Таким образом, результаты погрешности расчёта потока гамма-излучения для всех рассмотренных протяженных источников не превышают 10%. Наличие слоя защиты увеличивает величину отклонения до

20%. Расчёт с учётом фактора накопления гамма-излучения увеличивает погрешность расчёта незначительно. Таким образом, проведенные работы по верификации программного средства Microshield, показывают хорошую сходимость с резульатами расчёта по формула. Далее планируется проведение работ по валидации программного средства MicroShield путём сравнения результатов расчёта с экспериментальными данными.

- 1. РД 03 34-2000 Требования к составу и содержанию отчета о верификации и обосновании программных средств, применяемых для обоснования безопасности объектов использования атомной энергии утв. приказом начальника Госатомнадзора России от 28.12.2000. Введены в действие с 29.12.2000. 24 с.
- 2. Машкович В.П., Кудрявцева А.В. Защита от ионизирующих излучения: справочник 4-е изд., перераб. и доп. Москва: Энергоатомиздат, 1995 496 с.
- 3. Руководство по радиационной защите для инженеров Т.2. Перев. с англ. Под редакцией Д.Л. Бродера и др. М.: Атомиздат, 1973 288 с.
- 4. Гусев Н.Г., Ковалев Е.Е., Осанов Д.П., Попов В.И. Защита от излучения протяжённых источников. Москва: ГосАтомИздат, 1961. 287 с.
- 5. Бергельсон Б.Р., Зорикоев Г.А. Справочник по защите от излучения протяжённых источников. М.: Атомиздат, 1965. 174 с.

## Опыт изучения последствий аварии на ЧАЭС в сельском населенном пункте в части оценок доз внешнего облучения на примере с. Новые Бобовичи Новозыбковского района Брянской области

Гупало-Осадчая К.В., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: ст. науч. сотр. ИБРАЭ РАН Панченко С.В.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-32, эл. почта: gupalo.kv@ibrae.ac.ru

В докладе рассматриваются итоги многолетних подворных обследований хозяйств села Новые Бобовичи в части оценок доз внешнего облучения. Основу этих исследований составили измеренные в период 1986-2022 гг. параметры радиационной обстановки [1], а также различные сведения о жителях села, полученные на основании записей в домовых книгах.

К измеряем параметрам относятся мощности доз на представительных участках территории села: невозмущенная поверхность, травяной покров от дороги до участка, скамейка у ворот (дома), грунт на улице и во дворах, асфальт, огород, сад, деревянный и кирпичный дома.

Наибольшие значения отмечались над участками ненарушенной поверхности почвы, которых осталось совсем немного. Наименьшие фактически фоновые значения мощности дозы регистрировались в центре асфальтовых дорог. В этом же дозовом диапазоне были результаты измерений в домах как кирпичных, так и деревянных.

Выполненный анализ данных из домовых книг с. Новые Бобовичи, а также возможность использовать известные зависимости значений дозовых коэффициентов от возраста жителей [2] позволили выделить 6 основных групп населения. Классификация жителей по группам осуществлялась на основе их возраста на момент аварии в 1986 году и образа жизни. В дальнейшем они оставались в закрепленных за ними группах, однако расчет дозы облучения для каждого индивидуально изменялся с учетом возрастных изменений.

Группа № 1 – к ней были отнесены дети дошкольного возраста до 7 лет.

Группа № 2 – дети школьного возраста, в возрасте от 7 до 17 лет.

Группа № 3 – люди старше 17 лет, постоянно работающие на улице: пастухи, трактористы, полеводы и др.

Группа № 4 – люди старше 17 лет, которые работают на улице не постоянно, а переменно.

Группа № 5 – люди старше 17 лет, их образ жизни можно назвать «работа-дом», поскольку 9 часов они тратят на работу в помещении, 2 часа на дорогу (включая посещения магазинов и др. заведений), а остальное время занимают домашние дела.

Группа № 6 – пенсионеры, имеющие также не характерный для других групп образ жизни. Было принято, что до 9 часов представители группы проводят на свежем воздухе, занимаясь работами в огороде, общаясь с другими пенсионерами, а оставшееся время проводят дома.

Интеграл дозы за период 1986-2022 гг. оценивался с учетом того, что для лиц, отнесенных к группе 1, методика расчета была адаптирована при достижении критического возраста, соответствующего группе 2, а впоследствии – 4 группе. Аналогично, для членов группы 2 был применен пересмотренный подход к расчету, идентичный расчету 4 группы. Для работающего на момент аварии населения (группы 3, 4, 5) переход к пенсионному возрасту привел к изменению методики расчета на аналогичную той, которая применялась к группе 6. Результаты расчетов проводили для каждого жителя отдельно с учетом его возраста на момент аварии. Такой подход дает численные ориентиры возможных доз внешнего облучения для жителей, относящихся к разным возрастным и социальным группам. Следует отметить определенную консервативность подхода, поскольку практически все жители села в исследуемый период отлучались с рассматриваемой территории на различные промежутки времени. В принципе такой учет частично возможен, поскольку есть записи в домовых книгах, где фиксировали наиболее значимые периоды выезда (служба в рядах СА или ВС РФ, учеба, работа вне села и др.). Однако такая работа была бы уместна при наличии данных медицинских наблюдений за индивидуальным здоровьем сельчан.

Результаты расчетов проводили для каждого жителя отдельно с учетом его возраста на момент аварии. Такой подход дает численные ориентиры возможных доз внешнего облучения для жителей, относящихся к разным возрастным и социальным группам. Результаты оценки дозы внешнего облучения для различных групп населения Новых Бобовичей представлены на рисунке 1 и в таблице 1.



Рисунок 1 – Реконструкция дозы внешнего облучения, обусловленного <sup>137</sup>Cs для 6 референтных групп населения села Новые Бобовичи за период 1986-2022 гг.

Таблица 1 – Накопленная доза дополнительного внешнего облучения для различных групп населения с. Новые Бобовичи за период 1986-2022 гг., мЗв

Группа 1	Группа 2	Группа 3	Группа 4	Группа 5	Группа 6
97	89	103	91	59	68

Следует отметить определенную консервативность подхода, поскольку практически все жители села в исследуемый период отлучались с рассматриваемой территории на различные промежутки времени. В принципе такой учет частично возможен, поскольку есть записи в домовых книгах, где фиксировали наиболее значимые периоды выезда (служба в рядах СА или ВС РФ, учеба, работа вне села и др.), а также характер выполняемой работы в периоды трудовой активности. Однако такая работа была бы уместна при наличии данных медицинских наблюдений за индивидуальным здоровьем сельчан.

Выполненные оценки показывают, что различия по полученной дозе внешнего облучения различных групп населения села не превышают двух раз. Дальнейшее увеличение суммарной дозы внешнего облучения с учетом демографических факторов будет весьма незначительным.

- 1. Панченко С.В. Динамика параметров радиационной обстановки в сельском населенном пункте, загрязненном цезием-137 в результате аварии на чернобыльской атомной электростанции в апреле 1986 года // С.В. Панченко, А.А. Аракелян, Е.А. Гаврилина, А.М. Шведов. Медицинская радиология и радиационная безопасность т.61 № 4, 2016, с. 5-18.
- EPA-402-R-19-002. External exposure to radionuclides in air, water, and soil. Federal guidance report №
   15. – Office of Radiation and Indoor Air U.S. Environmental Protection Agency Washington, DC 20460 2019.

## Химическое взаимодействие цезия и йода в теплогидравлических условиях защитной оболочки, влияющее на выброс активности в окружающую среду при тяжёлых авариях

Делова М.И., Юдина Т.А., Филиппов М.Ф.

Научный руководитель: к.т.н., научный сотрудник, и. о. зав. лаб. ИБРАЭ РАН Филиппов М.Ф.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (915) 248-57-81, эл. почта: delovami@ibrae.ac.ru

В существующих методиках оценки радиоактивного выброса часто применяются упрощенные подходы к описанию химических процессов. В качестве одного из упрощений используется постоянство химических форм продуктов деления (ПД) за пределами активной зоны. Однако длительное нахождение в защитной оболочке (ЗО) цезия и йода, изотопов, оказывающих значительное воздействие на здоровье населения, может приводить к изменению их химических форм, что в свою очередь оказывает существенное влияние на результирующую активность взвешенных изотопов в атмосфере ЗО и, соответственно, на величину выброса после отказа ЗО.

С течением времени по мере накопления знаний представление о величине и формах йода и цезия, поступающих в защитную оболочку реакторной установки, изменялись. В начале 60-ых годов проектные решения АЭС строились на основе предположения о том, что в ЗО поступает половина от накопленного в топливе йода, и основной формой (91%) поступившего йода является летучий молекулярный йод I<sub>2</sub>. Оставшиеся 9% распределяются между частицами (5%) и органическими формами (4%). К 90-ым годам увеличивалось количество термодинамических расчетов и на их основании была сформирована новая точка зрения. Считалось, что в защитную оболочку будет поступать 60-70% от накопленного в топливе йода. В качестве основной химической формы поступающего йода рассматривался йодид цезия, доля которого составляет 95% от вышедшего из топлива йода, остальные 5% представляют газообразные формы йода (элементарный йод и НІ). Для цезия основной химической формой в ЗО считался гидроксид цезия (CsOH). Результаты экспериментов PHEBUS FP (1993-1999 гг) с выгоревшим топливом, имитирующие аварию «Большая течь из холодной нитки первого контура реакторной установки», поставили эту точку зрения под сомнение и показали, что йодид цезия и гидроксид цезия могут не являться основными формами йода и цезия, а также указали на то, что формы йода и цезия могут меняться непосредственно в самой защитной оболочке. Важно отметить, что по сравнению с первым контуром, для которого время транспорта ПД по нему составляет от нескольких секунд до минут, в защитной оболочке ПД могут находиться от нескольких часов до нескольких суток. При этом в ЗО присутствует ионизирующее излучение, которое при таком длительном нахождении может влиять на химические формы ПД. Кроме этого, на формы ПД оказывает влияние наличие окрашенных поверхностей и водяной фазы в приямке ЗО.

В данной работе проанализированы результаты экспериментальных исследований по химическому взаимодействию цезия и йода в теплогидравлических условиях ЗО. Определен перечень процессов, приводящих к изменению химических форм данных элементов. Результаты работы могут быть использованы для разработки моделей химического взаимодействия цезия и йода в ЗО при тяжелых авариях на АЭС.

# Особенности использования технологий параллельных вычислений для решения задач горения газовых смесей

Денисов В.А., лаборант ОИВТ РАН

Научный руководитель: к.ф.-м.н. с.н.с., ОИВТ РАН Яковенко И.С.

Объединенный институт высоких температур РАН

тел.: (950) 518-52-03, эл. почта: denvic8671@icloud.com

На сегодняшний день численное моделирование является одним из самых доступных и универсальных способов изучения процессов горения. Проектирование систем безопасности и принятие мер по снижению рисков возникновения аварий на энергетических объектах и на производстве, использующих топливо в форме газовых смесей, требуют детального понимания механизмов воспламенения газовых смесей, формирования устойчивых и нестационарных режимов горения, ускорения пламени и перехода к детонации и других задач, имеющих большое прикладное и фундаментальное значение. Изучение особенностей горения газовых смесей на основе водорода имеет принципиальное значение для задач безопасности объектов атомной энергетики, так как нештатное накопление водорода в ограниченном объеме, формирование горючей смеси под контайнментом АЭС и последующий взрыв являются одним из возможных сценариев развития тяжелой аварии.

В отличие от задач классической газовой и гидродинамики, для валидации и верификации расчетных кодов и алгоритмов, используемых для моделирования нестационарных процессов горения, не существует общепринятых тестов, которые позволили бы определить применимость и эффективность той или иной расчетной методики и её программной реализации для решения задач физики горения. В настоящей работе представлен набор тестовых задач, на основе которых возможно как проведение всестороннего анализа возможностей вычислительных кодов и алгоритмов для моделирования процессов горения, так и получение информации о производительности вычислительных кодов и определение наиболее оптимальных для решения задач горения архитектур вычислительных систем. Так, предложенный набор тестов включает в себя задачу о нахождении ламинарной скорости горения, распространение волны горения в сферической камере и многомерное развитие фронта горения под действием акустических возмущений, отраженных от стенок реактора [1].

С использованием предложенного набора тестов, в работе проведен анализ различных вычислительных методик для уравнений газовой динамики, реализованных на базе вычислительного комплекса NRG [2], разрабатываемый в лаборатории Вычислительной физики ОИВТ РАН для решения задач моделирования реагирующих течений в однофазных и многофазных средах. Среди рассмотренных вычислительных схем классический метод «крупных частиц» [3], метод предиктор-корректор для решения уравнений газовой динамики в приближении малых чисел Маха [4], а также адаптированный для решения задач горения современный бездиссипативный метод КАБАРЕ [5], активно разрабатываемый в ИБРАЭ РАН. Проведено профилирование и разработаны юнит-тесты для отдельных этапов численного решения, показаны особенности масштабируемости вычислений при решении задач горения.

- 1. Yakovenko, I., Kiverin, A. Numerical Modeling of Hydrogen Combustion: Approaches and Benchmarks // Fire. 2023. V. 6. P. 239.
- 2. Исходный код лабораторного пакета NRG: https://github.com/yakovenko-ivan/NRG
- 3. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент. М.: Наука, 1982. С. 391.
- 4. McGrattan, K.; McDermott, R.; Hostikka, S.; Floyd, J.; Vanella, M. Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model. In Technical Report NIST Special Publication 1018-1; U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg, MD, USA, 2019.
- Головизнин В.М., Зайцев М.А., Карабасов С.А., Короткин И.А. Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов. – М.: Из-во Московского университета, 2013. – С. 475

## Оптимизационный подход к моделированию обращения с радиоактивными отходами в информационно-аналитической системе

Дроздов О.О., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: заведующий отделением ИБРАЭ РАН Иванов А.Ю.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: +79771093858, эл. почта: drozdovoo@ibrae.ac.ru

Качественное долгосрочное планирование потребностей ресурсов, включая финансовые потоки, и инфраструктуры с учетом имеющихся и прогнозных ограничений является важным аспектом повышения эффективности деятельности по обращению с радиоактивными отходами (РАО) в Российской Федерации.

Инструментом моделирования процессов обращения с РАО является разработанная в 2023 году Информационно-аналитическая система планирования деятельности по ВЭ ЯРОО и обращению с накопленными и эксплуатационными РАО (далее – ИАС РАО) [1]. ИАС РАО представляет собой импортонезависимую цифровую платформу, включающую базу данных и расчетный программный комплекс, позволяющий прогнозировать нагрузку на инфраструктуру по обращению с РАО и оценивать стоимость базовых операций [2]. С помощью системы рассчитываются финансово-экономические показатели переработки, транспортировки, временного хранения и захоронения РАО, результаты которых представляются в аналитических отчетах. На основании полученных результатов принимаются решения по ключевым вопросам развития системы обращения с РАО.

Внедрение цифровых технологий в практику планирования и управления работ по обращению с РАО и ВЭ ЯРОО направлено на уменьшение сроков и стоимости реализации проектов без ущерба для безопасности [3]. ИАС РАО имеет предпосылки для интеграции с производственными системами отраслевых предприятий и со временем синхронизироваться с существующими системами учета и контроля в рамках единой цифровой среды.

Для качественного функционирования системы необходимо применение значительного набора математических методов, включая методы решения задач динамического программирования, оптимизационных задач, стохастическое и детерминированное моделирование, теорию графов и ряд других.

В настоящее время в рамках разработки ИАС РАО прорабатывается новый подход, расширяющий функциональные возможности системы. Планируется, что помимо стандартного моделирования и анализа различных сценариев, в системе будет заложена возможность варьирования заданных параметров, генерируя возможные варианты развития ситуации. Такой механизм позволит не только оценивать существующие стратегии, но и формировать новые предложения на основе расчетов системы. Это создаст инструмент для глубокой аналитики, позволяющий исследовать потенциальные риски, выявлять оптимальные решения и тестировать различные комбинации входных данных.

- 1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ «Информационноаналитическая система планирования деятельности по ВЭ ЯРОО и обращение с накопленными и производственными РАО» Ильясов Д.Ф., Овчинников И.Д., Степанян П.О., Мамчиц Е.Г., Иванов А.Ю., Сергеев И.И., Смирнов Н.В., Самойлов А.А., Блохин П.А.
- 2. Разработка программного обеспечения для оценки стоимости проектов по ликвидации ядерно и радиационно опасных объектов с применением цифрового моделирования / Д. Ф. Ильясов, А. Ю. Иванов, Н. П. Агафонов [и др.] // Теоретическая и прикладная экономика. 2022. № 4. С. 67-79
- Иванов А.Ю., Ильясов Д.Ф., Мамчиц Е.Г. Развитие подходов к приоритизации вывода из эксплуатации объектов использования атомной энергии. Вестник Российского экономического университета имени Г. В. Плеханова. 2023;(4):31-43. https://doi.org/10.21686/2413-2829-2023-4-31-43

# Многовариантное моделирование радиационной обстановки вблизи токамака Т - 15МД в дейтериевом режиме работы

Ефремов Р.О., инженер ИБРАЭ РАН

Кизуб П. А.<sup>1</sup>, Халиков Р. С.<sup>1</sup>, Кирнева Н.А.<sup>2</sup>, Хвостенко А. П.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, Москва, Россия <sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

В рамках реализации федерального проекта «Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий», призванного обеспечить материальную базу для разработки термоядерных технологий, в 2021 году введен в эксплуатацию крупнейший российский токамак Т-15МД. В 2023 году на данной установке продемонстрирована возможность удержания плазмы с термоядерной температурой электронов в течение более двух секунд. В настоящий момент токамак Т-15МД работает на водородной плазме, однако с целью проработки физической, технической и технологической инфраструктуры для термоядерных источников нейтронов (ТИН) гибридных реакторов [1] рассматривается возможность перехода на дейтериевую плазму.

В случае перехода к разрядам с дейтерием физические параметры таких импульсов будут определены вместе с научной программой установки, однако, технологические параметры токамака позволяют обеспечить выход термоядерных нейтронов вплоть до 1015 н/с [2]. При этом, энергия термоядерных нейтронов составляет 2,45 (99%) и 14,1 (1%) МэВ. Такое мощное высокоэнергетическое излучение приведет к образованию существенных дозовых полей. Кроме того, в результате взаимодействия нейтронов с материалами конструкций токамака возникнут 1) вторичное γ-излучение с энергией γ-квантов до 8 МэВ, а также 2) остаточное γ-излучение от активированных материалов конструкций.

Таким образом, радиационная обстановка вблизи установки Т-15МД в дейтериевом режиме работы потребует принятия мер радиационной защиты, которые можно обосновать путем проведения многовариантных нейтронно-физических расчетов на основе трехмерных детализированных моделей с использованием аттестованных программ для ЭВМ.

Настоящая работа посвящена многовариантным расчетам дозовых полей вблизи токамака T-15MД во время предполагаемого дейтериевого импульса и после него для различных конфигураций биологической защиты и параметров нейтронного источника. Алгоритм оценки отработан при обосновании радиационной безопасности установки МИН [3] и основан на проведении совместных расчетов по программе моделирования переноса нейтронов и гамма-квантов методом Монте-Карло и программе моделирования облучения материалов нейтронным потоком. В частности, в данной работе использовались программы TDMCC [4] и TRACT-F [5], входящие в состав комплекса КОРИДА – интегрального комплекса для расчета нейтронно-физических характеристик объектов ядерной техники и доз облучения для населения и персонала с целью принятия управленческих и стратегических решений [6].

Многовариантные расчеты проводились с применением детализированной 3D-модели установки и смежных помещений в реальной геометрии, основанной на цифровой модели здания (см. рисунок 1). Цифровая модель здания получена в результате лазерного сканирования помещений, выполненного сотрудниками ИБРАЭ РАН.



Рисунок 1 – Вид цифровой (слева) и расчетной (справа) модели токамака Т-15МД

Проведенные многовариантные расчеты позволили оценить мощности доз нейтронного и гаммаизлучений в регистрационных точках вблизи установки, смежных помещениях и за пределами здания во время и после импульсов. По результатам расчетов выбрана эффективная конфигурация биологической защиты, определены запретные времена и зоны для пребывания персонала и населения в соответствии с нормативными требованиями в отношении допустимых дозовых нагрузок [7, 8]. Данные результаты для рассмотренных параметров предполагаемого дейтериевого режима работы установки могут впоследствии быть использованы для обоснования радиационной безопасности и выбора мер защиты токамака T-15MД.

- 1. Первые экспериментальные результаты на токамаке т-15МД / Е. П. Велихов, М. В. Ковальчук, И. О. Анашкин [и др.] // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2024. Т. 47, № 2. С. 5-14. DOI 10.21517/0202-3822-2024-47-2-5-14. EDN CYSKYV.
- 2. Хрипунов, В. И. Оценка источников и полей излучения на установке Т-15МД / В. И. Хрипунов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2020. Т. 43, № 1. С. 9-38. DOI 10.21517/0202-3822-2020-43-1-9-38. EDN SHHKIE.
- Моделирование радиационной обстановки около импульсного генератора нейтронов с использованием программного комплекса КОРИДА / П. А. Кизуб, П. А. Блохин, В. Ю. Коновалов [и др.] // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. – 2023. – Т. 46, № 4. – С. 92-100. – DOI 10.21517/0202-3822-2023-46-4-92-100. – EDN LCWPRI.
- 4. Житник А.К., Рослов В.И., Семенова Т.В. и др. Программа ТDMCC (Time Dependent Monte Carlo Code). Свидетельство о государственной регистрации № 2010614412, ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ»
- 5. Д. В. Крючков, П. А. Кизуб, Ю. Е. Ванеев [и др.] Программа для оценки радионуклидных составов и радиационных характеристик РАО установок УТС (TRACT-F). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024680561, заявитель Российская Федерация, от имени которой выступает Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом», Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук.
- Блохин А. И. и др. Программный комплекс" КОРИДА" для прогнозирования радиационных полей с учетом изменений характеристик источников излучения и инженерных барьеров безопасности //Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. – 2019. – №. 4. – С. 78-87.
- 7. СанПиН 2.6.1.2523–09. Нормы радиационной безопасности (НРБ99/2009). Утверждены Постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации Г.Г. Онищенко от 07.07.2009 № 47.
- Санитарные правила и нормативы СП 2.6.1.2612-10. Основные санитарные правила обеспечения радиационной безопасности ОСПОРБ 99/2010. Утверждены Постановлением Главного государственного санитарного врача Российской Федерации от 26.04.2010 № 40 (в ред. Изменений № 1, утв. Постановлением Главного государственного санитарного врача РФ от 16.09.2013 № 43).

# Исследование эффективности CWENOZ схем для дискретизации трёхмерных задач переноса на неструктурированных сетках

Жилин В.А., инженер ИБРАЭ РАН, студент 5 курса МГУ им. М.В.Ломоносова

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова

#### тел.: (916) 672-04-76, эл. почта: zhilin@ibrae.ac.ru

Моделирование процессов переноса радионуклидов с подземными водами является критически важным в задачах обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов. Наибольший интерес при этом представляет динамика изменения концентрации радионуклидов в некоторых контрольных точках. Использование простых численных схем может приводить к численной диссипации, что "размазывает" решение и занижает пиковые значения концентрации. Схемы семейства СWENO, включая CWENOZ, обеспечивают высокую точность в областях с гладким решением и адаптируются к негладкостям, что повышает общую точность моделирования.

Основная идея CWENO схем – это восстановление функции с помощью нелинейной комбинации полиномов, построенных на центральном и направленных шаблонах [1]. Каждому многочлену присваивается вес, зависящий от гладкости. Схема CWENOZ призвана увеличить порядок точности в областях с высокой гладкостью решения путем введения оптимального полинома высокой степени на центральном шаблоне.

Рассмотрим уравнение переноса:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\vec{u}C) = 0, \tag{1}$$

где C – концентрация примеси, а  $\vec{u}$  – скорость потока.

Распишем дискретизацию для уравнения переноса (1) с помощью метода конечных объемов и явного метода Эйлера:

$$\frac{(c_i^{n+1}-c_i^n)}{\Delta t}V_i + \sum_{e_k \in \partial E_i} \int_{e_k} \vec{u} C_{upw}^n \cdot \vec{n}_{e_k} dS = 0.$$
<sup>(2)</sup>

Здесь  $\Delta t$  – шаг по времени,  $C_i^n$  – концентрация на ячейке  $E_i$  на *n*-ом шаге по времени,  $\vec{n}_{e_k}$  – внешняя нормаль к грани  $e_k$ ,  $C_{upw}^n$  – противопотоковая аппроксимация концентрации на *n*-ом шаге по времени,  $V_i$  – объем ячейки  $E_i$ . Задача фильтрации решается методом конечных объемов, и расчетными величинами являются потоки через грани сетки вида:

$$u_k = \int_{e_i} \vec{u} \cdot \vec{n}_{e_k} dS. \tag{3}$$

Будем аппроксимировать потоки вектор-функциями, постоянными по площади каждой грани расчетной сетки. Перепишем уравнение (2):

$$\frac{(c_i^{n+1}-c_i^n)}{\Delta t}V_i + \sum_{e_k \in \partial E_i} u_k C_{e_k}^n = 0,$$

$$\tag{4}$$

где  $C_{e_k}^n = \int_{e_k} C_{upw}^n dS$ - среднее значение концентрации на грани  $e_k$ , взятое выше по потоку. Перейдем к алгоритму нахождения  $C_{e_k}^n$ , определяющему схему СWENOZ.

Аппроксимируем концентрацию на каждой ячейке расчетной сетки  $E_i$  с помощью полинома  $p_i(x, y, z)$  некоторой степени *r*. Этот полином должен удовлетворять закону сохранения массы на ячейке  $E_i$ :

$$\frac{1}{v_i} \int_{E_i} p_i(x, y, z) dV = C_i.$$
<sup>(5)</sup>

Из-за возможных различий геометрических свойств ячеек полиномиальное восполнение будем строить в преобразованной системе координат. Это способствует уменьшению эффекта масштабирования. Полиномиальное восполнение строится на ячейке  $E_i$ , являющейся отображением ячейки  $E_i$ , с использованием полиномиальных базисных функций  $\varphi_k(\xi, \eta, \zeta)$ :

$$p_i(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{k=0}^K a_k \,\varphi_k(\xi,\eta,\zeta) = C_i + \sum_{k=1}^K a_k \,\varphi_k(\xi,\eta,\zeta). \tag{6}$$

Для построения полиномиального восполнения определяются центральный и направленные шаблоны. Алгоритм нахождения шаблонов представлен в работе [2]. Итоговый полином схемы CWENOZ вычисляется следующим образом:

$$p(\xi,\eta,\zeta)^{CWENOZ} = \sum_{s=1}^{s_t} \omega_s p_s(\xi,\eta,\zeta), \tag{7}$$

 $p(\zeta,\eta,\zeta) = Z_{s=1} \omega_s p_s(\zeta,\eta,\zeta),$  (7) где  $s_t$  – количество шаблонов,  $p_s$  – полином, соответствующий s-му шаблону,  $\omega_s$  – нормированные нелинейные веса. Особенность CWENOZ-схем заключается в выборе весов [3]. Такие модификации выбора весов позволяют добиться лучшей точности на гладких данных, особенно на жестких сетках. При этом сохраняются все свойства WENO схем.

Вычислительные эксперименты проводились на неструктурированных сетках. Такие сетки более сложные в использовании по сравнению со структурированными, но при этом они предоставляют гораздо больше возможностей для работы с геометрически сложными объектами и решения задач в реальных условиях. Результаты показывают, что использование CWENOZ-схем для различных начальных условий позволяет достичь точности лучше, чем у WENO и MUSCL, что подтверждает их эффективность.

- 1. Tsoutsanis P., Dumbser M. Arbitrary high order central non-oscillatory schemes on mixed-element unstructured meshes //Computers & Fluids. 2021. T. 225. C. 104961.
- 2. Tsoutsanis P. Stencil selection algorithms for WENO schemes on unstructured meshes //Journal of Computational Physics 2019. Vol. 4. Pp. 100037.
- 3. Cravero I., Semplice M., Visconti G. Optimal definition of the nonlinear weights in multidimensional central WENOZ reconstructions //SIAM Journal on Numerical Analysis. 2019. T. 57. №. 5. C. 2328-2358.

# Кросс-верификация кодов MCU-FR и ODETTA-F применительно к задачам расчета радиационной защиты установок управляемого термоядерного синтеза на основе экспериментов из базы данных SINBAD

Игнатьев И.А., Березнев В.П., Блохина Г.С., Колташев Д.С. Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН тел.: +7 (910) 867-22-30, эл. почта:ignatev@ibrae.ac.ru

Для обоснования радиационной безопасности установок управляемого термоядерного синтеза (УТС) необходимо проведение расчетных оценок нейтронно-физических характеристик (НФХ) и дозовых нагрузок. Программы, используемые для данных расчетов, должны быть валидированы и верифицированы. На текущий момент в России нет аттестованных кодов для проведения подобных расчетов применительно к установкам УТС.

В настоящее время в ИБРАЭ РАН проводится верификация и валидация кода MCU-FR, разработанного на базе метода Монте-Карло в НИЦ «Курчатовский институт» [1, 2], а также разрабатывается код ODETTA-F, основанный на методе дискретных ординат и методе конечных элементов на неструктурированных тетраэдральных сетках [3]. Данные коды предполагается использовать для моделирования переноса нейтронного и фотонного излучений в защитных композициях установок управляемого термоядерного синтеза и гибридных систем.

С целью валидации кодов MCU-FR и ODETTA-F проведено расчетное моделирование экспериментов из базы данных SINBAD [4] (Fusion Neutronics Shielding), включенных в их общую матрицу верификации и валидации. В рамках кросс-верификации были смоделированы следующие эксперименты:

– эксперимент ОКТАВИАН по определению спектров нейтронов и фотонов утечки из заполненных кремниевой засыпкой сфер диаметрами 40 см и 60 см при прохождении нейтронов с энергией 14 МэВ (NEA-1553/21);

 бенчмарк-эксперимент Физико-энергетического института (ФЭИ) по прохождению нейтронов с энергией 14 МэВ через железные сферы (NEA – 1517/75);

бенчмарк-эксперимент FNS/JAERI с цилиндрической сборкой из вольфрама (NEA-1553/74).

Источником в моделируемых экспериментах являлись титан-тритиевые пластины, бомбардируемые дейтронами и испускающие в результате реакции  ${}^{3}$ H(d,n) ${}^{4}$ He нейтроны со средней энергией 14,1 МэВ. В экспериментах измерялись энергетические спектры нейтронного и фотонного излучений, скорости реакций и мощность поглощенной дозы фотонного излучения.

В связи со сложностью прямого сравнения энергетических спектров нейтронного и фотонного излучений, полученных в экспериментах и в результате расчетного моделирования, расчеты выполнялись последовательно. Сначала моделирование проводилось с помощью кода MCU-FR, так как он имеет возможность формирования входных и выходных данных в заданной пользователем энергетической структуре, позволяя без преобразований использовать экспериментальные данные, представленные в различных энергетических приближениях в базе данных SINBAD. Затем проводились расчеты с помощью кода ODETTA-F в 299- и 127- групповых энергетических приближениях для нейтронного и фотонного излучений соответственно, результаты которых сравнивались с результатами, полученными по MCU-FR.

Рассчитанные с помощью кодов MCU-FR и ODETTA-F энергетические спектры нейтронного и фотонного излучений в достаточной мере согласуются между собой и близки к результатам экспериментов, однако в отдельных энергетических диапазонах наблюдаются существенные отклонения, что является предметом дальнейших исследований. Отклонения результатов расчетов функционалов (скорости реакции и мощность поглощенной дозы гамма-излучения) находятся в пределах 25 %.
- 1. Аттестационный паспорт программы для ЭВМ «Программа, предназначенная для моделирования процессов переноса нейтронов, фотонов и электронов аналоговыми и весовыми методами Монте-Карло на основе оцененных ядерных данных в системах с трехмерной геометрией. Версия 1.4» (MCU-FR/V1.4). Рег. № 601 от 23 июля 2024 года.
- 2. Гуревич М.И., Калугин М.А., Олейник Д.С., Шкаровский Д.А. Характерные особенности MCU-FR. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов, 2016, вып. 5, с. 17-21.
- 3. Bereznev V.P., Belousov V.I., Grushin N.A., Seleznev E.F., Sychugova E.P. New neutronic calculation codes based on discrete ordinates method using methods of finite differences and finite elements. Proc. of the International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17) Programme and Papers, (p. v). International Atomic Energy Agency (IAEA), 2017.
- 4. Kodeli I. A., Sartori E. SINBAD Radiation shielding benchmark experiments. Annals of Nuclear Energy, 2021. DOI: https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108254.

# Моделирование центральной блокировки в 37-стержневой сборке с помощью ячейкового кода SUBCHANNEL-Na

Идрисов Д.М., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Грудцын Я.В.

#### Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-32, эл. почта: idrisovdm@ibrae.ac.ru

Необходимость обеспечения эффективности и безопасности работы реакторной установки (РУ) делает актуальным решение широкого круга задач по обоснованию характеристик активной зоны реактора в режимах нормальной эксплуатации, а также безопасности при нарушениях нормальной эксплуатации, в частности требуется обоснование безопасности эксплуатации тепловыделяющих сборок (TBC). Одним из основных методов обоснования безопасности реакторной установки является численный расчёт. Поэтому разработка программ, позволяющих получить поля скоростей, температур теплоносителя и оболочек твэлов в TBC, с учетом неоднородности распределения параметров (проходных сечений, расхода теплоносителя, энерговыделения и т. д.) представляет важную задачу.

Существующие канальные коды не позволяют (в силу специфики заложенных моделей) учесть при моделировании межканальный обмен, а, следовательно, и неоднородность распределения теплогидравлических параметров в поперечном направлении. Использование CFD кодов могло бы разрешить эти проблемы, но полноценное моделирование процессов тепломассопереноса в активной зоне реактора требует значительных вычислительных мощностей. Существует так же третий подход, сочетающий в себе как простоту и быстродействие канальных кодов, так и возможность учета межканального взаимодействия в поперечном направлении. Суть этого метода заключается в разбиении активной зоны на ячейки — каналы между твэлами и кожухом. При этом в ячейковом коде учитывается обмен импульсов и энергий в поперечном направлении как за счёт перетока, так за счёт турбулентности.

В данной работе представлены результаты численного моделирования центральной блокировки в 37стержневой сборке на стенде SIENA (Япония) [1], с помощью разрабатываемого в ИБРАЭ РАН ячейкового кода SUBCHANNEL-Na [2]. Данный код позволяет моделировать двухфазное течение в модели раздельного течения фаз в нестационарных условиях. В первой серии экспериментов исследовались распределения температуры за блокировкой проходного сечения тестовой секции, в том числе для определения условий локального кипения теплоносителя при центральной блокировке в 37стержневой сборке с дистанционирующими решетками с треугольной компоновкой стержней. Сборка была помещена в шестигранный кожух, и состояла из 19 электрически обогреваемых стержней внутри блокады и оставшихся пустых стержней для тестов с центральной блокировкой. Для имитации центральной блокировки прикрывалось 24 центральных ячеек между стержнями.

В результате численного моделирования были получены линии тока в области блокировки, поле температур, а так же радиальные распределения температур на различных расстояниях от блокировки. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными для радиального распределения температур показало высокую эффективность и точность ячейкового кода SUBCHANNEL-Na0 для моделирования задач с высокой степенью неоднородности геометрии.

Работы выполнены в рамках Госзадания Минобрнауки (FFGF-2024-0014).

- 1. Kikuchi Y., Haga K. Sodium boiling experiments in a 19-pin bundle under loss-of-flow conditions //Nuclear Engineering and Design. 1981. T. 66. №. 3. C. 357-366.
- Alipchenkov V. M. et al. Three-Liquid, Two-Phase, Per-Channel Thermohydraulics Code Subchannel-Na/V1. 0 for Single-Phase Sodium-Coolant Flows and Heat-Transfer: Key Models //Atomic Energy. – 2022. – T. 132. – №. 6. – C. 347-352.

### Интеграция данных теплофизического профилирования керна и стандартных ГИС для прогноза тепловых свойств, оценки трещиноватости и состава пород участка «Енисейский»

Казаков А.Д., Калинина М.С., Савельев Е.Г.

Науч. рук.: к.х.н., директор ЦДУ Сколтеха Спасенных М.Ю., к.т.н. Чехонин Е.М., д.ф.-м.н. Попов Ю.А.

Сколковский институт науки и технологий

тел.: +7 928 220 09 05 эл. почта: A.Kazakov@skoltech.ru

#### Введение

Одним из ключевых вопросов развития атомной энергетики является проблема безопасного обращения с высокоактивными отходами, образующимися при эксплуатации ядерных реакторов и подлежащих глубинному захоронению. Для решения этой задачи радиоактивные отходы (PAO) предполагается размещать в геологической среде, что требует детального изучения свойств пород массива, включая их тепловые характеристики и структурные особенности. В силу этого, исследование тепловых свойств и трещиноватости кристаллических пород имеет важное значение для решения задач обоснования безопасности захоронения РАО.

#### Актуальность проблемы

Использование прецизионного бесконтактного метода непрерывного теплофизического профилирования керна (НТПК) является эффективным способом получения данных о теплопроводности и объемной теплоемкости пород [1]. Однако исследование тепловых свойств вдоль всей скважины осложнено наличием интервалов с отсутствием керна, что ограничивает объем полезной информации, получаемой методом НТПК. Это обуславливает необходимость разработки способа прогноза теплопроводности в интервалах с отсутствием кернового материала с использованием данных ГИС. Отдельную актуальность приобретает проблема детального выделения зон трещиноватости и уточнения состава вмещающих пород массива (включая залеченные трещины), поскольку эти данные критически важны для моделирования процессов тепломассопереноса во вмещающих породах.

#### Цель работы и объект исследования

Целью работы является разработка метода прогноза тепловых свойств, оценки трещиноватости и состава магматических (долериты, спессартиты) и метаморфических (гнейсы) пород участка «Енисейский».

#### Методы исследований

Для решения рассмотренных выше проблем выполнена интеграция результатов НТПК и стандартных геофизических исследований скважин (ГИС), полученных на магматических и метаморфических породах. Для проведения исследования данные НТПК (разрешение 1 мм) были усреднены до масштаба ГИС (40–100 см) для корректного сопоставления с гамма-каротажем (ГК), плотностным ГГК-п, каротажем сопротивлений (КС) и потенциалом самополяризации (ПС). Интеграция данных позволила выделить интервалы как с наличием статистически значимой корреляционной зависимости, так и с ее отсутствием, что позволило построить эмпирические модели для оценки теплопроводности и идентификации зон трещиноватости пород.

Для прогнозирования теплопроводности и объемной теплоемкости в бескерновых интервалах использовались методы машинного обучения. Результаты НТПК и данные ГИС легли в основу обучающей выборки, на которой тренировалась модель, способная предсказывать тепловые свойства пород на основе стандартного комплекса ГИС. Предварительно проведенный сравнительный анализ классических методов машинного обучения показал, что наилучшие результаты по прогнозу теплопроводности и объемной теплоемкости демонстрирует метод градиентного бустинга (CatBoost).

#### Результаты прогноза тепловых свойств методом машинного обучения

Прогноз теплопроводности и объемной теплоемкости пород в бескерновых интервалах скважины показал высокую точность: более 95% прогнозных значений находятся в пределах ±10% от измеренных

значений (с учетом погрешности измерений). Применение методов машинного обучения позволило на 22% увеличить объем данных по теплопроводности и объемной теплоемкости (на масштабе ГИС).

. Предложенный подход, учитывающий как категориальные данные (тип породы), так и количественные параметры ГИС, обладает потенциалом для регулярного использования при теплофизических исследованиях скважин для захоронения РАО.

#### Результаты оценки трещиноватости и уточнения состава породы путем комплексирования НТПК и ГИС

Комплексирование данных ГК и теплопроводности позволило дифференцировать в гнейсах интервалы глубин с отрицательной взаимосвязью «ГК-теплопроводность», где, увеличение содержания высокотеплопроводного кварца сопровождается существенным уменьшением содержания минералов с повышенной радиоактивностью (биотит, КПШ). Сопоставление данных ГК и результатов расчета естественной радиоактивности в гнейсах позволило выделить «аномальные» интервалы глубин (со значительным превышением или понижением измеренных в скважине значений ГК над расчётными значениями) по установленному уравнению регрессии (1):

$$\Gamma K(\lambda) = 69,46 \cdot \lambda^{-0,886}, R^2 = 0,72, \tag{1}$$

где  $\lambda$  - теплопроводность, Вт/(м·К), ГК( $\lambda$ ) – естественная радиоактивность, мкР/ч. Интервалы глубин со значительным превышением измеренных значений ГК над расчетными могут быть объяснены наличием в рассматриваемом интервале достаточного объема залеченных трещин, или наличием зоны интенсивного кварцевого метасоматоза. Интервалы глубин со значительным превышением расчетных значений ГК над измеренными в скважине значениями могут быть объяснены локальным понижением значений теплопроводности (например, из-за наличия трещин, залеченных низкотеплопроводным и слаборадиоактивным цеолитом).

Связи теплопроводности с плотностью для гнейсов на данном объекте не выражена , несмотря на результаты Кукконена [2], согласно которым теплопроводность гнейсов как правило уменьшается с увеличением плотности. По-видимому, связь плотности и теплопроводности для гнейсов исследованной скважины затушевана значительным количеством интервалов с интенсивным кварцевым метасоматозом. Исходя из этого, нами предложена эмпирическая модель для оценки плотности и зон кварцевого метасоматоза по теплопроводности ( $\lambda$ ):

$$\rho = -0.051 \cdot \lambda + 2.881, r = -0.87 \tag{1}$$

где  $\rho$  - плотность, г/см<sup>3</sup>;  $\lambda$  - теплопроводность, Bт/(м·К)

Таким образом, комплексирование результатов НТПК с данными ГИС, впервые полноценно осуществленное на кристаллических породах, позволило предложить подход к выделению в гнейсах зон кварцевого метасоматоза, возможных зон трещиноватости с предположениями о характере заполнения трещин. Для валидации подхода требуются надежные данные по минеральному составу и результаты анализа трещиноватости пород, вскрытых исследованной скважиной.

#### Выводы

Совместный анализ данных непрерывного теплофизического профилирования керна и данных ГИС с использованием методов машинного обучения позволил предложить следующие методы для изучения свойств и состава магматических и метаморфических пород участка Енисейский:

• Метод оценки тепловых свойств пород по данным ГИС для интервалов или скважин, пробуренных без отбора керна

• Использование результатов НТПК и ГИС для определения состава пород и зон трещиноватости.

Предложенные методы позволяют повысить детальность исследований при сокращении стоимости и времени проведения работ по разведке целевого горизонта объекта.

- Popov Y., Beardsmore G., Clauser C., Roy S. ISRM Suggested methods for determining thermal properties of rocks from laboratory tests at atmospheric pressure // Rock Mechanics and Rock Engineering. – 2016. – Vol.49, No.10. – P.4179-4207. – DOI: http://doi.org/10.1007/s00603-016-1070-5.
- Kukkonen I. Thermal properties of the Olkiluoto mica gneiss: Results of laboratory measurements. Working Report 2000. – 2000.

### Анализ влияния неопределенностей состава материала и плотности потока нейтронов на расчетные значения активности конструкционных материалов ВВЭР-440

Казиева С.Т., аспирант 4 года ИБРАЭ РАН, н.с. ИБРАЭ РАН Катаев Е.В., м.н.с. ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: н.с., к.ф.-м.н. ИБРАЭ РАН Свительман В.С.

#### Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-24-48, эл. почта: kazieva@ibrae.ac.ru

В рамках планирования мероприятий по выводу из эксплуатации ОИАЭ, в частности, АЭС с реакторами ВВЭР-440, важной задачей является прогнозирование изменения составов и радиационных характеристик радиоактивных отходов (РАО), образующихся при выводе из эксплуатации данных объектов. Радиационные характеристики РАО влияют на их классификацию, объемы и выбор варианта обращения с ними, и поэтому критичным для принятия решений вопросом является степень достоверности полученных оценок. Помимо этого, в целом согласно рекомендациям и требованиям российских и международных нормативных документов [1, 2] все оценки, лежащие в основе обоснования безопасности объектов использования атомной энергии, необходимо сопровождать анализом неопределенностей.

Данная работа посвящена анализу влияния неопределенностей состава материала и плотности потока нейтронов на расчетные значения активности облученных конструкционных материалов реакторной установки ВВЭР-440. Для проведения расчетов в работе используются код TRACT [3] (модуль программного комплекса КОРИДА [4]), который разрабатывается в ИБРАЭ РАН и применяется в расчетных исследованиях состава и радиационных характеристик ОЯТ и РАО [3, 5–6], и код MOUSE [7–8], в котором реализованы современные вариационные и плотностные методы анализа чувствительности, а также эвристические оптимизационные алгоритмы. С помощью кода нуклидной кинетики TRACT для каждой моделируемой группы конструкций выполнены многовариантные расчеты активностей материалов с варьированием их составов и плотности потока нейтронов. Далее с помощью кода MOUSE [7–8] с использованием метода Соболя [9] проведен анализ чувствительности, позволяющие оценить степень влияния неопределенности каждого входного параметра на результат расчета. Затем при варьировании выявленных наиболее значимых входных параметров получены стандартные отклонения активностей материалов для каждой конструкции.

Исходные содержания всех элементов в составе конструкционных материалов РУ ВВЭР-440 задавались согласно государственным стандартам и техническим условиям на продукцию (материал). Плотности потока нейтронов и их пространственно-энергетические распределения в объемах выделенных фрагментов получены с использованием кода TDMCC [10] (модуль расчета методом Монте-Карло программного комплекса КОРИДА) в соответствии с методикой [11].

Полученные результаты позволили сделать следующие выводы:

• для большинства конструкций максимальное влияние на активность материала оказывает состав стали (содержание никеля, марганца и кобальта), за исключением удаленных зон конструкций, для которых получены высокие значения погрешностей плотности потока нейтронов;

• для всех реакторных сталей основным источником неопределенности значений активности материалов на времена после 20–40 лет выдержки (возможный период демонтажа РУ) является неопределенность содержания никеля;

• стандартное отклонение (1σ) значений активности конструкционных материалов (металлоконструкций и т.д.) изготовленных из стали СТЗСП, 20, 22Л, 30П, 35, 12Х1МФ, ЭИ10 составляет 20–24%, 37–42% и 51–59% от средней величины их активности на времена выдержки 25, 30 и 40 лет, соответственно, при известной неопределенности начального содержания никеля в составе стали (от 0 до 0,3% по массе).

- 1. Захоронение радиоактивных отходов: Серия норм безопасности МАГАТЭ: Конкретные требования безопасности No. SSR-5. Вена, Австрия: МАГАТЭ, 2011.
- Руководство по безопасности при использовании атомной энергии "Оценка долговременной безопасности пунктов приповерхностного захоронения радиоактивных отходов" РБ 117-16. Дата введения: 14.12.2016. Утверждён: 14.12.2016. ФБУ НТЦ ЯРБ. - 2017 г.
- 3. Блохин А.И., Блохин П.А., Сипачев И.В. Возможности расчетного кода TRACT для решения задач характеризации радионуклидного состава РАО и ОЯТ // Радиоактивные отходы, 2018. № 2 (3). С. 95-104.
- 4. Аракелян А. А., Блохин А. И., Блохин П. А. [и др.]. Развитие программного комплекса КОРИДА и опыт его применения при решении задач обращения с ОЯТ и РАО / А. А. Аракелян, А. И. Блохин, П. А. Блохин [и др.] // Радиоактивные отходы. 2022. № 3(20). С. 107-116.
- 5. Блохин А. И. Применение расчетного кода TRACT для оценок радио- нуклидных составов и радиационных характеристик ОЯТ и РАО класса 1 / А. И. Блохин, П. А. Блохин, С. Т. Казиева // Радиоактивные отходы. 2020. № 4(13). С. 99-111.
- 6. Валидация программы нуклидной кинетики TRACT для оценки радиационных характеристик ОЯТ и PAO / А. И. Блохин, П. А. Блохин, С. Т. Казиева, И. В. Сипачёв // Радиоактивные отходы. 2022. Т. 4(21). С. 48-57.
- 7. Савельева, Е. А. Обращение с неопределенностями в задачах расчетного обоснования долговременной безопасности / Е. А. Савельева, В. С. Свительман // Радиоактивные отходы. 2022. № 3(20). С. 61-71.
- Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022667451 Российская Федерация. Расчетный комплекс для учета неопределенностей численного моделирования в задачах обоснования безопасности MOUSE. Версия 1.0: № 2022666414: заявл. 05.09.2022: опубл. 21.09.2022 / А. С. Нужный, Е. А. Савельева-Трофимова, В. С. Свительман [и др.].
- 9. Sobol I. M. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates //Mathematics and computers in simulation. – 2001. – Vol. 55. – №. 1-3. – p. 271-280.
- 10. Житник А. К., Рослов В. И., Семенова Т. В. и др. Программа TDMCC (Time Dependent Monte Carlo Code). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010614412 от 07.07.2010.
- 11. Сошников В.М., Бриткина В.С., Ванеев Ю.Е. [и др.] Особенности разработки, верификации и использования расчетных моделей реактора типа ВВЭР для прогнозирования наведенной активности в материалах конструкций за весь срок эксплуатации. Сб. тезисов докладов МНТК «Безопасность, эффективность и экономика атомной энергетики». С. 189-190.

# Поиск бозонной темной материи нейтринным детектором iDREAM на Калининской атомной электростанции

Киселев К.К.<sup>1,2</sup>, Литвинович Е.А.<sup>1</sup>

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент НИЯУ МИФИ Литвинович Е.А.

<sup>1</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» <sup>2</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (982) 386-13-14, эл. почта: kiselev@ibrae.ac.ru

#### Введение

К настоящему времени целый ряд экспериментов, направленных на поиск проявлений тёмной материи (ТМ) в виде массивных слабовзаимодействующих частиц, не привел к их обнаружению. В этой связи, возрастает роль экспериментальных поисков ТМ в рамках других ее моделей. В частности, широко рассматривается скрытый сектор частиц и взаимодействий, постулируется существование нового бозона («тёмного бозона», ТБ) – возможного переносчика скрытого взаимодействия, – который может обеспечить «мост» между частицами СМ и скрытого сектора.

В данной работе предполагается, что ТБ слабо взаимодействует с заряженными лептонами СМ. Такое взаимодействие для скалярных и псевдоскалярных частиц феноменологически описывается юкавовскими слагаемыми в лагранжиане

$$\mathcal{L} \supset -g_X \bar{\psi} \psi X,\tag{1}$$

$$\mathcal{L} \supset -g_X \bar{\psi} \gamma^5 \psi X, \tag{2}$$

где X – поле, описывающее ТБ,  $g_X$  – константа взаимодействия ТБ с заряженными лептонами СМ,  $\psi$  – поле заряженного фермиона (электрона) СМ. Масса ТБ будет обозначаться  $m_X$ .

#### Детектор iDREAM

Нейтринный детектор iDREAM (industrial Detector of REactor Antineutrinos for Monitoring) расположен на удалении 19.6 м от центра активной зоны (АЗ) реактора ВВЭР-1000 ( $P_{th} = 3000$  МВт) энергоблока № 3 КАЭС. Детектор предназначен для мониторинга состояния и мощности реактора по потоку антинейтрино из АЗ. Мишень для нейтрино – гадолинизированный жидкий органический сцинтиллятор (ЖОС) на основе линейного алкилбензола, общая масса которого 1 т. Мишень просматривают 16 фотоэлектронных умножителей (ФЭУ), расположенных на крышке внутреннего бака из нержавеющей стали. Пространство между внутренним и внешним баками заполнено ЖОС без Gd, просматривается 12 ФЭУ и играет роль гамма-кетчера, а также пассивной защиты мишени от внешней фоновой радиоактивности.

#### Спектр у-квантов в АЗ реактора ВВЭР-1000

Предполагается, что темный бозон X может образоваться в A3 в процессе рассеяния  $\gamma$ -квантов с наименее связанными электронами атомов, аналогично эффекту Комптона:  $\gamma e \rightarrow eX$ . Основными источниками  $\gamma$ -квантов в A3 являются мгновенное  $\gamma$ -излучение деления ядер и (n,  $\gamma$ )-реакции.

Взвешивание спектров мгновенных ү-квантов с долями делений и нормировка на энерговыделение, а также взвешивание спектров ү-излучения от  $(n,\gamma)$ -реакций со скоростями реакций, полученными из изотопного состава АЗ, позволяют учесть особенности топливного состава реактора ВВЭР-1000 и уточнить как общую нормировку, так и форму спектрального состава  $\gamma$ -излучения в АЗ по сравнению с широко используемыми и упрощенными оценками. Ошибки расчета обусловлены погрешностями множественности  $\gamma$ -излучения ( $\sim$ 7%), ошибками долей делений ( $\sim$ 4%), тепловой мощности ( $\sim$ 2%) и ошибками интенсивностей линий (n,  $\gamma$ )-реакций ( $\sim$ 2%). Таким образом, итоговую погрешность спектра можно консервативно оценить в 10%.

#### Сигнал от тёмных бозонов в детекторе iDREAM

Предполагается, что ТБ может быть зарегистрирован по реакции обратного рассеяния на электронах сцинтиллятора с образованием вторичного γ-кванта: Хе→еү'. Ввиду того, что детектор iDREAM является гомогенным, электрон отдачи и γ-квант будут регистрироваться как одно событие.

Используя рассчитанный спектр  $\gamma$ -излучения  $\frac{dN}{dE_{\gamma}}$  в A3, можно получить ожидаемый в детекторе iDREAM энергетический спектр событий взаимодействия ТБ:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E_{ev}} = \frac{N_e T}{4\pi R^2} \int_{E_{\gamma'\min}}^{E_{\gamma'\max}} \frac{\mathrm{d}\sigma_{Xe\to\gamma'e}}{\mathrm{d}E_{\gamma'}} \exp(-R\sigma_{Xe\to\gamma'e} n_e) \int_{E_{\gamma\min}}^{E_{\gamma\max}} \frac{1}{\sigma_{tot} + \sigma_{\gammae\to Xe}} \frac{\mathrm{d}\sigma_{\gammae\to Xe}}{\mathrm{d}E_X} \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E_{\gamma}} \mathrm{d}E_{\gamma} \mathrm{d}E_{\gamma'}, \tag{3}$$

В этой формуле  $N_e$  – плотность электронов в мишени детектора, R – расстояние от центра A3 до центра детектора,  $\frac{d\sigma_{Xe\to\gamma'e}}{dE_{\gamma'}}$  – дифференциальное сечение реакции обратного рассеяния ТБ на электроне,  $E_{\gamma'}$  – энергия вторичного  $\gamma$ -кванта. Для учета ослабления потока ТБ на пути от A3 к детектору в (3) введен экспоненциальный множитель, в котором  $\sigma_{Xe\to\gamma'e}$  – полное сечение обратного рассеяния ТБ на электронах вещества,  $n_e$  – средняя концентрация электронов на пути к детектору (воздух, бетон),  $E_X$  – энергия рождённого в A3 ТБ,  $\sigma_{\gamma e\to Xe}$  – полное сечение рождения ТБ,  $\frac{d\sigma_{\gamma e\to Xe}}{dE_X}$  – дифференциальное сечение рождения ТБ. Полное сечение рассеяния  $\gamma$ -квантов на электронах  $\sigma_{tot}$  было рассчитано для состава A3 реактора BBЭP-1000 с использованием открытой базы ядерных данных.

#### Анализ данных и результаты

Для анализа были взяты периоды набора данных детектором iDREAM, соответствующие 47 (37) суткам живого времени при включенном (выключенном) реакторе в начале топливной кампании, когда поток  $\gamma$ -квантов в АЗ является наибольшим. Набор данных при включенном реакторе осуществлялся в период его стабильной работы на мощности вблизи среднего значения  $P_{th} = 3093 \pm 6$  MBT. Были отобраны одиночные события с энергией в интервале от 5 до 10 МэВ, для которых в течение 100 мкс до и после не было зарегистрировано других событий. После каждого зарегистрированного детектором космического мюона вводилось мертвое время 150 мкс.

Предполагая, что скорость счёта фоновых одиночных событий не зависит от режима работы реактора, учёт фона можно произвести вычитанием скорости счёта детектора при выключенном реакторе  $R_{OFF} = 1.986 \pm 0.001$ (стат.) с<sup>-1</sup> из скорости счёта при включенном реакторе  $R_{ON} = 2.030 \pm 0.001$ (стат.) с<sup>-1</sup>. Поскольку измеренные значения флуктуаций скорости счёта одиночных событий значительно превышают статистические ошибки этих величин, можно оценить величину вносимой  $R_{exp}$  в систематической погрешности, квадратичным вычетом статистической ошибки из флуктуации скорости счёта, получая итоговый результат:  $R_{exp} = 0.044 \pm 0.001$ (стат.)  $\pm 0.035$ (сист.) с<sup>-1</sup>.

Для получения ограничения на параметры модели ТБ была построена статистическая модель ожидаемой скорости счёта, учитывающая погрешность рассчитанного спектра  $\gamma$ -квантов АЗ и систематическую ошибку, вносимую флуктуациями. Затем была составлена функция правдоподобия, и для уровня достоверности 90% были получены ограничения на параметры моделей ТБ:  $g_X < 1.9 \cdot 10^{-4}$  для псевдоскалярных и  $g_X < 2.1 \cdot 10^{-4}$  скалярных частиц.

В диапазоне масс темного бозона  $10^{-10} \leq m_X \leq 30$  эВ имеющиеся в литературе строгие ограничения на константу  $g_X$ , следующие из массива астрофизических данных, впервые дополнены экспериментальными результатами реакторного нейтринного эксперимента в рамках модельнонезависимого подхода.

### Модернизация автоматизированной системы управления рисками при строительстве АЭС как элемента автоматизированной системы управления предприятием на всех этапах жизненного цикла

Клятецкий С.А.<sup>1</sup>, заместитель директора Департамента технологической независимости объектов АСУ ТП и КИИ Галоян Н.А.<sup>2</sup>, аспирант

> <sup>1</sup>Государственная корпорация «Росатом» <sup>2</sup> НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

эл. почта: SteAleKlyatetsky@rosatom.ru

В настоящее время прорабатывается вопрос о проектировании, разработке и внедрении единой автоматизированной системы управления предприятием (далее – АСУП) на все стадии жизненного цикла АЭС (строительство, эксплуатация, вывод из эксплуатации) в рамках построения единой платформы поддержки жизненного цикла АЭС.

Автоматизированная система управления предприятием: комплекс программных, технических, информационных и организационно-технологических средств для эффективного планирования и управления бизнес-процессами на АЭС, оптимизации затрат и обеспечения безопасности выработки электроэнергии на АЭС.

Основное назначение АСУП – автоматизация бизнес-процессов предприятия.

Распределение бизнес-процессов и количество информационных систем (далее – ИС), требуемых для их автоматизации разработано и одобрено для стадии «Эксплуатация».

АСУП стадии «Строительство» должна иметь набор ИС отличный от других стадий, но конкретный перечень ИС требует дополнительной проработки. Основное внимание будет уделено ИС позволяющим контролировать процесс строительства, визуализировать его, осуществлять процесс принятия решений в ходе строительства.

Одной из требуемых для стадии «Строительство» информационных систем является «Автоматизированная система управления рисками». В настоящий момент данная ИС применяется для процессов управления рисками при сооружении АЭС большой мощности в России и на зарубежных проектах АЭС, однако указанная ИС имеет потенциал развития в части разработки модуля поддержки принятия управленческих решений по предупредительным мероприятиям, позволяющим предотвратить реализацию рисков или минимизировать их последствия.

Предлагается разработка указанного модуля с применением Концепции снижения риска недостижения ключевых событий.

Концепция снижения риска недостижения ключевого события (повышение защищенности события от реализации риска) основывается на общих принципов принятия решений в условиях неопределенности и риска. Однако принятие рациональных решений в рассматриваемом случае затрудняется из-за следующих факторов:

Большого числа таких событий (более 200 ключевых событий при строительстве одного объекта);

- Значительного числа факторов, влияющих на принимаемое решение. Так, у каждого риска (события, реализация которого приведет к недостижению ключевого события) существует от 1 до 6 факторов (причин) возникновения, от 1 до 4 последствий, до 6 предупредительных мероприятий.

- Риск может иметь один из нескольких статусов (активен, закрыт и т.д.); может относиться к одной из более чем 10 категорий (лицензирование, проектирование, закупки, поставки, политические и т.д.).

В основу указанной Концепции предлагается положить принцип равного риска недостижения ключевого события для рассматриваемого субъекта (владельца события – органа управления). Состоит в обеспечении защищенности k-го ключевого события на уровне, определяемом из условия равного с другими событиями риска его недостижения для рассматриваемого владельца риска:

$$R_k(\Delta t) = Q_k(\Delta t) \times \overline{W}_k = \text{const}\forall k = 1, ..., N,$$
(1)

где N — общее число ключевых событий, находящихся в ведении рассматриваемого субъекта;

 $Q_k(\Delta t)$  — показатель безусловной уязвимости k-го события инцидентам (вероятность реализации риска за интервал времени  $\Delta t$ );

 $\overline{w}_k$  — средний по совокупности характерных сценариев инцидентов ущерб вследствие недостижения ключевого события для рассматриваемого субъекта.

После завершения разработки соответствующего математического аппарата и модернизации модуля поддержки принятия решений по предупредительным мероприятиям, не позволяющим реализовать риски или минимизировать их последствия, на основе концепции снижения риска «Автоматизированная система управления рисками» после может стать одним из основных компонентов АСУП стадии «Строительство».

## Моделирование процессов в ампуле-петле с естественной циркуляцией натрия

Ковешников К.С., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: д.т.н., с.н.с. ИБРАЭ РАН Яньков Г.Г.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (977) 597-02-39, эл. почта: koveshnikovks@ibrae.ac.ru

Для изучения процессов, происходящих в топливе при авариях типа TIB (Total Instantaneous Blockage) и ULOF (Unprotected Loss of Flow) реакторов с натриевым теплоносителем, а также для пополнения валидационной базы планируется провести экспериментальные исследования, в которых ампула с топливом будет облучаться в исследовательском реакторе. В так называемой ампуле-петле естественной циркуляции (АПЕЦ) натрий будет циркулировать по замкнутому контуру, передавая тепло от топлива к внешней стенке ампулы, охлаждаемой теплоносителем исследовательского реактора. Облучение и нагрев топлива планируется проводить на нескольких уровнях мощности реактора, при максимальной мощности предполагается плавления топлива.

Экспериментальная ячейка состоит из шестигранного чехла, обечайки и цилиндрической ампулы. В зазоре между оболочкой ампулы и обечайкой прокачивается охлаждающий реакторный натрий. Внутри цилиндрической ампулы есть две зоны: подъемная зона, в которой натрий нагревается от сборки из трех твэлов и поднимается вверх, и опускная зона, где натрий отдает тепло внешнему натрию и опускается вниз. Между подъемной и опускной зонами находится разделитель с газовым зазором внутри и вытеснители, интенсифицирующие циркуляцию в ячейке. Фрагмент ампулы (1/6), «вырезанный» плоскостями симметрии и используемый при моделировании приведен на рисунке 1.



Рисунок 1 – Моделируемый фрагмент АПЕЦ

Цель исследования – оптимизировать конструкцию ампулы, чтобы получить необходимые экспериментальные данные, которые можно будет использовать для валидации канальных теплогидравлических кодов. Для этого требуется, чтобы на одном, а желательно на нескольких уровнях мощности не происходило кипение натрия в ампуле, а также отсутствовало возвратное течение в подъёмном участке.

Численное моделирование эксперимента проводилось CFD кодом ANES [1]. Математическая модель включает осредненные по Рейнольдсу уравнения сохранения массы, импульса и энергии, записанные в декартовой системе координат для стационарной постановки задачи. Для моделирования турбулентности применялась k-ю модель с «универсальными» пристеночными функциями [2, 3]. Все свойства натрия, циркулирующего в АПЕЦ, принимались зависящими от температуры, за исключением теплоемкости. Также переменными принимались свойства материалов ампулы и разделителя.

По результатам предварительных расчетов было установлено, что в исходном варианте конструкции ампулы возникают значительные возвратные течения в канале между поверхностью твэлов и разделителем, которые не могут быть воспроизведены канальными кодами. Более того, уже во втором экспериментальном режиме (таблица 1) начинается кипение натрия. По результатам анализа предварительных расчетов предложены модификации экспериментальной ячейки, которые помогли значительно увеличить расход натрия при уменьшении максимальной температуры оболочки твэла (таблица 1). При этом удалось полностью избавиться от возвратного течения в подъемном участке лишь в режиме с мощностью 32 МВт.

Таблица 1 – Сравнение расходов естественной циркуляции и максимальной температуры оболочек для трех режимов работы реактора

Мощность реактора, МВт	G <sub>et</sub>	ц, кг/с	Т <sub>тах</sub> оболочки твэла, °С		
	Исходная ампула	Модифицированная ампула	Исходная ампула	Модифицированная ампула	
15	0,0050	0,0256	699	642	
32	0,0098	0,0375	1140	857	
35	0,0108	0,0395	1250	896	

Примечание. Под G<sub>ец</sub> подразумевается массовый расход натрия в кольцевом канале между разделителем и стенкой ампулы.

Предложенные модификации заметно улучшили режим течения в АПЕЦ, но не полностью решили проблему использования результатов экспериментов для валидации канальных расчётных кодов. Планируется наряду с предложенной модификацией конструкции ячейки рассмотреть и альтернативные варианты, в том числе с одним твэлом.

- 1. CFD-code ANES. [Электрон. pecypc.] http://anes. ch12655.tmweb.ru
- 2. Wilcox D.C. Turbulence Modeling for CFD, second ed., DCW Industries, Inc., La Canada, CA, USA, 1998.
- 3. F. Menter, J. C. Ferreira, T. Esch, and B. Konno. "The SST Turbulence Model with Improved Wall Treatment for Heat Transfer Predictions in Gas Turbines". Proceedings of the International Gas Turbine Congress, Tokyo, November 2-7, 2003.

# Анализ применения кода «РОМ 2.1» в связке с диагностической и прогностической моделями динамики атмосферы на данных трассерных экспериментов

Коняев П.А., Киселев А.А., Игнатов Р.Ю., Бутаков Н.Ю., ИБРАЭ РАН

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

эл. почта: konyaev@ibrae.ac.ru

На результаты прогнозирования переноса радиоактивных веществ с помощью транспортных моделей напрямую влияют объем и качество используемых данных о метеорологической обстановке. В коде «РОМ 2.1» (наследника кода «НОСТРАДАМУС» [1]) используются два подхода, основанные на двух моделях – диагностической и прогностической. Первым и наиболее широко используемым, является подход к построению профиля метеорологических параметров и коэффициентов турбулентности на основе данных наблюдений в окрестности площадки расположения объекта. Второй подход является применением прогностической метеорологической модели, в основе которой также лежат данные наблюдений со всего мира, объединенные и обработанные с использованием глобальных метеорологических моделей, построение метеополей в этом случае осуществляется путем моделирования. Сегодня в коде РОМ 2.1 используется диагностическая модель собственной разработки и полномасштабная метеорологическая модель WRF-ARW, адаптированная для работы в составе кода. В данной работе рассматривается задача сравнительного анализа применения кода «РОМ 2.1» в части результатов атмосферного переноса, выполненного с использованием к диагностической и прогностической моделей.

Особенностью диагностической модели является интерполяционный переход от локальных данных измерений к региональному с учетом карт категорий поверхности и топографических данных. В модели рассчитываются вертикальные профили важных для моделирования атмосферного переноса метеорологических переменных, включая скорость ветра, температуру, давление и коэффициенты диффузии, используя систему классификации Пасквилла-Гиффорда. В отличие от диагностической модели, прогностическая модель изначально работает с глобальными данными и за счет решения системы уравнений, описывающих динамику атмосферы с краевыми условиями из интерполированных на регулярную сетку данных метеорологического мониторинга. В модели реализована возможность расчета на вложенных сетках метеорологического прогноза, обеспечивая возможность поэтапного увеличения пространственного разрешения. В отличие от диагностической, в модели WRF-ARW учитываются комплекс процессов в пограничном слое атмосферы, есть выбор из большого числа параметризаций физических процессов, подбор которых позволяет сформировать оптимальную конфигурацию модели для конкретного региона и условий. Тем не менее прогностическая модель отталкивается от данных глобального прогноза или анализа метеорологических условий, а диагностическая модель наоборот – от данных локальных измерений, что определяет ограничения в условиях их оптимального применения. Этот вопрос рассмотрим более подробно.

Результаты моделирования рассмотрены с привлечением экспериментальных данных экспериментов по рассеянию трассеров Kernforschungszentrum Karlsruhe (KFK)[3], CAPTEX[4] и Kincaid[5]. Далее в точках экспериментальных измерений проводилось сравнение полученных значений с наблюдаемыми. Оценка проходила с использованием метрик, использующихся для валидации кодов( $\bar{E}$ ,  $u_{val}^{tot}$ )[6], так и стандартных метрик, принятых в оценке моделей атмосферного переноса (FB, NMSE, Pearson, FA)[7]. Итогом на основе представленных на основе руководств [6-7] полученные значения можно трактовать как:

- NMSE <1,5 и 3,2 эквивалентно среднему смещению в два и пять раз соответственно;
- FAC2 <0,5 и FAC5 <0,5 эквивалентно среднему смещению в два и пять раз соответственно;
- FB <0,67 и 1,3 эквивалентно среднему смещению в два и пять раз соответственно;
- Коэффициент корреляции Pearson от 0, 5 до 0,7 средняя; от 0,7 до 0, 9 высокая;
- $\overline{E}$  эквиваленно среднее относительное отклонение в процентах;
- *u*<sup>tot</sup> эквиваленно полной неопределенность валидации.

Результаты приведены в таблице 1. Видно, что диагностическая метеорологическая модель кода РОМ 2.1 даёт лучшие результаты на площадке KFK, это объясняется тем входными данными модели являются метеорология с 10 минутными интервалами со станции вблизи источника выброса, а также присутствием

четырех метеорологических метеостанций международного обмена в расчётной области эксперимента. В экспериментах КFK наблюдается небольшая переоценка результатов в метриках Е и U, что связано с оценкой полной интегральных концентраций в точках измерений от времени начала источника, до вылета трассера из расчетной области, что не всегда совпадало с периодом экспозиции пробоотборников. Тем не менее полученные результаты находятся в пределах ожидаемых для моделей атмосферного переноса диапазонах значений, полученных, в том числе, в процессе верификации первой версии кода. В эксперименте CAPTEX лучшие результаты демонстрирует модель переноса в связке с моделью WRF, это объясняется тем, что плотность метеорологических станций существенно ниже чем на площадке KFK. Так в эксперименте САРТЕХ на расчетную область размером 1700 на 1000 км приходится в 38 метеорологических станций, когда в эксперименте KFK на расчетную область 95 на 80 км - 4 метеорологические станции, включая дополнительную метеостанцию, размещенную для эксперимента. На площадке Kincaid присутствует только один источник метеорологических данных в расчетной области, что влияет на результаты с как с использованием диагностической модели, так и с использованием прогностической. Последняя также использует данные метеорологических наблюдений, которые в радиусе 100 км отсутствовали на даты проведения эксперимента. Т.о. результаты моделирования оказываются статистически хуже, чем соответствующие, полученные для KfK и САРТЕХ. Тем не менее, несмотря на ухудшение статистических показателей, результаты по-прежнему лежат в рамках удовлетворительных значений.

Таблица 1 – Средние метрики по всем проведенным экспериментам каждой площадке с использованием упрошенной и прогностической метеорологической модели.

Эксперимент	Метеопроцессов	Ошибка интегральных концентрации (TIC)						
		E	U	FB	NMSE	Р	FA2	FA5
KFK	Диагностическая	142	289	0,18	1,49	0,64	0,47	0,80
	Прогностическая	262	537	0,43	2,98	0,41	0,27	0,64
САРТЕХ	Диагностическая	61	361	-0,20	2,47	0,64	0,10	0,36
	Прогностическая	57	160	0,31	1,29	0,86	0,36	0,70
Kincaid	Диагностическая	14	126	-0,5	3,12	0,30	0,30	0,63
	Прогностическая	11	124	-0,5	3,04	0,31	0,30	0,63

Из полученных результатов можно сделать вывод что использование кода «POM 2.1» с диагностической моделью дает меньшие отклонения концентраций по общим характеристики следа относительно соответствующих, полученных с использованием прогностической модели WRF, при наличии достаточного количества метеорологических данных в расчётной области. Так же проведенные модельные расчеты, показывают корректное воспроизведение концентраций как с использованием диагностической, так и прогностической метеорологической моделей с погрешностью расчета для диагностической модели 72%±258%, и прогностической 110%±273%. Эти результаты согласуются с результатами из верификационного отчета кода РОМ предыдущей версии, в части отклонения они оказываются ниже, что позволяет сделать вывод об улучшении возможностей кода, связанных с обновлением метеорологических моделей.

- 1. Нострадамус. Компьютерная система прогнозирования и анализа радиационной обстановки на ранней стадии аварии на АЭС. Инструкция пользователя. ИБРАЭ РАН, инв. №3429. –М., 2001.
- 2. Skamarock, C., Klemp, B., Dudhia, J., Gill, O., Liu, Z., Berner, J., ... & Huang, X. (2019). A description of the advanced research wrf model version 4.
- 3. Thomas P., Vogt S., Gaglione P. Mesoscale Atmospheric Experiment Using Tracer and Tetroons Simultaneously at Kernforschungszentrum. Karlsruhe, 1987. 112 p. (KfK 4147 EUR 10907 EN).
- Ferber,G.J., J.L.Heffter, R.R.Draxler, R.J.Lagomarsino, F.L.Thomas, R.N.Dietz, and C.M.Benkovitz, 1986: Cross-Appalachian Tracer Experiment (CAPTEX '83) Final Report. NOAA Technical Memorandum ERL ARL-142, 86, 60 pp.
- 5. Olesen, H. R. (2005): User's Guide to the Model Validation Kit. National Environmental Research Institute. Research Notes from NERI 226.
- 6. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии «Рекомендации по оценке погрешностей и неопределенностей результатов расчетных анализов безопасности атомных станций» (РБ-166-20)
- 7. Chang, Joseph C. and Steven Hanna. "Technical Descriptions and User's Guide for the BOOT Statistical Model Evaluation Software Package, Version 2.0." (2005).

## Интегральная модель захоронения долгоживущих РАО методом самопогружения

Корчагина О.О. м.н.с. ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: д.ф.-м.н., директор ИБРАЭ РАН Матвеев Л.В.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-91, эл. почта: ok@ibrae.ac.ru

Представлена интегральная аналитическая модель захоронения РАО методом самопогружения. Метод основан на возможности расплавления геологической среды, окружающей капсулу с тепловыделяющими РАО, и последующего опускания капсулы в образующемся расплаве под действием силы тяжести. Главное достоинство метода самопогружения – это возможность удалить РАО на большую глубину (порядка 30км, в идеале – на всю толщину земной коры); при любом другом способе подземного захоронения достижение такой глубины технически реализовать невозможно [1-5].

Последовательность процессов, определяющих захоронение РАО данным методом, включает три этапа. На первом этапе происходит разогрев окружающей среды до температуры ее плавления и начальная стадия плавления, позволяющая сфокусировать тепловой поток и направить его вниз. Для критической мощности тепловыделения, при которой температура плавления среды на поверхности капсулы достигается за бесконечное время, имеем  $W_{cr} = \frac{3\kappa_2(T_m - T_\infty)}{R^2}$ , где R – радиус капслы,  $\kappa_2$  – коэффициент теплопроводности среды. При мощности тепловыделени  $W_0 = 1.1 \cdot W_{cr}$ , температура плавления на поверхности капсулы установится за конечное время  $t' = \frac{t_2}{\pi} \left(\frac{W_0}{W_0 - W_m}\right)^2$ .

На втором этапе в результате фокусировки теплового потока происходит квазистационарное (постепенно замедляющееся вследствие уменьшения тепловыделения РАО) плавление геологической среды под капсулой и опускание самой капсулы с РАО в среде со скоростью движения фронта плавления  $\dot{R}$ . Оценка показывает, что такое смещение капсулы ко дну каверны расплава приводит к тому, что тепловой поток (который в отсутствие конвекции обратно пропорционален толщине расплава) будет направлен в основном вниз и пойдет на плавление среды под капсулой. В итоге задачу можно считать *квазиодномерной*. В одномерном случае при постоянной скорости фронта плавления в среде перед

фронтом устанавливается следующее распределение температуры:  $T_2 = (T_m - T_\infty) \exp\left(-\frac{u}{\alpha_2}x'\right) + T_\infty$  где x'

есть координата, отсчитываемая от движущегося фронта,  $\alpha_2$  – коэффициент температуропроводности среды. Далее, полагая, что все выделяемое в капсуле тепло идет на нагрев и проплавление матрицы под капсулой, получаем следующее приближенное выражение для скорости погружения  $u \approx \frac{4WR}{3\tilde{L}}$ , где  $\tilde{L} = L + c_p (T_m - T_\infty)$ . Из формулы для распределения температуры перед фронтом следует, что при движении фронта плавления в рассматриваемом случае нагрев от начальной температуры  $T_\infty$  до температуры плавления  $T_m$  происходит в слое толщиной  $z_t \approx \frac{\alpha_2}{u}$ . Откуда следует условие применимости квазиодномерного приближения:  $z_t \ll R$ . Второй этап и определяет в основном глубину погружения.

На третьем этапе, по мере замедления проплавления среды (вследствие уменьшения энерговыделения), все большая часть теплового потока начинает рассеиваться в боковом направлении, что приводит к еще большему замедлению движения капсулы вниз.

Проведены расчеты для оценки глубины погружения тепловыделяющей капсулы при условии, что тепловыделение РАО в капсуле зависит от времени как  $W = W_0 e^{-t/\tau}$ , где  $\tau = t^*/\ln 2$ ,  $t^*$  - период полураспада основного тепловыделяющего радионуклида, в рамках представленной задачи  $t^* \approx 30$  лет. Интервал времени, когда справедлива квазиодномерная модель, оценивался из условия  $z_t \leq R$ , что дало

для верхнего предела интервала значение  $t_s = -\tau \cdot \ln\left(\frac{3}{4}\frac{\alpha_2 \cdot \tilde{L}}{R^2 \cdot W_0}\right)$ . Соответственно, гарантированную

глубину погружения можно определить как  $l = \int_{0}^{t_s} u dt \approx \frac{4}{3} \frac{R}{\tilde{L}} W_0 \int_{0}^{t_s} e^{-t/\tau} dt$ .

В рамках развитой модели в табл. 1. приведены оценки для основных параметров задачи в случае самопогружения капсулы в галит и гранит.

Порода	$W_0, Bm / cm^3$	ť	и,см/с	t <sub>s</sub> , лет	l, км
Галит	1,9	1 сутки, 7 часов	10 <sup>-2</sup>	42	84
Гранит	1,3	3 суток	$0.5 \cdot 10^{-2}$	49	50

Таблица 1 – Сравнение оценок для галита и гранита

Проведенные оценки показали, что в начальный момент достаточно небольшого превышения мощности тепловыделения над критической величиной (определяемой необходимостью нагрева окружающей среды до температуры плавления), чтобы погружение капсулы осуществилось на большую глубину (порядка толщины земной коры) при условии неизменности параметров среды.

- 1. Steven H. Emerman and D.L. Turcotte, Stokes's problem with melting. Heat Mass Transfer. V. 26. № 11. P. 1625-1630, 1983.
- 2. Л.Я. Косачевский, Л.С. Сюи, К вопросу о «самозахоронении» радиоактивных отходов. Журнал Технической Физики. Т. 69. № 11. С. 123-127, 1999.
- Р.В. Арутюнян, Л.А. Большов, П.С. Кондратенко и др. Способ захоронения радиоактивных отходов и тепловыделяющая капсула для его осуществления / Пат. RU 2510540 C1. Российская Федерация, МПК G21F 9/28 (2006.01); патентообладатель ИБРАЭ РАН. - № 2012134053/07; заявл. 09.08.12; опубл. 27.03.14, Бюл. № 9, 2006.
- 4. Кащеев В.А., Никифоров А.С., Полуэктов П.П., Поляков А.С., К теории самозахоронения высокоактивных отходов. Атомная Энергия, 1992. Т. 73. Вып. 3. С. 215.
- 5. Никифоров А.С., Поляков А.С., Полуэктов П.П., Способ захоронения радиоактивных отходов / Патент SU 826875 A1, G21F 9/24 (1980).

### Асимптотическая теория переноса примеси на больших временах в модели двупористой резко контрастной среды с крупномасштабными неоднородностями

Леонов К.В.

Научный руководитель: д.ф.-м.н. зав. лаб. ИБРАЭ РАН Кондратенко П.С.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

эл. почта: konstantin.leonov@phystech.edu

При аналитическом описании неклассических процессов переноса среда на больших пространственных масштабах часто предполагается в среднем однородной [1-3]. Между тем, реальные среды обладают крупномасштабными неоднородностями. В такой ситуации даже классические процессы адвекции–диффузии требуют выполнения довольно трудоёмких численных расчетов. Дополнительные, причем принципиальные, трудности возникают в случае неклассических процессов, для которых управляющие уравнения для концентрации являются интегро-дифференциальными, а входящие туда интегральные ядра в деталях остаются неизвестными.



Рисунок 1 – Геометрия задачи. *S* - источник примеси, *a* - средняя ширина канала, *b* - средний размер блока

В настоящей работе представлена важная для практических приложений асимптотическая теория переноса примеси в модели статистически однородной резко контрастной среды, впервые разработанной Л.В. Матвеевым [4, 5], и получившей развитие для случая среды, обладающей крупномасштабными неоднородностями, на больших временах, когда адвекция доминирует над диффузией.

Среда в модели представлена в виде набора проницаемых каналов, проникающих во всю среду и слабопроницаемых изолированных пористых блоков. Как каналы, так и блоки насыщены влагой. Средняя ширина канала намного меньше среднего размера блока,  $a \ll b$ . Механизм переноса примеси представляет собой адвекцию и диффузию в каналах, и диффузию внутри пористых блоков.

Уравнение переноса концентрации примеси в каналах, усредненное по объему порядка размера блока, имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ c(\mathbf{r},t) + \int_{0}^{t} dt' \, \varphi(\mathbf{r},t-t') c(\mathbf{r},t') \right] + div \left[ \mathbf{u}c(\mathbf{r},t) - D\nabla c(\mathbf{r},t) \right] = 0,$$

$$c(\mathbf{r},0) = N\delta(\mathbf{r}).$$
(1)

Здесь **u** - средняя скорость адвекции, D - коэффициент, учитывающий вклад молекулярной диффузии. Второй член в квадратных скобках слева в уравнении (1) отвечает за обмен примесью между каналами и блоками. Отметим, что в среде с крупномасштабными неоднородностями скорость адвекции, коэффициент диффузии и времена, характеризующие слабопроницаемую компоненту среды ( $t_a \sim a^2/4d$  и  $t_b \sim b^2/4d$ ), являются переменными по пространству параметрами.

Нас будет интересовать концентрация на асимптотически далеких расстояниях  $r \gg r'(t)$ , где r'(t) характерное расстояние от источника примеси до центра основной области ее локализации в момент времени t. Решение уравнения переноса (1) находится в представлении Лапласа, в котором известны выражения для функции  $\varphi(\mathbf{r},t)$  на предельных интервалах [4, 5]. В работе используется подход [6], базирующийся на асимптотическом описании процессов переноса, который учитывает возможность крупномасштабной зависимости структурных характеристик среды от пространственных координат. Суть подхода базируется на двух моментах. Во-первых, формирование концентрации на далеких расстояниях обусловлено коротковолновой частью механизма переноса. А во-вторых, асимптотики концентрации на далеких расстояниях носят экспоненциальный характер. Формально, таким образом, ситуация напоминает ту, которая имеет место в волновой оптике или квантовой механике, когда становится применимым приближение геометрической оптики или квазиклассическое приближение, соответственно.

Результат для концентрации в координатно-временном представлении сводится к одномерным интегралам вдоль линии траектории концентрационного сигнала, которая определяется из аналога вариационного принципа Ферма в геометрической оптике и выражается через дифференциальное уравнение первого порядка для единичного вектора касательной к траектории. Заметим, что на рассматриваемых временах, когда основной вклад в перенос примеси дает адвекция, траектория концентрационного сигнала должна быть близкой к линии тока. Последняя, по определению, является линией, в каждой точке которой касательная совпадает по направлению со скоростью адвекции.

Выделены три пространственно-временных интервала, в которых асимптотическое поведение концентрации соответствует режимам быстрой адвекции-диффузии, квазидиффузии и медленной адвекции-диффузии, соответственно:

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N \exp\left[-\Gamma^{\perp}(\mathbf{r}^{\parallel}) - H(\mathbf{r}^{\parallel})\right]}{\left(4\pi\right)^{\frac{3}{2}} u(0) \left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{D}{u}\right) \sqrt{\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{D}{u^{3}}} \exp\left[-\left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} \frac{dl}{u} - t\right)^{2} / 4\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{D}{u^{3}}\right] npu \quad t \ll t_{a},$$
(2)

$$c\left(\mathbf{r},t\right) = \frac{N \exp\left[-\Gamma^{\perp}\left(\mathbf{r}^{\parallel}\right) - H\left(\mathbf{r}^{\parallel}\right)\right]}{\left(4\pi t\right)^{\frac{3}{2}} u\left(0\right) \left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{D}{u}\right) \left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} \frac{dl}{\sqrt{D_{u}}}\right)^{-\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} \frac{dl}{\sqrt{D_{u}}}\right)^{2}\right] npu \ t_{a} \ll t \ll t_{b}, \tag{3}$$

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N \exp\left[-\Gamma^{\perp}(\mathbf{r}^{\parallel}) - H(\mathbf{r}^{\parallel})\right]}{\left(4\pi\right)^{\frac{3}{2}} u(0) \left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{D}{u}\right) \sqrt{\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{\tilde{D}}{\tilde{u}^{3}}} \exp\left[-\left(\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} \frac{dl}{\tilde{u}} - t\right)^{2} / 4\int_{0}^{\mathbf{r}^{\parallel}} dl \frac{\tilde{D}}{\tilde{u}^{3}}\right] npu \ t >> t_{b}, \tag{4}$$

где  $\Gamma^{\perp}(\mathbf{r}^{\parallel})$  - функция, которая находится из решения уравнения - аналога уравнения эйконала в геометрической оптике;  $H(\mathbf{r}^{\parallel})$  - интеграл, вытекающий из выражения для предэкспоненты; dl дифференциальный элемент длины вдоль траектории концентрационного сигнала. В формулах (3) и (4) использованы следующие обозначения:  $D_{\mu} = u^2 t_a$ ,  $\tilde{u} = \sqrt{t_a/t_b} D$ .

Полученные результаты могут быть использованы для проведения оценок надежности захоронений радиоактивных отходов в геологических средах. Ожидается, что разработанная здесь асимптотическая теория приведет к существенной экономии расчетного времени по сравнению с прямым численным решением уравнений в частных производных второго порядка, описывающих перенос примеси, с переменными по пространству параметрами.

- 1. ben-Avraham D., Havlin S. Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems. Cambridge University Press; 2000.
- Bouchaud J.-P., Georges A. Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications // Physics Reports. – 1990. – T. 195. – C. 127-293.
- 3. Большов Л. А., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Неклассический перенос в сильнонеоднородных и резко контрастных средах // УФН. 2019. Т. 189. №. 7. С. 691-702.
- 4. Матвеев Л.В. Перенос примеси в трещиновато-пористой среде с сорбцией // ЖЭТФ. 2012. Т. 142. №. 5. С. 943-950.
- Matveev L. V. Anomalous nonequilibrium transport simulations using a model of statistically homogeneous fractured-porous medium // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2014. – T. 406. – C. 119-130.
- 6. Кондратенко П. С. Асимптотический подход к описанию неклассических процессов переноса. Принцип Ферма // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. №. 9. С. 581–584.

# Атомистический расчёт температуры декомпозиции нитрида урана

Лобашев Е.А.

Научный руководитель: д.ф.-м.н. зав. отделом ОИВТ РАН Стегайлов В.В.

Объединённый институт высоких температур РАН Московский физико-технический институт (НИУ)

тел.: (495) 485-85-45, эл. почта: lobashev.ea@phystech.edu

Нитрид урана – основа СНУП-топлива для реакторов на быстрых нейтронах. Активно разрабатываются топливные коды, описывающие поведение данного топлива в условиях эксплуатации [1]. Для обеспечения точности подобных кодов требуется моделирование материала на микроскопическом уровне, в том числе методом молекулярной динамики.

На данный момент существуют две модели межатомного взаимодействия в нитриде урана [2, 3], а также потенциал SNAP, разработанный в нашей лаборатории, но ещё не опубликованный. Для оценки качества этих потенциалов необходимо сравнить предсказания, получаемые с их помощью, с экспериментальными данными. Трудность заключается в том, что на данный момент экспериментальных данных для нитрида урана и СНУП-топлива крайне мало.

Одна из немногих величин, которые измерены для нитрида урана достаточно надёжно – это температура декомпозиции при различных давлениях газообразного азота над поверхностью образца. В обзоре [4] собраны результаты семи экспериментов, описывающих эту зависимость в различных диапазонах давлений, и согласующихся друг с другом (рисунок 1).



Рисунок 1 – Зависимость температуры декомпозиции от давления азота. График из [4] с добавлением результатов наших расчётов.

В отличие от декомпозиции, температура плавления часто рассматривается в рамках молекулярной динамики – обычно она рассчитывается с помощью двухфазного моделирования. Декомпозицией называется следующий процесс:

$$UN(\mathbf{T}) \rightarrow U(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}N_2(\mathbf{\Gamma})$$

Для неё нет общепринятого метода расчёта, тем более такого, который позволял бы построить зависимость её температуры от давления газообразного азота над поверхностью образца. Сложность разработки такого метода состоит в том, что межатомные потенциалы для твёрдой фазы нитрида не рассчитаны на моделирование как жидкого урана, так и газообразного азота.

Мы предлагаем метод расчёта температуры декомпозиции при заданном давлении газообразного азота. Он заключается в неравновесном моделировании кристалла с открытой поверхностью, в котором происходит фазовый переход (рисунок 2). Скорость движения поверхности раздела фаз зависит от температуры. Экстраполируя температуру к нулевой скорости движения поверхности, можно получить температуру декомпозиции.



Рисунок 2 – Моделируемая система в различные моменты времени.

Влияние давления азота учесть несколько сложнее. Наша идея состоит в том, что, приравняв химические потенциалы азота в газообразной фазе и в решётке, можно рассчитать равновесные концентрации точечных дефектов [5]. Проводя расчёты для разных концентраций точечных дефектов, можно получить различные температуры декомпозиции, и таким образом построить зависимость температуры декомпозиции от давления азота.

Наши расчёты температуры декомпозиции предложенным методом в случае потенциала ADP [2], показанные на рисунке 1, дали удовлетворительное схождение с экспериментальными данными [4].

- 1. Долгодворов А. П. Моделирование поведения продуктов деления в нитридном топливе: дис. Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2017.
- Tseplyaev V. I., Starikov S. V. The atomistic simulation of pressure-induced phase transition in uranium mononitride // J. Nuc. Mat. 2016. V. 480. P. 7-14.
- 3. Kocevski V. et al. Development and application of a uranium mononitride (UN) potential: Thermomechanical properties and Xe diffusion // J. Nuc. Mat. 2022. V. 562: 153553.
- 4. Hayes S. L., Thomas J. K., Peddicord K. L. Material property correlations for uranium mononitride: IV. Thermodynamic properties // J. Nuc. Mat. 1990. V. 171(2-3). P. 300-318.
- 5. Starikov S. et al. Multiscale modeling of uranium mononitride: point defects diffusion, self-diffusion, phase composition // Defect and Diffusion Forum 2017. V. 375. P. 101-113.

# Асимптотический подход к описанию адвекции-диффузии в анизотропных средах с крупномасштабными неоднородностями

Матвеев А.Л., м.н.с. ИБРАЭ РАН

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (915) 145-04-65, эл. Почта alex27\_matveev@mail.ru

Одной из основных проблем безопасного развития атомной энергетики является надёжная долговременная изоляция РАО. В настоящее время считается, что оптимальным решением этой проблемы является создание глубинных подземных захоронений, основанных на принципах мультибарьерной защиты. При этом возникает потребность в разработке методов надежного и эффективного описания переноса радионуклидов в сильно неоднородных геологических средах. Одним из таких методов, предложенных в [1], является асимптотический подход, основанный на общем виде зависимости концентрации на больших расстояниях от источника примеси. Именно, что выражение для концентрации представимо в виде произведения быстро убывающей экспоненты и относительно медленно меняющегося предэкспоненциального множителя. В этом методе показано [1], что входящие в выражение величины определяются интегралами вдоль траектории концентрационного сигнала, а уравнение для самой траектории имеет вид обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка. Такое описание в случае сред с крупномасштабными неоднородностями (когда усреднение параметров переноса представляет трудности) имеет значительное преимущество перед традиционным способом нахождения распределения концентрации путем решения дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка. Ранее были рассмотрены задачи адвекции-диффузии в изотропных средах [2] и диффузии в анизотропной среде [3]. Целью данной работы является рассмотрения задачи адвекции-диффузии в анизотропной среде.

Перенос примеси в такой среде описывается следующим уравнением

$$\partial_{t}c(\mathbf{r},t) + \partial_{i}\left(v^{i}c(\mathbf{r},t)\right) - \partial_{i}\left(D^{ij}\partial_{j}c(\mathbf{r},t)\right) = 0, \tag{1}$$

где  $c(\mathbf{r},t)$  есть концентрация примеси,  $\mathbf{r} = x^k$  - компоненты радиус-вектора, k = 1, 2, 3,  $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$ ,

 $D^{ij} \equiv D^{ij}(\boldsymbol{r})$  - симметричный тензор дисперсии,  $v^{i} = v^{i}(\boldsymbol{r})$  - поле скоростей адвекции.

Рассматривается задача с начальным условием, что в начальный момент времени вся примесь сосредоточена в начале координат.

Задача решается путем перехода в представление Лапласа и к криволинейным координатам с метрикой  $g_{jk} = \tilde{p}D_{jk}$ , где тензор  $D_{jk}$  есть тензор обратный к тензору дисперсии  $D^{ij}(\mathbf{r})$ .

Показано, что на асимптотически далёких расстояниях, когда  $\left|\partial_i \Gamma_p\right|^{-1} << \min(L, r')$ , где L-характерный размер неоднородности, распределение концентрации представимо в виде.

$$c_{p}(\boldsymbol{r}) = \frac{N}{4\pi\tilde{\Gamma}_{p}(\boldsymbol{r})}\sqrt{\frac{\tilde{p}(0)}{D_{0}}}\exp\left[-\Gamma_{p}(\boldsymbol{r})-H_{p}(\boldsymbol{r})\right].$$
(2)

Здесь интегралы

$$\Gamma_{p}(\boldsymbol{r}) = \int_{0}^{\bar{r}} ds \left( 1 - \frac{1}{2} u^{i} D_{ik} v^{k} \right), \ H(\boldsymbol{r}) = \int_{0}^{r} ds \left( \frac{1}{2} \partial_{i} u^{i} - \frac{1}{s} \right), \ \tilde{\Gamma}_{p}(\boldsymbol{r}) = \int_{0}^{r} ds$$
(3)

берутся вдоль траектории квазилуча, элемент длины которого в криволинейных координатах определяется как  $ds^2 = g_{jk} dx^j dx^k$ , а вектор  $u^i = \frac{D^{ik}}{\tilde{p}} \partial_k \Gamma_p$  есть вектор касательной к траектории квазилуча.

Также здесь использованы следующие обозначения:  $\tilde{p}(\mathbf{r}) = p + \frac{1}{4} D_{ik} v^{i} v^{k}, \quad D_{0} = det \left[ D^{jk}(0) \right],$ 

N - полное число частиц примеси.

Траектория квазилуча находится из вариационного принципа и имеет вид нелинейного дифференциального уравнения первого порядка:

$$g_{li}\frac{du^{i}}{ds} + \Gamma_{l,km}u^{k}u^{m} + \frac{1}{2}u^{m}\left[\frac{\partial\left(D_{mk}v^{k}\right)}{\partial x^{l}} - \frac{\partial\left(D_{lk}v^{k}\right)}{\partial x^{m}}\right] = 0, \qquad (4)$$

где  $\Gamma_{i,kl} = \frac{1}{2} \left( \partial_k g_{il} + \partial_l g_{ik} - \partial_i g_{kl} \right).$ 

Отметим, что данное уравнение является аналогом уравнения для геодезической кривой, но учитывает наличие скорости адвекции.

Для перехода в пространственно-временное представление нужно выполнить обратное преобразование Лапласа

$$c(\mathbf{r},t) = \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} c_p(\mathbf{r}) \exp[pt].$$
(5)

Воспользовавшись выражением для концентрации (2) и учитывая, что значение квазиэйконала много больше единицы, в преобразовании (5) можно применить метод стационарной фазы, где стационарная точка находится из условия

$$\left. \frac{\partial \Gamma_p(\boldsymbol{r})}{\partial p} \right|_{p=p_0} = t \,, \tag{6}$$

что позволяет получить окончательное выражение для концентрации в координатно-временном представлении.

- 1. П. С. Кондратенко Асимптотический подход к описанию неклассических процессов переноса. Принцип Ферма // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. №. 9. С. 581-584.
- 2. П.С. Кондратенко, А.В. Мухаряпова Асимптотическая теория классического переноса примеси в неоднородных средах. Принцип Ферма // ЖЭТФ. 2022. Т.162 №.5(11). С. 737-743.
- 3. П.С. Кондратенко, А.Л. Матвеев, Ю.Н. Обухов Асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в неоднородых средах // ЖЭТФ. 2021. Т.159 №.4. С. 719-723.

# Моделирование сорбции цезия на бентонитах различных месторождений

Меньшикова-Тонян И.Р.<sup>1</sup>, Семенкова А.С.<sup>1</sup>, Свительман В.С.<sup>2</sup>, Крупская В.В.<sup>3</sup>, Романчук А.Ю.<sup>1</sup>, Калмыков С.Н.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет <sup>2</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН <sup>3</sup>Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН

#### эл. почта: iton612@yandex.ru

Для прогнозирования долгосрочной безопасности хранилищ ВАО необходимо разработать математические модели, включающие описание процессов сорбции с учетом особенностей окружающей среды, в рамках моделирования геомиграции. Одним из ключевых материалов барьеров для данных целей являются бентонитовые глины, которые обладают низкой водопроницаемостью и высокой способностью к сорбции широкого спектра радионуклидов. Особое внимание среди радионуклидов заслуживают высокомобильные и биотоксичные изотопы цезия, являющиеся продуктами деления уранового топлива.

В данной работе для выявления зависимости сорбции цезия от индивидуальных характеристик бентонитовых глин исследовано его взаимодействие с 11 различными образцами. В работе использованы бентонитовые глины из различных регионов: малоизученных месторождений России (Дашковское, Зырянское, 10 Хутор), Азербайджана (Даш-Салахлинское), Казахстана (Таганское), Индии (Катч), а также широко изученных месторождений США, Испании, Японии, Австралии и Словакии (МХ-80, Кunipia-F, NAu-1 и ISCz-1, соответственно). Исследуемые образцы содержат в своем составе от 30 до 98% минерала смектита. Емкость катионного обмена и удельная поверхность являются индивидуальными характеристиками образцов, изменяющимися в диапазоне от 16 до 113 мк-экв/100 г и от 6,3 до 150 м<sup>2</sup>/г соответственно для исследуемых образцов.

Исследование изотерм сорбции в широком диапазоне концентраций Cs<sup>+</sup> выявило наличие двух плато на изотермах для большинства образцов, что указывает на существование различных типов сорбционных центров – высоко и низкоселективных. В литературе [1] существование высокоселективных центров связывают с наличием минерала иллита, с которым эффективно связывается цезий. В исследуемых образцах содержание иллита варьируется от 0 до 70%, однако не оказывает влияние на наличие нескольких сорбционных центров.

Зависимости сорбции цезия в широком диапазоне концентраций легли в основу термодинамического моделирования, проведенного при помощи компьютерных кодов PHREEQC [2] и MOUSE [3]. Моделирование проводилось как при помощи существующих в литературе подходов, так и путем оптимизации констант реакции. Сравнение шести литературных подходов, в которых количество типов сорбционных центров варьируется от 1 до 3 показало, что наилучшая корреляция с экспериментальными данными достигается при использовании моделей с двумя типами центров [1,4]. Однако эти модели не смогли достоверно описать зависимости для всех 11 глин, а концентрации сорбированных центров, полученные в результате моделирования, не коррелировали с их индивидуальными характеристиками – минеральным составом, емкостью катионного обмена и удельной площадью поверхности.

Для повышения точности моделирования были предложены подходы, основанные на оптимизации констант реакций и концентраций сорбированных участков (рисунок 1). Отклонения модели от экспериментальных данных были зафиксированы при помощи таких статистических показателей, как коэффициент детерминации (R<sup>2</sup>) и среднеквадратичное отклонение (RMS).

Первый подход предлагает оптимизацию параметров для каждой конкретной сорбционной зависимости и получение констант и концентраций сорбционных центров для каждой изотермы. В результате раздельной оптимизации константы для высокоселективных и низкоселективных центров составляют соответственно 6,48 и 1,35. Во втором подходе оптимизация проводилась для всех 11 образцов одновременно. Значения констант составляют 6,00 и 1,61. Константы, полученные в двух подходах, сопоставимы с литературными значениями. Однако, концентрации центров, полученные при моделировании, не коррелируют с индивидуальными характеристиками глины, такими как минеральный состав, емкость катионного обмена и удельная площадь поверхности.



Рисунок 1 – Сравнение подходов к моделированию сорбции цезия на примере образца Катч

Работа выполнена в рамках договора № 25-13-00221.

- 1. Missana T. et al. Modeling cesium retention onto Na-, K- and Ca-smectite: Effects of ionic strength, exchange and competing cations on the determination of selectivity coefficients // Geochim. Cosmochim. Acta. 2014. Vol. 128. P. 266–277.
- David L. Parkhurst, Appelo C.A.J. Description of Input and Examples for PHREEQC // U.S. Geological Survey Techniques and Methods, book 6, chap. A43. 2013. 497 p.
- 3. Савельева Е.А. et al. Анализ чувствительности и калибровка в гео-химических и гидрогеологических задачах. Москва: ИБРАЭ РАН, 2021. 56 с.
- 4. Chikkamath S. et al. Sorption and surface complexation modeling of 137Cs on Fe(II)-montmorillonite clay mineral relevant to nuclear waste disposal // Radiochim. Acta. 2021. Vol. 109, № 2. P. 73–83.

### Расчёт термодинамических свойств системы Zr-O для повышения реалистичности моделирования процесса деградации оболочек твэлов

Муратов Е.Т.<sup>1,2</sup>, Долганов К.С.<sup>2</sup>, Мелихов О.И.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский энергетический институт <sup>2</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (902) 869-12-85, эл. почта: etmuratov@ibrae.ac.ru

Детерминистические расчёты тяжёлых аварий на реакторных установках являются важной частью обоснования безопасности АЭС. Для отечественных атомных станций с реакторами типа ВВЭР основным инструментом расчётного анализа тяжёлых аварий является код СОКРАТ [1]. На данный момент в СОКРАТ при моделировании процессов деградации элементов активной зоны отсутствует динамический учёт зависимости термодинамических свойств материалов от их состава и температуры, изменяющихся в ходе тяжёлой аварии. Среди всех материалов активной зоны особый интерес представляет циркониевый сплав Э110, из которого изготовлены оболочки тепловыделяющих элементов (твэлов), направляющих и инструментальных каналов, а также дистанционирующие решётки ТВС. В аварийных режимах циркониевые оболочки могут разогреваться до температур более 1250 К, когда интенсифицируется экзотермическая реакция окисления паром (пароциркониевая реакция). При пароциркониевой реакции, с одной стороны, изменяется материальный состав оболочек, а с другой стороны, под действием тепла экзотермической реакции происходит их разогрев. Динамический учёт влияния этих изменений на тепловые свойства образующихся материальных слоёв позволяет повысить реалистичность расчётных оценок процесса деградации оболочек и поэтому является важной задачей численного моделирования.

Решение этой задачи может быть получено посредством термодинамического расчёта системы Zr-O. Такой расчёт позволяет получить зависимости фазового состава, энтальпии и теплоёмкости от температуры и химического состава материала. Также возможно получить зависимость температур ликвидус и солидус, энтальпии плавления от химического состава материала. В качестве метода проведения термодинамических расчётов в данной работе рассматривается метод CALPHAD (CALculation PHase Diagrams) [2]. Для проведения термодинамического расчёта системы Zr-O по методу CALPHAD была разработана программа на языке python. В данной программе использовались термодинамического системе Zr-O представленные в работе [3], в качестве термодинамического решателя использовался модуль pycalphad [4].

В результате проведения термодинамического расчёта по разработанной программе были получены зависимости термодинамических свойств системы Zr-O от химического состава материала и температуры в табличной форме. Полученные данные покрывают широкий диапазон составов и температур, и могут быть использованы в интегральном расчётном коде COKPAT для динамического расчёта термодинамических свойств оболочек твэлов посредством интерполяции табличных данных для каждого материального слоя, образующегося в оболочке при окислении паром.

- Bolshov L.A., Dolganov K.S., Kiselev A.E., Strizhov V.F. Results of SOCRAT code development, validation and applications for NPP safety assessment under severe accidents // Nuclear Engineering and Design, 2019, vol. 341, pp. 326-345.
- 2. Lukas H. L., Fries S. G., Sundman B. Computational Thermodynamics. The Calphad Method. [Cambridge University Press], 2007.
- 3. Jiang Y., He Y., Zheng W., Zhang J, Zhang D., Lu X. Thermodynamic analysis for molten corium stratification with U-Zr-O-Fe database // J. Nucl. Mater, 2023, vol. 574, pp. 154180.
- 4. Otis R., Liu Z.-K. pycalphad: CALPHAD-based Computational Thermodynamics in Python // Journal of Open Research Software, 2017, vol. 5, no. 1, pp. 1.

# Разработка обменных модулей для интеграции нейтронно-физических кодов в 3D код для связанного мультифизического моделирования

Никулин Д.Ю., техник, Шурыгин Р.Е., инженер, ИБРАЭ РАН Научный руководитель: к.т.н., и.о. зав. отделом ИБРАЭ РАН Колташев Д.А. Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: 8(929) 016-34-08, эл. почта: nikulin@ibrae.ac.ru

Использование в расчетах трехмерных кодов позволяет учесть возникновение различных неоднородностей, вызванных, например, конструкционными особенностями установки. Связанное мультифизичное моделирование позволяет в свою очередь учесть в расчетах влияние обратных связей. Для выполнения связанного моделирования в автоматическом режиме необходимы обменные модули, реализующие обмен данными между кодами с учетом расчетного шага, особенностей расчетных сеток и др. В случае использования средств трехмерного моделирования процесс согласования расчетных моделей становится еще более сложным, ввиду большого объема передаваемых данных и сложной формы расчетных сеток.

Целью данной работы являлась разработка обменных модулей для CFD кода CONV-3D и нейтроннофизических расчетных кодов MCU-FR и CORNER. Разработанные модули должны обрабатывать значительные объёмы данных за сравнительно небольшой промежуток времени, а также быть универсальными относительно моделируемых объектов. Кроме того, важной является задача исследования влияния параметров согласованной расчетной модели на результаты расчетов. В данной связи проведен анализ сходимости результатов расчета по высоте зон регистрации, использующихся для задания распределений температуры и плотности в коде MCU-FR, и непосредственно регистрации рассчитываемых функционалов.

Расчет с использованием трёхмерного кода разделён на два шага: на первом шаге нейтроннофизический код (MCU-FR или CORNER) рассчитывает распределение энерговыделения в расчетной модели, которое затем передаётся в код CONV-3D для расчета поля температур. Полученные в коде CONV-3D результаты возвращаются в нейтронно-физический код для выполнения второго шага по расчету энерговыделения с учетом полученного температурного распределения.

Файл с результатами расчёта кода CONV-3D содержит информацию о распределении поля температур, представленного в виде значений температуры в каждой точке расчётной модели. Координаты точек также содержатся в файле с результатами расчёта. Полученные файлы в бинарном представлении имеют размер ~0,5 Гб для модели экспериментальной сборки быстрого исследовательского реактора с натриевым теплоносителем и более 6 Гб для экспериментальной сборки быстрого быстрого реактора с натриевым теплоносителем. Такое количество информации превышает возможности обычных и динамических массивов хранить информацию.

Для того, чтобы обменные модули могли работать при любой расчётной модели, был разработан текстовый файл, состоящий из 6 столбцов. Первые три столбца (x, y, z) содержат координаты центров всех аксиальных слоёв всех твэлов, при этом задается сортировка расчетных ячеек, при которой координата z не убывает. Четвёртый и пятый столбцы содержат информацию о радиусах и высотах аксиальных слоёв, соответственно. Шестой столбец – это номер материала во входном файле для кода MCU-FR, соответствующий координатам аксиального слоя. Первая строка текстового файла «config.txt» должна содержать полное имя файла с результатами расчётов, полученными по коду CONV-3D.

Каждый из трех расчетных кодов обладает своей уникальной сеткой. Переинтерполяция осуществляется по следующему алгоритму: для каждого узла сетки кода CONV-3D решается уравнение окружности и определяется принадлежность узла рассматриваемой зоне регистрации кода MCU-FR и аксиальному слою. Затем производится усреднение температур всех узлов, попавших в рассматриваемую зону регистрации. Переинтерполяция на вложенную сетку кода CORNER реализуется по тому же алгоритму.

Усреднение температуры по зонам регистрации вносит неопределённость в расчёт поля энерговыделения. Для оценки этой неопределённости были проведены расчёты поля энерговыделения для облучательного устройства с ампулами со свинцом в быстром натриевом исследовательском реакторе при различных аксиальных размерах зон, использующихся для задания распределений температуры и плотности в коде MCU-FR, по 5, 2.5 и 1 см, соответственно. Проведённые расчёты показывают, что неопределённость, вносимая в поле энерговыделения усреднением температур, составляет ~ 0.6%. Однако, уменьшение сетки приводит не только к уменьшению неопределённости, но и к увеличению времени счёта на 2.4%. Это показывает, что первоначально выбранная высота зоны регистрации равная 5 см, является наиболее оптимальной.

По результатам выполненной работы в составе трехмерного расчётного кода были разработаны обменные модули для нейтронно-физических и теплогидравлического кодов. Выполнен анализ сходимости результатов расчета по высоте зон, использующихся для задания распределений температуры и плотности в коде MCU-FR.

Работы выполнены в рамках государственных контрактов № Н.40.241.19.21.1068 от 14.04.2021 года и № Н.40.241.19.24.1034 от 04.04.2024 года.

# Разработка аппаратуры для измерений тепловых свойств пород при пластовых термобарических условиях

Острижный Д.А., инженер Сколтеха

Научные руководители: д.ф.-м.н., проф. Попов Ю.А., к.ф.-м.н., проф. Станчиц С.А.

#### Сколковский институт науки и технологий

#### тел.: (916) 174-92-07, эл. почта: d.ostrizhny@skoltech.ru

При проектировании пунктов подземного захоронения РАО важную роль в обосновании безопасности играет анализ теплофизических процессов для разного характерного времени их протекания – эксплуатационный период с наиболее активным тепловыделением в массиве и период после закрытия пункта захоронения радиоактивных отходов, когда целесообразно учитывать долговременные постэксплуатационные и климатические изменения. Для такого анализа необходимы представительные экспериментальные данные о теплофизических свойствах массива горных пород. В настоящее время единственный способ надежно определить теплофизические свойства горных пород — это проведение измерений в лабораторных условиях на керновом материале. При извлечении керна на поверхность происходит его разуплотнение в связи с уменьшением давления, потерей порового флюида и рассыханием, что существенно влияет на теплофизические свойства извлекаемого керна. Также теплопроводность горных пород существенно зависит от температуры. Чтобы создать условия, приближенные к пластовым, необходимо:

- насытить образец керна пластовой жидкостью или ее моделью;
- обеспечить одновременное воздействие повышенного давления (осевого и обжимного) и температуры;
- создать необходимое поровое давление.

Оборудование, способное обеспечить перечисленные условия, уже создавалось в 2000-2010-е годы коллективом РГГРУ им. Орджоникидзе под руководством Ю.А. Попова по заказу компании Шлюмберже, однако в настоящее время оно находится в нерабочем состоянии и не используется.

В настоящее время в мире не существует установки, которая в полной мере реализует необходимые условия. Существующие устройства для измерений теплофизических свойств не могут быть адаптированы к данным условиям.

Целью данной работы является создание устройства, позволяющего проводить измерения теплопроводности и объемной теплоемкости образцов горных пород с учетом их анизотропии и неоднородности при пластовых давлениях и температурах с созданием трехкомпонентного давления, включая поровое давление, и возможностью определения их геомеханических свойств.

Задачи работы:

- создать теоретические и экспериментальные основы метода комплексных измерений теплофизических и механических свойств образцов анизотропных неоднородных пород;
- разработать измерительную ячейку на базе стандартного геомеханического трехосного пресса MTS 815/S-ATM для одновременных измерений теплофизических и механических свойств образцов пород;
- создать методические основы выбора и подготовки образцов;
- провести исследования теплофизических и механических свойств образцов горных пород участка захоронения РАО при пластовых термобарических условиях.

Проведение измерений с использованием геомеханического трехосного пресса откроет возможность для поиска корреляций между теплофизическими и упругими свойствами горных пород при пластовых условиях.

В качестве основы устройства для измерений теплофизических свойств при необходимых условиях выбран метод линейного источника тепла. На данный момент создан прототип устройства для измерений теплофизических свойств, для которого на этапе разработки метрологического обеспечения:

- проведены метрологические испытания при атмосферном давлении и повышенных температурах на образцах монокристалла кварца (с анизотропией теплопроводности) и плавленом кварце;
- разработана технология подключения ПК к измерительному зонду, находящемуся внутри термобарической камеры установки MTS 815/S-ATM;
- проведено метрологическое тестирование измерительного зонда при комнатной температуре на токопроводящем образце из титана.

На рисунке 1 и рисунке 2 приведены результаты измерений теплопроводности образцовых мер при повышенных температурах с помощью разработанного линейного источника тепла – датчика температуры (ЛИ-Д), который состоит из двух линейных источников-датчиков ЛИ-Д1 и ЛИ-Д2.



Рисунок 1 – Результаты измерений теплопроводности стекла КВ при повышенных температурах



Рисунок 2 – Результаты измерений теплопроводности монокристалла кварца при повышенных температурах вдоль двух главных осей теплопроводности монокристалла.

Полученные результаты показали хорошее соответсвие экспериментальных и справочных данных. По рисунку 2 также видно, что теплопроводность монокристалла кварца существенно уменьшается с увеличением температуры от 25 до 250 °C – более, чем на 40% вдоль трех главных осей теплопроводности.

В ближайшее время планируется проведение следующих видов работ:

- метрологические испытания устройства при повышенных давлениях и температурах;
- разработка методики определения объемной теплоемкости по результатам измерений;
- проведение измерений на образцах горных пород при повышенных давлениях и температурах.

### Численное моделирование жидкосолевого реактора по коду ЕВКЛИД/ЖСР

Петрова М.Н., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: д.т.н., заместитель директора ИБРАЭ РАН Мосунова Н.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-23-78, эл. почта: pmn@ibrae.ac.ru

Обоснование безопасности жидкосолевой реакторной установки (РУ) должно сопровождаться расчетным анализом её параметров в разных режимах эксплуатации, включая аварии. Для обоснования характеристик РУ применяют различные расчетные программные комплексы в зависимости от целей расчетов. Для задач, подразумевающих моделирование РУ как целостной системы с учетом взаимосвязей между её узлами и нестационарностью протекающих процессов, обычно применяют интегральные мультифизичные инженерные коды, требующие приемлемых вычислительных ресурсов и позволяющие проводить расчеты за сравнительно небольшие времена.

На данный момент уже существует ряд программ для проведения мультифизических расчетов жидкосолевых реакторов в одномерном приближении. Среди них, например, зарубежный код LiCore [1] и отечественные коды MSR-NODES [2] и ЕВКЛИД/ЖСР. Интегральный код ЕВКЛИД/ЖСР является разработкой ИБРАЭ РАН. В настоящее время код позволяет проводить связанное моделирование теплогидравлических и нейтронно-физических (в приближении точечной кинетики) процессов в динамических режимах с возможностью оценки критичности. Целевым объектом моделирования кода является исследовательский жидкосолевой реактор (ИЖСР) [3], который планируется построить перед сооружением энергетического реактора с жидкосолевым теплоносителем для отработки жидкосолевых технологий.

Код ЕВКЛИД/ЖСР состоит из отдельных модулей, работающих совместно под управлением системной оболочки, которая обеспечивает согласованный расчет модулей, а также согласованный ввод и вывод информации. В состав кода ЕВКЛИД/ЖСР на данный момент входят три модуля, которые могут использоваться для задач ИЖСР – теплогидравлический модуль, нейтронно-физический модуль на базе приближения точечной кинетики и модуль оценки возможности возникновения вторичной критичности. Для решения связанной задачи расчётные модули на каждом шаге обмениваются необходимыми данными.

Топливо в ИЖСР растворено в жидкой смеси расплавленных солей, циркулирующей в замкнутом контуре. Из-за этой особенности возникает сильная взаимосвязь между теплогидравлическими и нейтронно-физическими процессами, обусловленная отрицательным температурным коэффициентом реактивности и тем, что вместе с топливной солью по контуру перемещаются предшественники запаздывающих нейтронов. Данный факт необходимо учитывать для расчета эффективной доли запаздывающих нейтронов и, следовательно, мощности энерговыделения.

При межмодульном обмене теплогидравлический модуль на каждом расчетном шаге в качестве входных данных получает от модуля точечной кинетики мощность энерговыделения в объеме топливной соли в активной зоне. Обратно модуль точечной кинетики на каждом расчетном шаге получает от теплогидравлического модуля значения температуры топливной соли для учета реактивности от обратных связей и времена нахождения топливной соли в активной зоне и топливном контуре для возможности учета эффекта миграции предшественников запаздывающих нейтронов. Данные передаются с предыдущего шага по времени.

В режимах работы ИЖСР с нарушением нормальной эксплуатации возможен слив соли с топливом в дренажные баки системы пассивного слива соли (СПСС), где она должна пассивно расхолаживаться. С помощью кода ЕВКЛИД/ЖСР могут проводиться оценки возможности возникновения вторичной критичности в баках СПСС для отдельных состояний динамического процесса специальным модулем на базе кода MCU-ЖСР по данным, получаемым от теплогидравлического модуля. Геометрические параметры моделируемого объёма, температуры соли и имя материала стенок определяет теплогидравлический модуль и передает их модулю оценки вторичной критичности на каждом расчетном шаге. В заданные пользователем моменты времени модуль оценки вторичной критичности, используя полученные от теплогидравлического модуля данные, проводит расчет эффективного коэффициента размножения нейтронов.

Работоспособность кода ЕВКЛИД/ЖСР проверена на нескольких интегральных расчетах. В одном из тестовых расчетов смоделирован первый контур ИЖСР с участием теплогидравлического и нейтроннофизического модулей. Моделируется первый контур РУ с топливной солью 73LiF – 27BeF<sub>2</sub> с добавкой 2 мол.% UF<sub>4</sub>, который помимо трубопроводов включает активную зону (а.з.), компенсатор давления, насос и теплообменник со вторым контуром. Работа второго контура моделируется тепловым граничным условием. В активной зоне задан источник энерговыделения в объёме топливной соли, мощность этого источника определяется нейтронно-физическим модулем с учетом обратных связей по температуре топливной соли.

Сценарий задачи состоит из нескольких этапов, происходящих в заданные отрезки времени:

- от 0-ой до 120-ой секунды проводится автономный теплогидравлический расчет, при котором в контуре устанавливается циркуляция топливной соли с постоянным расходом;
- на 120-ой секунде происходит пуск реактора. В данной задаче моделируется резкий ввод мощности путем подключения модуля точечной кинетики с начальной мощностью равной 0,95 МВт. Одновременно с этим, теплообменник начинает охлаждать нагретую в а.з. соль. Количество отводимого тепла считается равным мощности энерговыделения в а.з., чтобы поддерживать номинальные значения температуры соли на входе в а.з. Изменение условий теплоотвода в теплообменнике имитирует изменение расходов во втором или третьем контурах установки, с помощью которых может осуществляться управление реактором;
- в промежуток от 120 секунды и примерно до 400 секунды в контуре устанавливается стационарное состояние с выходом на постоянную мощность, после чего до конца расчета реактор остается в критическом состоянии, все теплогидравлические и нейтронно-физические параметры остаются постоянными.

Целевыми расчётными величинами в этой задаче являются временные зависимости мощности в а.з. и температура на входе в а.з., полученные по коду ЕВКЛИД/ЖСР графики этих зависимостей изображены на рисунке 1.



Рисунок 1 – Временная зависимость температуры соли в первой ячейке а.з. (слева) и полной мощности в а.з. (справа)

Результаты выполненного с помощью интегрального кода ЕВКЛИД/ЖСР связанного теплогидравлического и нейтронно-физического тестового расчета качественно соответствуют ожидаемым результатам, демонстрируя согласованную работу модулей в интегральном коде.

Представленные результаты получены в рамках договора №72РОК-23 от 06.09.2023 (заказчик – АО «НИКИЭТ», исполнитель – ИБРАЭ РАН).

- 1. Axel Laureau, Emeline Rosier, Elsa Merle, Stéphane Beils, O. Bruneau, J.C. Blanchon, Ralf Gathmann, D. Heuer, F. Passelaigue, Florian Vaiana, A. Zanini, The LiCore power plant simulator of the molten salt fast reactor. EPJ Web of Conferences. 2021. Volume 247, 06030.
- Куприянов, К. С. Мультифизический анализ жидкосолевых реакторов / К. С. Куприянов, О. С. Фейнберг, В. В. Игнатьев // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2024. № 1. С. 91-103.
- 3. https://www.rosatom.ru/journalist/news/nikiet-zavershil-razrabotku-eskiznogo-proekta-ustanovki-s-issledovatelskim-zhidkosolevym-reaktorom/. Дата обращения: 10.04.2024.

### Анализ реактивностных характеристик реакторной установки с натриевым теплоносителем при моделировании аварии с неконтролируемым набросом мощности

Пешков С.В., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: к.т.н., и.о. зав. отделом ИБРАЭ РАН Колташев Д.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (951) 454-56-17, эл. почта: peshkov@ibrae.ac.ru

В ИБРАЭ РАН для обеспечения средств расчетного анализа тяжелых аварий в быстрых реакторах со свинцовым и натриевым теплоносителем ведутся работы по совершенствованию, верификации и валидации интегрального кода **EBKЛИД/V2** [1]. В состав кода входят два нейтронно-физических модуля, с помощью которых реализовано решение уравнения переноса нейтронов: **DOLCE VITA** — основной, использующий диффузионное приближение, и **CORNER** [2], использующий приближение метода дискретных ординат. С момента интеграции последнего, была создана и значительно модифицирована автономная версия одноименного кода. В новой автономной версии кода CORNER были расширены его возможности путем оптимизации уже существующих методик и приближений, использования вложенных, в том числе неконформных, сеток, позволяющих как просто сгущать сетку, так и учитывать пространственные эффекты гетерогенности, и др. В связи с этим актуальной задачей является включение в код EBKЛИД/V2 последней версии кода CORNER в качестве модуля.

Для этого были модернизированы исходные тексты модуля CORNER в составе кода EBKЛИД/V2, адаптированы обменные структуры, использованные ранее в DOLCE VITA, и внесены изменения в формат входного файла.

Для тестирования новой версии кода ЕВКЛИД/V2 было проведено моделирование тяжелой аварии с неконтролируемым набросом мощности быстрого реактора на нитридном топливе с натриевым теплоносителем, выполненное с использованием модулей CORNER и DOLCE VITA. Для состояний активной зоны в некоторые выбранные моменты расчета было проведено сравнение реактивностных эффектов, вычисленных с помощью упомянутых выше нейтронно-физических модулей и прецизионного кода MCU-FR на базе метода Монте-Карло.

Моделирование показало, что оба модуля предсказывают одинаковое развитие аварии и поведение большинства нейтронно-физических характеристик. Было достигнуто плавление топлива, его существенная диссоциация и кипение теплоносителя. Результаты расчётов эффектов реактивности по температуре топлива, его плавлению, а также диссоциации, полученных с использованием обоих модулей, показали хорошее согласие с результатами прецизионных расчетов. Эффект реактивности, связанный с РО СУЗ, рассчитанный по модулю CORNER даёт отличную от полученных по модулю DOLCE VITA и коду MCU-FR оценку. А для плотностного и пустотного эффекта наблюдаются существенные расхождения между результатами, полученными разными методами.

Работы выполнены в рамках государственного контракта № Н.40.241.19.24.1034 от 04.04.2024 года.

- 1. Особенности расчета нейтронно-физических процессов в активной зоне быстрого реактора с натриевым теплоносителем на этапе ее разрушения / Д. А. Колташев, Н. А. Мосунова, В. Ф. Стрижов [и др.] // Атомная энергия. 2022. Т. 132, № 4. С. 204-210.;
- 2. Нейтронно-физический расчётный код CORNER/ В. П. Березнев, Е. Ф. Селезнев, Д. С. Асатрян. // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2015.– №1. С.136-143.

# Отработка методики отбора проб подземных вод из наклонных скважин глубиной 165 метров на участке Енисейский

Пивиков Д.А., инженер отдела разработки методов и технологий

Научный руководитель: к.т.н., директор Красноярского филиала ИБРАЭ РАН Озерский Д.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: +7 (913) 042-92-24, эл. почта: pivikovda@ibrae.ac.ru

В ИБРАЭ РАН в 2021 г. разработана экспериментальная исследовательская установка для скважинных нагнетаний и мониторинга, на которой выполняются мероприятия по отработке методики отбора проб и проведения опытно-фильтрационных работ в трещинных коллекторах для мониторинга режима и качества подземных вод. Установка постоянно совершенствуется и модернизируется с учетом условий эксплуатации в глубоких скважинах. После проведения мероприятий по повышению сохранности ее основных конструкционных элементов в 2024 г. с использованием установки были запланированы поярусные исследования наклонных скважина указали на слабую водообильность трещинного коллектора зоны выветривания, низкие параметры водопроводимости и проницаемости. Однако, анализ результатов откачек из всего ствола с разными расходами и геофизическими данными обусловил целесообразность проведения пакерных опытов для поиска проводящих трещин. Наиболее результативными ожидались эксперименты в скважинах с низкими свойствами проницаемости.

Основной подход к отбору проб с глубоких интервалов в кристаллических породах на участках ПИЛ и ПГЗРО заключается в изолировании исследуемого интервала, обеспечении гидравлической связи между изолированным интервалом и пробоотборным резервуаром, откачках с замещением воды, обеспечении контроля герметичности пробоотборной системы. Главной особенностью данного подхода является возможность индивидуального исполнения экспериментальной установки для реализации необходимых исследований в заданном интервале.

Основными узлами установки являются:

- 1. Надувной сдвоенный пакер с комплектом наращивания длины (ПВХ и полиамидные трубы).
- Узел раздувания/сдувания надувных элементов путем нагнетания воды через полиамидную трубку для изоляции рабочего интервала, состоящая из насоса высокого давления и манометра для контроля давления в пакерной системе.
- 3. Узел энергообеспечения (электроэнергия, сжатый воздух, вакуум, вода).
- 4. Узел нагнетания и контроля параметров проницаемости.
- 5. Узел сбора, визуализации и передачи данных.

В результате анализа предыдущего опыта работы с пакерными установками решена проблема с образованием узлов из полиамидной трубки, используемой для обеспечения гидравлической связи между изолированным интервалом и пробоотборным резервуаром, что препятствовало извлечению пакера из скважины путем её замены на более жесткие соединения с системой полипропиленовых труб с резьбовыми соединениями, которые имитируют эффект «жесткой сцепки», благодаря которому возможно при необходимости переместить пакер вниз, тем самым вывести из зацепления с неровностями в скважине и извлечь его с любого интервала. При этом сама пакерная система имеет небольшую массу, что упрощает работу и дает возможность легко корректировать глубину рабочего интервала.

После установки пакерной системы в скважину на необходимый интервал проводятся работы по замещению воды в пробоотборном резервуаре, состоящем из ПВХ труб диаметром 40 мм, герметично соединенных между собой на глубину до 90 метров, имеющих гидравлическую связь с исследуемым интервалом. Замещение воды в пробоотборном резервуаре реализуется путем понижения уровня воды в резервуаре ниже статического и восстановления уровня за счет давления столба исследуемого интервала. Вытеснение реализуется методом обратного эрлифта. Метод заключается в вытеснении воды подачей воздуха под давлением с помощью компрессора, подключенного к системе труб через специально разработанный изоляционный оголовок.

С помощью системы мониторинга, состоящей из 2 логгеров, фиксируется полное восстановление статического уровня воды в скважине (определение напора исследуемого интервала). Привязка показаний логгера к уровню производится через данные электроконтактного уровнемера. Схема системы мониторинга изображена на рисунке 1.



Рисунок 1 – Однопакерная компоновка экспериментальной установки для откачек

Вытеснение обратным эрлифтом проводится многократно до того момента, пока не будет достигнуто полное замещение воды в пробоотборном резервуаре на воду из исследуемого интервала. Также необходимо отметить, что каждое выполненное вытеснение методом эрлифта или «экспресс откачкой» согласно методике проведения работ по интервальному исследованию скважин, являются отдельными самостоятельными экспериментами, которые в дальнейшем анализируются. При отборе проб задействуется скважинный мембранный насос, подключенный к баллону с инертным газом (азотом). Перед проведением операции по отбору пробы проводится освобождение трубок магистрали насоса от остатков воды путем подачи азота напрямую с редуктора, расположенного на газовом баллоне. К баллону с газом присоединяется редуктор и через полиамидную трубку подключается блок управления насосом, также к блоку управления присоединяется магистральная трубка подачи газа под давлением в насос. В процессе пробоотбора заранее подготовленные емкости заполняются водой из исследуемого интервала, при необходимости консервируются, исходя из вида необходимого анализа и требований нормативных документов к отбору проб воды таких как ГОСТ Р 59024-2020 и ГОСТ 31942- 2012.

Исследования и наблюдения за подземными водами участка строительства любого подземного сооружения являются необходимыми как с точки зрения обеспечения безопасности проходческих работ и эксплуатации, так и с позиции оценок влияния горных мероприятий на качество вод. В условиях подземного строительства в кристаллических, монолитных, практически безводных породах целевой объектный мониторинг ориентирован на контроль движения вод по отдельным трещинам. Его проведение невозможно без применения специализированных установок и оборудования. Нами последовательно отрабатывается технология и методика проведения длительных наблюдений и пробоотбора с больших глубин посредством экспериментальной установки для скважинных нагнетаний и мониторинга, которая позволила в прошедшем полевом сезоне осуществить отбор пробы подземной воды из интервала 120-165 метров, определенного на основе построения напорного профиля скважины той же установкой.

- 1. Гупало В. С., Казаков К. С., Коновалов В. Ю., Неуважаев Г. Д., Озерский Д. А. Анализ подходов к консервации и ликвидации скважин на участке недр «Енисейский» (Красноярский край, Нижнеканский массив) // Радиоактивные отходы. 2020. № 4 (13). С. 30–41. DOI: 10.25283/2587-9707-2020-4-30-41.
- Озерский Д.А., Тесля В. Г., Печатников В.А., Смирнов К.Д. Мониторинг трещинных вод на участке строительства подземной исследовательской лаборатории в красноярском крае // Журнал СФУ «Техника и технологии» 2024 17 (8).

# Моделирование взаимодействия дислокации и газового нанопузырька в кристалле

Пилюгин Л.С., Лобашев Е.А., Антропов А.С.

Научный руководитель: д.ф.-м.н. зав. отделом ОИВТ РАН Стегайлов В.В.

Объединённый институт высоких температур РАН Московский физико-технический институт (НИУ)

тел.: (495) 485-85-45, эл. почта: piliugin.ls@phystech.edu

Исследование выхода газовых продуктов деления (ГПД) из ядерного топлива является важной задачей. Механизмы выхода делятся на внутризёренные и межзёренные. При этом первые являются более медленными. Полной теории, описывающей внутризёренные механизмы диффузии газа, пока что не существует.

В отличие от теории диффузии атомарного растворённого газа, теория диффузии пузырьков развита недостаточно хорошо. Классический подход связывает коэффициент поверхностной самодиффузии с диффузией пузырька [1], однако он применим для идеальной решётки, больших радиусов и небольших давлений газа. При небольших радиусах начинает играть роль фасеточная структура пузырька. Кроме того, под давлением газа кинетика поверхностной диффузии меняется. По этим вопросам до сих пор нет универсальной модели, хотя проделана большая работа по развитию соответствующих подходов [2–4].

Группой Нуаро была разработана эмпирическая сеточная модель BEEP, призванная объяснить результаты экспериментов по выходу ГПД [5]. Было показано, что классические механизмы диффузии пузырьков не могут дать экспериментальный выход газа. Также в данной группе был недавно предложен ускоренный механизм движения пузырьков, связанный с дислокациями [6].

В работе [7] был предложен следующий механизм взаимодействия пузырька и дислокации. На пузырёк со стороны проходящей через него дислокации действуют силы «натяжения» *U*, вызванные избыточной энергией дислокации. Если линия дислокации изогнута, то эти силы не могут компенсировать друг друга и начинают двигать пузырек с равнодействующей *F*.



Рисуснок 1 – Искривленная дислокация, проходящая через пузырёк, действует на него с ненулевой силой F [7].

В данной работе проводится проверка этой модели. Для этого в системе, состоящей из пузырька гелия в ГЦК алюминии, закреплённого на краевой дислокации (рисунок 2), фиксируются крайние слои атомов. Далее верхний слой смещается с некоторой постоянной скоростью. Из-за этого смещения возникают касательные напряжения, которые вызывают изгиб дислокации (рисунок 3) и перемещение

пузырька. Связав смещение пузырька с работой, затраченной на сдвиг крайнего слоя, можно получить его подвижность и сравнить с результатами равновесных расчетов.



Рисунок 2 – Система из пузырька гелия и дислокации. В жёлтых областях частицы фиксированы. Верхний жёлтый слой смещается с постоянной скоростью V, нижний слой покоится. В зелёной области система моделируется в каноническом ансамбле при фиксированной температуре. Поверхность пузырька отмечена чёрным пунктиром. Атомы гелия отмечены красным, синяя точка — линия дислокации, проходящая через пузырёк.



Рисунок 3 – Фрагмент симуляции, соответствующий участку, обведённому оранжевой штриховой линией на рисунке 1. Синим цветом отмечена линия дислокации, красные точки — атомы гелия в пузырьке. Атомы матрицы ГЦК алюминия не показаны. Дислокация действует на пузырёк силами U, приложенными к точкам крепления. Под действием созданных касательных напряжений линия дислокации изгибается и силы U перестают компенсировать друг друга, что вызывает перемещение пузырька.

При больших напряжениях дислокация выгибается сильно и может оторваться от пузырька. Получив углы отрыва дислокации для разных размеров пузырька, можно оценить сверху силу, которая может действовать на пузырек со стороны дислокации.

В докладе будет рассказано о результатах моделирования.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (соглашение № 24-79-00252).

- 1. Гегузин Я. Е. Движение макроскопических включений в твердых телах. Металлургия, 1971.
- 2. Mikhlin E. Y. Suppression of diffusion mobility of small gas bubbles in solids //physica status solidi (a). 1979. V. 56(2). P. 763-768.
- 3. Veshchunov M. S., Shestak V. E. Model for evolution of crystal defects in UO2 under irradiation up to high burn-ups //Journal of Nuclear Materials. 2009. V. 384(1). P. 12–18.
- 4. Antropov A., Stegailov V. Helium bubbles diffusion in aluminum: influence of gas pressure //Journal of Nuclear Materials. 2023. V. 573. P. 154123.
- 5. Verma L., Noirot L., Maugis P. Modelling intra-granular bubble movement and fission gas release during post-irradiation annealing of UO2 using a meso-scale and spatialized approach //Journal of Nuclear Materials. 2020. V. 528. P. 151874.
- 6. Noirot L., Verma L., Maugis P. Oriented intra-granular bubble transport due to coupling of pinned bubble growth and dislocation climb //Journal of Nuclear Materials. 2023. V. 577. P. 154311.
- Knight D. T., Burton B. The climb of dislocations which are connected to bubbles and voids //Philosophical Magazine A. 1992. V. 66(2). P. 289–306.
### Сопоставление подходов к анализу чувствительности при моделировании поведения продуктов деления в условиях тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР

Попов И.В., Шмельков Ю.Б.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

#### тел.: (910) 852-25-20, эл. почта: popov20062002@list.ru

Анализ радиационных последствий аварий– ключевой элемент обоснования безопасности АЭС. Изза значительной неопределенности исходных данных и моделей, описывающих поведение продуктов деления при запроектных авариях, важно учитывать результаты анализа неопределенности при интерпретации результатов моделирования, особенно в случае запроектных аварий с плавлением топлива (тяжелых аварий). В связи с этим, согласно российской и международной нормативной документации [1-2], анализ безопасности АЭС должен включать оценку неопределенности и чувствительности. В данной работе представлены результаты анализа чувствительности для задачи моделирования поведения продуктов деления в условиях тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР. Рассмотрен сценарий «Двусторонний гильотинный разрыв главного циркуляционного трубопровода с полным обесточиванием» для ВВЭР-1000, поскольку он считается одним из наиболее консервативных по радиационным последствиям.

При выполнении расчетных анализов использовался код MABP-TA, содержащий модуль для анализа неопределенности и чувствительности к неопределенности исходных данных. Анализ чувствительности проводился с помощью двух подходов:

- 1. метод, основанный на стандарте ASME V&V 20[3] и РБ-166-20 [4] (далее метод ASME);
- 2. метод малых возмущений.

Каждый из подходов применялся для задач моделирования выхода ПД из топлива и переноса ПД в защитной оболочке. При использовании метода ASME, анализ чувствительности проводился с использованием коэффициентов ранговой корреляции Спирмена (1) и Кендалла (2).

$$R_{spearman} = 1 - \frac{6 \cdot \sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n(n^2 - 1)}$$
(1)

где п — количество расчетов,  $d_i = x_i - y_i$  — разность между рангами изменяемого параметра и анализируемого результата расчета.

$$R_{spearman} = 1 - \frac{6 \cdot \sum_{i=1}^{n} d_i^2}{n(n^2 - 1)}$$
(2)

где n — количество расчетов, P — суммарное число наблюдений, следующих за текущим наблюдением и имеющих больший ранг, Q — суммарное число наблюдений, следующих за текущим наблюдением и имеющих меньший ранг. При этом равные ранги при подсчете суммарного числа не учитываются. При ранжировании принималось, что признак с наибольшей выраженностью (величина изменяемого параметра или результата расчета) имел наименьший ранг.

Метод малых возмущений заключается в независимом варьировании каждого из исследуемых параметров на малую величину в заданном диапазоне неопределенности при неизменных других параметрах. В результате получается N точек в определенный момент времени для каждого рассматриваемого изотопа, после чего строится зависимость отслеживаемой величины в этот момент времени от процентного изменения варьируемого параметра относительно исходного значения этого параметра. Исходя из полученных зависимостей можно оценить максимальную и минимальную степень влияния на исследуемую величину (минимальный и максимальный тангенс наклона касательной к графику полученной зависимости) от того или иного изменения варьируемого параметра.

На рисунке 1 представлены гистограммы степени влияния изменения того или иного параметра варьирования для метода малых возмущений. На рисунке 2 представлены коэффициенты Кендалла для выхода Kr-85 из топлива.



Рисунок 1 – Гистограмма тангенсов для выхода Kr-85 из топлива



Рисунок 2 – Гистограмма коэффициентов Кендалла для выхода Kr-85 из топлива

По результатам проделанного анализа можно сделать следующий вывод: метод малых возмущений в большинстве случаев выделяет в качестве наиболее значимых тот же набор параметров, что и метод, ASME. Однако, в условиях значительной нелинейности зависимости анализируемого результата от параметра, метод ASME может необоснованно занижать или завышать его влияние. В связи с этим, при проведении исследований нужно комплексно применять оба подхода.

- 1. НП-001-15 «Общие положения обеспечения безопасности атомных станций». М.: Федеральная служба по экологическому технологическому и атомному надзору, 2015. 75 с.
- 2. SSG-2 Deterministic safety analysis for Nuclear Power Plants. IAEA Specific Safety Guide. Vienna, Austria, 2010.
- 3. Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer V&V 20. ASME, 2009. 101 p.
- 4. РБ-166-20. Рекомендации по оценке погрешностей и неопределенностей результатов расчетных анализов безопасности атомных станций. М.: Ростехнадзор, 2020. 24 с.

# Расширение геологической базы данных участка Енисейский при научном сопровождении строительства подземной исследовательской лаборатории

Сигаев А.Д. инженер-геолог ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: к.т.н. Директор Красноярского филиала ИБРАЭ РАН Озерский Д.А

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: 89029704883, эл. почта: sigaevad@ibrae.ac.ru

Енисейский участок был выбран для оценки возможности захоронения радиоактивных отходов (PAO) в архейских породах, что обусловлено наличием представительных материалов о свойствах данного геологического массива. Для дальнейшего изучения характеристик геологической среды, как элемента мультибарьерной системы обеспечения долговременной безопасности захоронения, на целевых глубинах (порядка 425-500 м) принято решение о создании подземной исследовательской лаборатории (ПИЛ) в недрах участка Енисейский [1].

Несмотря на накопленный объем данных о массиве горных пород участка Енисейский, в соответствии с требованиями законодательства в сфере недропользования необходимо выполнить очередной этап геологического изучения – геологическую разведку. По итогам данных мероприятий ожидается существенное пополнение базы геологических данных, значимых для расчётного обоснования долговременной безопасности захоронения РАО (ОДБ). При этом исчерпывающий объём исходных данных для ОДБ должен быть наработан по итогам реализации комплекса исследовательских работ в ПИЛ.

При проходке горных выработок представляется возможность получить разнообразную достоверную информацию о вмещающих горных породах, их составу, структуре и прочих принципиальных свойствах геологической среды, как естественного (природного) барьера безопасности. Возводимая по мере продвижения забоя бетонная крепь не позволит в последующем выполнить весь комплекс геологических исследований. Основной комплекс исследовательских мероприятий при проходке планируется выполнить в тот период, когда отбитая горная порода убрана, но постоянная крепь еще не возведена.

Необходимость получения исчерпывающей информации о геологических, в т.ч. гидрогеологических параметрах массива невозможно оспорить, соответственно, требуется оптимизация проектных решений, обеспечивающих необходимые условия для исследований с учётом соблюдения сроков строительства подземных объектов. Также приоритетной задачей текущего периода является оптимизация как методик исследований и подготовительных процедур, так и адаптация горнопроходческих циклов для создания вертикальных стволов ПИЛ.

В соответствии с разработанной старшим научным сотрудником ИБРАЭ канд. геол.-минер. наук О.А. Морозовым унифицированной схемой геологического описания шахтных стволов, в состав исследований включена детальная геологическая документация горных выработок, описания керна подземных буровых скважин, пробуренных в зонах техногенного разуплотнения массива, замеры пространственного положения трещин и их количественных характеристик. Геологическая документация подземных выработок выполняется традиционным способом графических зарисовок с натуры и текстовых описаний. Геологическая документация сопровождается составлением эталонной коллекции.

Принимая во внимание вторичность изменения горных пород и наличие кор выветривания в верхней части забоя, являющиеся особенностью Енисейского участка, важнейшим методом определения горных пород является петрографическое изучение шлифов, которое позволяет детализировать вторичные изменения, определить их текстурно-структурные взаимоотношения, которые не представляется возможным определить макроскопическим методом.

Ниже представлены фото и описание образцов горных пород. Слева – образец, извлечённый с глубины 16 метров вентиляционного ствола и его макроописание, справа – микроскопический снимок шлифа аналогичной горной породы, отобранной из керна скважины, пробуренной АО «Красноярскгеология», и описание шлифа.



а) габбро-диорит: порода среднего состава, массивная, среднезернистая, состоящая из плагиоклаза, роговой обманки, по трещинкам прослеживаются следы ожелезнения, прослеживаются следы лимонитизации; б) долерит: среднезернистая структура, диабазовая микроструктура основной массы, сложенная разноориентированными призматическими, редко таблитчатыми, зернами андезина, субизометричными актинолитизированными зернами авгита, к которым тяготеют зерна рудного минерала, и единичными изометричными зернами граната
Рисунок 1 – Образцы горных пород

Как мы видим, при петрографическом исследовании удаётся более точно описать минеральный состав и текстурно-структурные свойства горных пород.

Основными видами горных пород на участке Енисейский являются гнейсы, плагиогнейсы кордиерит-биотитовые, биотитовые, гнейсо-граниты, массивные метадолериты, порфировые долериты (трахидолериты), жилы и прожилки кварцевого, полевошпат-кварцевого, кварц-карбонатного и карбонатного составов, отмечается присутствие лампрофиров. Элементами геологической структуры на участке Енисейский выступают полосчатость, местами - плойчатость метаморфических пород, контакты геологических тел, трещины, зоны повышенной трещиноватости, дробления, катаклаза, милонитизации, рассланцевания, смятия, местами – зоны выщелачивания, бластомилонитов, сцементированных тектонических брекчий.

Крупные активные разломы внутри массива не развиты. Редкие тонкие трещины наблюдались глубже 80-100 м, но основная их масса была залечена жильными минералами. Кроме того, в массиве присутствуют относительно маломощные (до 1,5 м) древние тектонические зоны (зоны брекчирования, зоны смятия), в пределах которых выявляются минерально-деформационные преобразования различные по типу и интенсивности.

Глубокий метаморфизм горных пород обуславливает большую прочность кристаллических коренных фракций, где снижение прочности определяется только наличием трещин. Высокие показатели предела прочности на сжатие варьируется в гнейсах от 78,6 до 104 МПа, а в дайках – от 117 до 182 МПа, в зависимости от степени разрыва [2].

Сочетание различных общепринятых в геологии и горном деле, а также узко специализированных методов, по нашему мнению, позволит получить необходимые исходные данные о вмещающем массиве. Необходимо отметить, что общий объем геологической работы при проходке стволов, согласно Проектной документации на геологическое изучение недр участка Енисейский, представляется обширным и достаточным: предстоит задокументировать более 21 тыс. м<sup>2</sup> обнажений, сделать более 17 тыс. снимков, отобрать более 160 образцов. Подобное обширное применение геологических методов исследования при строительстве подземных сооружений применяется впервые.

- 1. Красильщиков Я.С. Основы фотографии и кинематографии при геологических работах / М, Недра. 1979. 215 стр.
- 2. Озерский А.Ю., Полякова Е.Г. История, результаты и проблемы геологического изучения Енисейского участка для захоронения радиоактивных отходов // Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека. Томск. 2021. Т.1. С. 443-447.
- 3. Озерский Д.А., Иванова Т.П., Пушкарева О.В., Казаков К.С, Лозовой А.И. Состояние, проблемы и задачи гидрогеологического изучения участка захоронения радиоактивных отходов в южной части Енисейского кряжа / Геология и недропользование, Москва, № 4, 2021. С. 96-104.

### Интерпретация данных опытно-фильтрационных работ с использованием пакерной установки на участке Енисейский

Смирнов К.Д., младший научный сотрудник ИБРАЭ РАН

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-68, эл. почта: smirnov@ibrae.ac.ru

Участок Енисейский, расположенный в Красноярском крае в окрестностях г. Железногорск, уже более 20 лет изучается как площадка пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО) и строительства подземной исследовательской лаборатории (ПИЛ) для подтверждения возможности окончательной изоляции отходов классов 1 и 2. Особое внимание уделяется изучению гидрогеологических условий массива, а именно фильтрационных характеристик, без учета которых невозможен прогноз долговременной безопасности ПГЗРО. По результатам поисковой и оценочной стадии геологоразведочных работ 2003-2014 гг. участок был признан потенциально пригодным для глубинного захоронения, но опытно-фильтрационные работы (ОФР) на этих стадиях выявили неоднородность гидрогеологических свойств массива при весьма низкой проницаемости пород [1].

Данный массив представлен нижнеархейскими гнейсами, пронизанными дайками долеритов и габбро-диабазов. Сверху массив перекрыт сплошным чехлом четвертичных элювиально-делювиальных отложений мощностью до 45 м. Фильтрационные свойства скального массива во многом определяются трещиноватостью, которая связана с разрывными нарушениями и дайками. В основном трещиноватость экзогенная и проявлена на небольших глубинах (до 200 м), но в отдельных скважинах встречаются редкие тектонические трещины на глубине целевого интервала захоронения (450-525 м) [2].

С 2021 года на участке Енисейский ведутся работы по детальному изучению гидрогеологических характеристик массива в существующих скважинах. Для этого применяется пакерная установка, разработанная в ИБРАЭ РАН. Установка позволяет изолировать определённые интервалы скважины по глубине, что даёт возможность проводить опытно-фильтрационные работы (ОФР) с использованием одинарной или двухпакерной системы. На основе интерпретации данных определяются фильтрационные параметры изолированных интервалов или трещин. Эти данные впоследствии используются для прогнозного моделирования миграции радионуклидов.

В данной работе представлены результаты интерпретации поинтервальных откачек с применением однопакерного снаряда, проведённых в 2024 году в 165-метровых новых скважинах участка Енисейский. Данные скважины вскрывают зону экзогенной трещиноватости. Для интерпретации применялась программа AQTESOLV [3], позволяющая использовать различные схемы графоаналитической обработки опытных данных. На рисунке 1 представлен пример обработки скважины C5 интервала 0-70 м от поверхности земли. В результате получены значения проводимости (м<sup>2</sup>/сут) различных скважин и их отдельных интервалов по глубине. На рисунке 2 представлено распределение суммарной проводимости скважины C5 по глубине.



серые точки – опытные данные, красные – производная изменения опытных данных, синии линиия – модельные кривые Рисунок 1 – Пример обработки скважины С5 в интервале 0-70 м



Рисунок 2 – Распределение проводимости (м<sup>2</sup>/сут) в скважине C5

В ходе исследований выявили зоны повышенной и пониженной проводимости. На примере скважины C5 обнаружено, что интервал 100–165 м обладает максимальной проницаемостью (0,29 м<sup>2</sup>/сут), а участок 70–100 м — минимальной (0,03 м<sup>2</sup>/сут). Эти данные позволяют параметризировать прогнозные модели миграции радионуклидов. Применённый метод демонстрирует эффективность на глубинах до 165 м, что открывает возможности для его использования в будущих экспериментах. Выявленные зоны аномальной проницаемости можно интегрировать с результатами геофизических исследований скважин для комплексного анализа свойств скального массива.

- 1. Озерский Д. А., Гупало В. С., Казаков К. С., Неуважаев Г. Д. Изучение параметров геологического массива в рамках создания и эксплуатации подземной исследовательской лаборатории на участке «Енисейский» в Красноярском крае // Радиоактивные отходы. 2022. № 4 (21). С. 78-89.
- 2. Озерский А. Ю., Полякова Е. Г. История, результаты и проблемы геологического из учения Енисейского участка для захоронения радиоактивных отходов. Радиоактивность и радиоактивные элементы в среде обитания человека. Томск, 2021, 1, 443–447.
- 3. Wardwell, David A. and Glenn M. Duffield. Slug Testing Using Level TROLL 500 and Level TROLL 700 Instruments and AQTESOLV Software. 2008.

## Расчетные оценки влияния параметров активной зоны реакторов типа ВВЭР на характеристики нейтронных полей

Сошников В.М., м.н.с ИБРАЭ РАН, Катаев Е.В., м.н.с. ИБРАЭ РАН, Казиева С.Т., н.с. ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: в.н.с. ИБРАЭ РАН, д-р техн. наук Ванеев Ю.Е.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-32, эл. почта: soshnikov@ibrae.ac.ru

В течение всего времени эксплуатации реактор типа ВВЭР выступает в роли мощного источника нейтронов, продолжительное воздействие которых на конструкции реакторной установки приводит к накоплению в них значимых для оценок радиационной безопасности радионуклидов и изменению физических свойств материалов. Для оценки этих эффектов необходимо проводить расчетное моделирование нейтронных полей как в самой активной зоне, так и за ее пределами. Подготовка расчетной модели реакторной установки – комплексная задача ввиду множества входных параметров, в разной степени влияющих на характеристики нейтронных полей.

Цель данной работы – определить наиболее существенные параметры в плане их влияния на характеристики нейтронных полей, главным образом, за пределами активной зоны.

С использованием программных средств TDMCC [1] и TRACT [2], входящих в состав ПК КОРИДА [3,4], разработаны две базовые расчетные модели реакторов типа BBЭР-440 и BBЭР-1000. Каждая из этих моделей настраивалась на три состояния активной зоны, соответствующие началу, середине и концу реакторной кампании. В качестве характеристик нейтронных полей рассмотрены распределения энерговыделения по группам TBC в активной зоне, пространственные распределения плотности потока и спектра нейтронов в материалах ВКУ и корпуса на уровне активной зоны.

Выделены две группы параметров для анализа их влияния на характеристики нейтронных полей:

 параметры конструкций активной зоны, ТВС и ВКУ. Для модели ВВЭР-440 рассмотрены такие параметры как содержание бора в чехлах ТВС, профилирование ТВС и наличие кассет-экранов. Для модели ВВЭР-1000 исследовано влияние на нейтронные поля наличия твэлов с гадолиниевым выгорающим поглотителем (твэгов) и водного зазора между выгородкой и шахтой. Для моделей обоих реакторов проанализированы эффекты влияния дистанционирующих решеток и различных положений органов СУЗ;

- составы ядерного топлива, ТВС и теплоносителя. Для обоих базовых моделей рассмотрены такие параметры как распределение плотности теплоносителя по объему активной зоны, температура и неравномерность выгорания ядерного топлива по высоте твэлов. Проанализировано влияние на характеристики нейтронных полей содержания в ядерном топливе нуклидов: Xe<sup>135</sup>, Sm<sup>149</sup>, Sm<sup>151</sup> (нуклиды с большим сечением захвата нейтронов); Pu<sup>239</sup>, Pu<sup>240</sup>, Pu<sup>241</sup> (трансурановые нуклиды, существенно влияющие на скорость ядерных реакций). Кроме этого, исследовано влияние всех прочих продуктов деления, накапливающихся в ядерном топливе в процессе работы реактора, в приближении «суммарного осколка деления».

Проведена серия вариантных расчетов характеристик нейтронных полей при вариациях исследуемых параметров. На основании полученных результатов выявлены наиболее значимые из них. Результаты данной работы сформулированы в виде методических рекомендаций, использование которых позволит повысить точность расчетов плотности потоков нейтронов и скорости активации материалов конструкций водо-водяных реакторов.

#### Литература

 Семенова Т. В., Житник А. К., Артемьева Е. В., Волков Н. А., Ломтева К. С., Шукаева О. Н. Верификация программы TDMCC для решения задач радиационной защиты от заданных источников нейтронного и фотонного излучения // Супервычисления и математическое моделирование. - 2018. -№17. - С. 490-498.

- 2. Программа для оценки радионуклидных составов и радиационных характеристик ОЯТ и РАО (TRACT). Блохин А.И., Блохин П.А., Сипачев И.В. Свидетельство о государственной регистрации № 2020613540 ИБРАЭ РАН, ГК Росатом.
- 3. Программный комплекс КОРИДА для прогнозирования характеристик источников ионизирующих излучений и создаваемых ими радиационных полей / П. А. Блохин, А. И. Блохин, Ю. Е. Ванеев, П. А. Кизуб, И. В. Сипачёв / Препринт № IBRAE-2018-06. М. : ИБРАЭ РАН, 2018. 16 с. Библиогр.: 27 назв. 56 экз.
- 4. А.А. Аракелян, А.И. Блохин, П.А. Блохин и др. Развитие программного комплекса КОРИДА и опыт его применения при решении задач с ОЯТ и РАО // Радиоактивные отходы. 2022. № 3 (20). С. 107-113.

## Моделирование последствий нарушений нормальной эксплуатации при тепловом взрыве технологических сред радиохимических предприятий

Тарганов И.Е., старший научный сотрудник ФБУ «НТЦ ЯРБ» Научный руководитель: к.х.н., нач. уч. ФБУ «НТЦ ЯРБ» Кощеева А.М. ФБУ «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности»

тел.: (499) 264-07-96 доб. 749, эл. почта: targanov@secnrs.ru

При оценке безопасности радиохимических предприятий стоит учитывать последствия нарушения нормальной эксплуатации, связанные с развитием пожаровзрывоопасных ситуаций, в том числе, возникновение взрывов [1]. Исходя из анализа аварийных случаев, связанных со взрывом экстракционных и сорбционных систем, наиболее вероятной формой возникновения взрыва является протекание теплового взрыва – явления горения, возникающего при самовоспламенении системы и сопровождающееся выделением большого количества теплоты [2]. При этом причиной увеличения скорости реакции окисления и возникновения горения является превышение скорости выделения теплоты над скоростью теплоотвода в системе. Потенциальная опасность экстракционных и сорбционных систем, а также азотнокислых растворов органических восстановителей и их смесей определяется возможностью возникновения в них экзотермических процессов, сопровождающихся газовыделением, которые могут привести к созданию в закрытых технологических аппаратах избыточного давления вплоть до их разрушения с выбросом содержимого. Отсутствие открытых данных по выходу радиоактивных веществ в случае возникновение теплового взрыва на радиохимических предприятиях определяет целесообразность экспериментального определения доли выхода радиоактивных веществ. Эти данные могут быть использованы для анализа возможных радиационных последствий на работников (персонал), население и окружающую среду в случае нарушений нормальной эксплуатации, повлекших за собой тепловой взрыв экстракционных и сорбционных систем, а также азотнокислых растворов органических восстановителей и их смесей.

Для реализации протекания реакции в режиме теплового взрыва использовали герметизируемую ячейку, которая погружалась в термостат с программируемым нагревом. Ячейка, снабженная термопарами для определения температуры образца, датчиком давления системы и клапаном для сброса газообразных продуктов и/или аэрозолей, патрубками подсоединялась к ловушкам, наполненным поглотителями.

Химический состав технологических сред, используемых на радиохимических предприятиях, и представляющих потенциальную опасность возникновения теплового взрыва, связанного с нарушением нормальной эксплуатации, и имитировали с помощью солей элементов, состоящих из стабильных изотопов и имеющих схожие физико-химические свойства.

В результате выполнения работы отмечены следующие зависимости: повышение содержания окислителя (HNO<sub>3</sub>) в технологической среде приводит к увеличению доли выхода элементов в случае возникновения теплового взрыва; наличие в технологических средах органических восстановителей (КГ, ДФГ, АУК, ДТПА и т.д.) приводит к увеличению доли выхода урана в случае возникновения теплового взрыва; состав среды оказывает значительное влияние на выход определенных РН в газовую фазу, например выход Ад наблюдался в значительных количествах в газовую фазу в системах, содержащих экстрагент.

Основной вклад в активность при возникновении теплового взрыва вносят: для экстракционных систем – Cs, Pu, Cm со значением порядка  $10^{12}$  Бк; для исследованных сорбционных систем – Cm с активностью порядка  $10^{11}$  Бк; для сред с органическими восстановителями (имитатор раствор на упаривание BAO) – Cs со значением порядка  $10^{16}$  Бк.

- 1. НП-016-05. Общие положения обеспечения безопасности объектов ядерного топливного цикла (ОПБ ОЯТЦ).
- 2. Девисилов В.А., Дроздова Т.И., Тимофеева С.С. Теория горения и взрыва. Практикум. 2012.

# Оценка эффективности геотехнических сооружений в контексте прогнозирования доз при анализе долговременной безопасности для типового хвостохранилища

Титкова Л.Д., Ширнин М.Ю.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: (495) 955-22-68, (доб. 492), эл. почта: titkova@ibrae.ac.ru

Эффективность инженерных барьеров безопасности загрязненных территорий существенно зависит от гидрогеологических условий их размещения, характеристик среды и со временем снижается вследствие их деградации. В настоящей работе рассмотрены вопросы эффективности этих сооружений на примере хвостохранилища, состоящего из двух секций, с применением методов численного моделирования миграции радионуклидов в геологической среде и последующего радиационного воздействия на население в долговременной перспективе [1].

В качестве референтного загрязнителя грунта хвостохранилища рассматриваются два варианта: <sup>90</sup>Sr (с периодом полураспада 28,8 лет и активностью 1000 Бк/кг в грунте хвостохранилища) и изотоп <sup>238</sup>U, в качестве исходной активности <sup>238</sup>U принята активность равная 100 кларковым единицам (300 г/т). Расчеты проводились для четырех вариантов эволюции площадки размещения хвостохранилища. «Нулевой» вариант предполагает засыпку водяной линзы хвостохранилища и сохранение текущего состояния территории вблизи хвостохранилища, второй вариант, учитывает покрывающий экран на хвостохранилище, третий вариант, включает создание инженерных барьеров безопасности по типу «стена в грунте» и противофильтрационный экран, четвертый вариант включает создание усеченной «стены в грунте» со стороны ручья, берущего свое начало около хвостохранилища.

В рамках оценки радиационного воздействия разработан сценарий водопользования слабопроточным водоемом, расположенного ниже по течению ручья, в который поступают радионуклиды, мигрирующие из хвостохранилища. Расчет доз потенциального облучения для критической группы населения с учётом накопления радионуклидов в сельскохозяйственной продукции и рыбе произведен с помощью программного средства ЭКОРАД, разработанного в ИБРАЭ РАН в составе расчётного комплекса КОРИДА [2]. Расчётные алгоритмы ЭКОРАД базируются на подходах рекомендованных МАГАТЭ и широко применяемых мировым сообществом в вопросах оценки радиационной безопасности [3,4] и адаптированных к выбранной площадке размещения хвостохранилища.

Сравнение значений доз облучения населения в различные периоды эволюции площадки хвостохранилища для четырех вариантов позволяет оценить эффективность каждого из применяемых инженерных решений с точки зрения радиационной безопасности и подготовить рекомендации в области исследования основных процессов, определяющих критические пути радиационного воздействия, и дополнительных мероприятий по обеспечению долговременной безопасности.

- Оценка эффективности геотехнических сооружений для обеспечения долговременной безопасности в районе расположения хвостохранилища / М. Ю. Ширнин, Л. Д. Титкова, А. А. Аракелян, К. Д. Смирнов // XXIII научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН : Сборник тезисов, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, 14–15 мая 2024 года. – Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, 2024. – С. 93-94.
- 2. Аракелян А. А., Блохин А. И., Блохин П. А. и др. Развитие программного комплекса КОРИДА и опыт его применения при решении задач обращения с ОЯТ и РАО // Радиоактивные отходы. 2022. № 3 (20). С. 107—116. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-3-107-116
- 3. Международное агентство по атомной энергии (МАГАТЭ). Радиационная защита и безопасность источников излучения: международные основные нормы безопасности (промежуточное издание) //Серия норм безопасности МАГАТЭ, № GSR Part 3. 2014.
- 4. International Atomic Energy Agency (IAEA). Handbook of Parameter Values for the Prediction of Radionuclide Transfer in Terrestrial and Freshwater Environments/ Technical Reports. Series № 472. Vienna: IAEA, 2010.

# Оценка радиационных характеристик конструкционных материалов токамака Т - 15МД в различных режимах работы с дейтериевым топливом

Халиков Р.С<sup>1</sup>., Кизуб П.А<sup>1</sup>., Ефремов Р.О<sup>1</sup>, Хвостенко А. П.<sup>2</sup>,Хвостенко П.П.<sup>2</sup>, Хрипунов В.И.<sup>2</sup>, Кирнева Н.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва, Россия <sup>2</sup>Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

#### эл. почта: khalikov@ibrae.ac.ru

Развитие термоядерной энергетики является одним из перспективных направлений современной науки и техники. Управляемый термоядерный синтез (УТС) рассматривается в качестве потенциального источника высокоэнергетических нейтронов, которые могут быть использованы для решения вопросов наработки ядерного топлива и обращения с высокоактивными отходами. В России в рамках федерального проекта «Разработка технологий управляемого термоядерного синтеза и инновационных плазменных технологий» активно разрабатываются экспериментальные термоядерные установки, одной из которых является введенный в 2021 году в эксплуатацию токамак Т-15МД [1].

Установка Т-15МД – крупнейший российский токамак, предназначенный для исследования физики плазмы в условиях, близких к условиям будущих термоядерных реакторов. В настоящее время исследования на установке ведутся с водородной плазмой. Однако в планах дальнейших исследований на токамаке рассматривается, в том числе, возможность проведения дейтериевых разрядов, что позволит отработать необходимую физическую, техническую и технологическую инфраструктуру.

Важным этапом проектирования и эксплуатации термоядерной установки, обеспечивающим радиационную безопасность персонала и окружающей среды, является оценка радиационных характеристик конструкционных и функциональных материалов. Такая оценка позволяет прогнозировать активности и энерговыделения, возникающие в результате взаимодействия нейтронов с конструкционными материалами. Эти данные необходимы для:

- разработки стратегий обращения с радиоактивными материалами;
- оценки дозовых нагрузок на персонал;
- обоснования безопасной эксплуатации установки;
- планирования работ по демонтажу и выводу из эксплуатации.

В данной работе оценка радиационных характеристик конструкционных материалов токамака Т-15МД, работающего в режиме дейтериевых разрядов, осуществлялась с помощью разрабатываемого в ИБРАЭ РАН кода нуклидной кинетики TRACT-F [2-4]. Исходные данные по нейтронным потокам и спектрам получены с использованием программы моделирования переноса ионизирующего излучения методом Монте-Карло TDMCC [5]. Расчеты активации и энерговыделения проведены для двух вариантов кампаний с дейтериевым топливом:

- 32 импульса длительностью 10 секунд каждый с интервалом 15 минут;
- 1000 импульсов длительностью 10 секунд каждый с интервалом 15 минут.

В результате расчетов получены значения активностей и энерговыделений для различных конструкционных элементов установки (индуктор, первая стенка (графит), вакуумная камера, катушка электромагнитной системы, биологическая защита и др.) на различные моменты времени выдержки после окончания облучения. На рисунке в качестве примера приведены графики зависимости удельной активности в графитовой облицовке первой стенки токамака T-15MД от времени выдержки после 32 и 1000 импульсов дейтериевой плазмы.

Анализ полученных результатов в соответствии с критериями, представленными в Постановлении Правительства РФ №1069 [6], показывает, что уровень активации в облицовке первой стенки даже после 1000-импульсной кампании на порядки ниже значений, при достижении которых нормы предписывают относить материалы к радиоактивным отходам.



Рисунок 1. Графики зависимости удельной активности в графитовой облицовке первой стенки Т-15МД от времени выдержки после 32 и 1000 импульсов

Кроме того, с помощью кода нуклидной кинетики TRACT-F получены: гамма-спектры остаточного излучения, использованные в качестве исходных данных для расчетов дозовых полей от облученных материалов; накопление трития в облученных материалах, расчетная оценка которого свидетельствует о тритиевой безопасности установки; а также энерговыделение в полиэтилене в составе биологической защиты, которое, по самым консервативным оценкам, не может привести к его плавлению.

Проведенные расчеты позволяют оценить радиационные характеристики конструкционных материалов токамака T-15MД, работающего в режиме дейтериевых разрядов, для кампаний различной продолжительности. Разработанная методика проведения комплексных расчетов может использоваться при анализе и обосновании радиационной безопасности перспективных установок УТС и для оптимизации их конструкций биологической защиты и возможных режимов работы. Дальнейшие исследования будут направлены на уточнение моделей и учет дополнительных факторов, влияющих на радиационные характеристики материалов.

- 1. Первые экспериментальные результаты на токамаке Т-15МД / Е. П. Велихов, М. В. Ковальчук, И. О. Анашкин [и др.] // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2024. Т. 47, № 2. С. 5-14. DOI 10.21517/0202-3822-2024-47-2-5-14. EDN CYSKYV.
- 2. Д. В. Крючков, П. А. Кизуб, Ю. Е. Ванеев [и др.] Программа для оценки радионуклидных составов и радиационных характеристик РАО установок УТС (TRACT-F). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024680561, заявитель Российская Федерация, от имени которой выступает Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом», Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук.
- 3. Халиков, Р. С. Верификация и валидация кода нуклидной кинетики TRACT-F для оценки радиационных характеристик конструкционных материалов установок УТС / Р. С. Халиков // ХХІІІ научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН : Сборник тезисов, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, 14–15 мая 2024 года. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, 2024. С. 88-89. EDN MKUNFI.
- Халиков, Р. С. Результаты верификации кода нуклидной кинетики TRACT-F / Р. С. Халиков, П. А. Блохин // Безопасность АЭС и подготовка кадров : Тезисы докладов, Обнинск, 26–27 октября 2023 года. – Обнинск: ООО "Оптима-Пресс", 2023. – С. 122-123. – EDN ZXOEJO.
- 5. Житник А.К., Рослов В.И., Семенова Т.В. и др. Программа ТDMCC (Time Dependent Monte Carlo Code). Свидетельство о государственной регистрации № 2010614412, ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ».
- 6. Постановление Правительства РФ от 19 октября 2012 г. N 1069 "О критериях отнесения твердых, жидких и газообразных отходов к радиоактивным отходам, критериях отнесения радиоактивных отходов к особым радиоактивным отходам и к удаляемым радиоактивным отходам и критериях классификации удаляемых радиоактивных отходов".

# Термодинамические свойства кислородо- и водородосодержащих молекулярных примесей в расплаве свинца: первопринципные метадинамические расчёты

Хнкоян Г.В., Николаев В.С.

Научный руководитель: д.ф.-м.н. зав. отделом ОИВТ РАН Стегайлов В.В.

Объединённый институт высоких температур РАН Московский физико-технический институт (НИУ)

тел.: (495) 485-85-45, эл. почта: khnkoian.gv@phystech.edu

Тяжелые жидкометаллические теплоносители (ТЖМТ) широко применяются в ядерных энергетических системах нового поколения благодаря их хорошим теплофизическим характеристикам [1]. Одним из ключевых аспектов безопасной эксплуатации таких систем является контроль примесей в теплоносителе [2, 3], особенно кислорода и водорода. Взаимодействие этих элементов в расплаве свинца определяет примесный состав теплоносителя, что оказывает значительное влияние на процессы очистки контура [4] и его эксплуатационную безопасность. Однако описание состояния молекулярных и атомарных примесей в свинцовом расплаве остаётся сложной задачей из-за многообразия возможных химических взаимодействий и недостатка экспериментальных данных [5].

В данной работе проведено исследование растворённых в свинце кислород- и водородсодержащих соединений методами *ab initio* молекулярной динамики в сочетании с метадинамическим подходом. Этот метод позволяет оценить энергии образования различных химических видов, чтобы затем рассчитать их равновесные концентрации в расплаве. В частности, были изучены молекулы H2, OH и H2O в условиях, характерных для работы ТЖМТ систем.

Результаты расчётов показали, что стандартные энергии образования молекул H2, OH и H2O в свинцовом расплаве значительно отличаются от их газофазных значений. Кроме того, связывание кислорода водородом увеличивает массу растворенного в расплаве свинца водорода, что объясняется энергетической выгодой образования молекулы OH. Полученные данные могут быть использованы для оптимизации процессов очистки контура от примесей и регулирования химического состава теплоносителя.

Настоящее исследование позволяет глубже понять взаимодействие водорода и кислорода в свинцовом теплоносителе и его влияние на эксплуатационные характеристики системы. Данные результаты могут быть полезны при разработке стратегий контроля примесей в контурах с ТЖМТ, а также при оценке потенциальных рисков, связанных с накоплением водорода [6].

- 1. Gromov B. F., Shmatko B. A. Physical and chemical properties of lead-bismuth melts //Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenij. Yadernaya Ehnergetika. 1996. C. 35-41.
- 2. Zhang J., Li N., Chen Y. Oxygen control technique in molten lead and lead-bismuth eutectic systems //Nuclear science and engineering. – 2006. – T. 154. – №. 2. – C. 223-232.
- 3. Асхадуллин Р. Ш. et al. Методы регулирования содержания кислорода в ТЖМТ // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. 2017. № 5. С. 32-43.
- 4. Мартынов П. Н. et al. Фильтрационная очистка ТЖМТ от примесей // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. 2015. № 2. С. 120-137.
- 5. Fazio C. et al. Handbook on lead-bismuth eutectic alloy and lead properties, materials compatibility, thermal-hydraulics and technologies-2015 edition. Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2015. №. NEA--7268.
- 6. Скобеев Д. А., Легких А. Ю. Кинетика процесса удаления водорода с помощью гранулированного оксида свинца в бескислородной газовой среде // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. 2018. № 5. С. 166-175.

## Оценка влияния погрешности эффективности РО СУЗ на результаты моделирования проектных аварий

Цветкова Д.Д., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: зав. лаб. ИБРАЭ РАН Белов А.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.:+79999734746 эл.почта: tsdd@ibrae.ac.ru

Согласно требованиям руководства по безопасности [1] необходимо проводить оценку неопределенности при анализе безопасности атомных станций, выполняемом с использованием программ для электронно-вычислительных машин. В практике для построения такой оценки используются различные методы, в том числе стохастический метод, заключающийся в розыгрыше входных параметров задачи [2-4].

При расчете проектной аварии реактора на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем необходимо провести оценку влияния погрешности входных параметров (исходная мощность РУ, мощность остаточного энерговыделения, обороты ГЦН и др.), в том числе эффективности стержней системы управления и защиты (СУЗ) на результаты моделирования. Эта работа посвящена построению метода розыгрыша эффективности РО СУЗ для динамических расчетов.

В ИБРАЭ РАН разработана методика оценки погрешностей и неопределенностей расчетных результатов, получаемых по программам для ЭВМ, влияющих на безопасность объектов использования атомной энергии [5], именно на нее мы опирались в данной работе. Обоснование безопасности объектов использования атомной энергии проводится с помощью интегрального кода ЕВКЛИД/V1.2 [6], а построение оценки неопределенности при помощи кода ВАРЯ [7], позволяющего варьировать параметры входных файлов расчетных кодов и обрабатывать полученные ими результаты.

Варьирование эффективности РО СУЗ проводилось с помощью изменения загрузки поглотителя. Проводились нестационарные нейтронно-физические расчеты без обратных связей для модели активной зоны реактора со свинцовым теплоносителем. Модель активной зоны состоит из 169 сборок, в том числе 6 ТВС с РО АЗ, 4 ТВС с РО АР, 12 ТВС с РО КР. Интервал варьирования эффективности РО СУЗ строится на основании погрешности, приведенной в аттестационном паспорте кода ЕВКЛИД/V1.2 [8]. Погрешность эффективности группы СУЗ АР составляет 10%. Был определен диапазон варьирования эффективности группы РО АР [0,52; 0,64]% П к/к. Использовалось равномерное распределение величины. На момент «0 сек» группа РО СУЗ АР была полностью выведена из активной зоны. Далее для РО АР была проведена серия расчетов, где реализовывался ввод стержней в активную зону.



Рисунок 1 – Кривые изменения реактивности и мощности для серии расчетов

Диапазон значений реактивности (Рис.1.а) на момент окончания моделирования «35 сек» составляет [0,52; 0,64] % k/k, что согласуется с изначально определенным диапазоном эффективности группы СУЗ АР. Для значения мощности (Рис.1.б) диапазон значений составил [53,6; 66,4] МВт на момент завершения расчета.

Результаты расчетов подтверждают возможность использования рассмотренной нами методики розыгрыша эффективности РО СУЗ для расчета проектной аварии. Выходные данные так же имеют равномерное распределение, как и исходная величина. Неопределенности эффективности РО СУЗ в 10% дают 10,7% неопределенности мощности на момент окончания расчета.

- 1. Руководство по безопасности при использовании атомной энергии «Рекомендации по оценке погрешностей и неопределенностей результатов расчетных анализов безопасности атомных станций» (РБ-166-20) (утверждено приказом Ростехнадзора № 288 от 30.07.2020).
- 2. Чертовских О. И., Белов А. А., Андрианова О. Н. Оценка неопределённости расчётов изотопного состава образцов уран-плутониевого нитридного топлива, облучённого в реакторе БН-600. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2024. № 1. С. 83-90.
- 3. IAEA, "Best Estimate Safety Analysis for Nuclear Power Plants: Uncertainty Evaluation. Safety Reports" Series No. 52. International Atomic Energy Agency, Vienna.
- 4. Glaeser H. GRS method for uncertainty and sensitivity evaluation of code results and applications // Science and Technology of Nuclear Installations, 2008. V. 2008, Article ID 798901.
- 5. Мосунова Н.А., Моисеенко Е.В. Методика оценки погрешностей и неопределенностей расчетных результатов, получаемых по программам для ЭВМ, используемых в целях построения расчетных моделей процессов, влияющих на безопасность объектов использования атомной энергии и (или) видов деятельности в области использования атомной энергии.
- Мосунова Н.А. Интегральный код ЕВКЛИД/V1 для обоснования безопасности реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем. Часть 1: базовые модели. //Теплоэнергетика, 2018, №5, с. 69–84.
- 7. E. Moiseenko, N. Mosunova, V. Strizhov, and D. Synitcyn. Uniform approach to validation of codes in application for conservative and realistic accidents modeling. BEPU-2024: Best Estimate Modelling Plus Uncertainties in Safety Analyses. May 19-24, 2024, Lucca, Italy
- Аттестационный паспорт программы для электронных вычислительных машин «Динамический интегральный универсальный расчетный код для анализа и обоснования безопасности реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями. Версия 1.2 (ЕВКЛИД/V1.2)» №462 от 30 мая 2019 г. (срок действия до 30 мая 2029 г.).

## Исследование влияния изотопного состава плутония на основные нейтронно-физические характеристики реактора типа БН

Чекаленко М.Е., студент ИАТЭ НИЯУ МИФИ

#### Исанов К.А., преподаватель ИАТЭ НИЯУ МИФИ

#### тел.: +7 (950) 898-65-84, эл. почта: margaritacekalencko@gmail.com

В данной работе проведено исследование влияния изотопного состава плутония на основные нейтронно-физические характеристики реактора типа БН. При обмене плутонием в двухкомпонентном ЯТЦ между тепловыми и быстрыми реакторами, а таже при улучшения изотопного качества накопленного плутония ОЯТ [1] реактор на быстрых нейтронах загружается плутонием различного изотопного состава.

В рамках данной работы рассматривался складской плутоний из ОЯТ тепловых реакторов и потенциальные виды плутония, получаемые из ОЯТ уран-плутониевого топлива реакторов ВВЭР.

В качестве расчетной модели был выбран реактор типа БН. Были определены необходимые доля и масса плутония подпитки в зависимости от качества используемого плутония, после вывода системы на стационар перегрузок для топливной кампании 330 эффективных суток. В дальнейшем было определено изменение нуклидного состава в течение кампании.

В ходе исследования был проведен расчет запасов реактивности, а также доли запаздывающих нейтронов на начало и конец микрокампании и числа мгновенных нейтронов деления, усредненного по спектру. Помимо этого, были рассчитаны, коэффициенты аксиального расширения топлива, эффект Доплера и натриевый пустотный эффект реактивности (НПЭР) [2] на начало и конец микрокампании. При расчете НПЭР рассматривались следующие сценарии опустошения: извлечение натрия из активной зоны реактора, опустошение натриевой полости, опустошение натриевой полости и концевиков ТВЭЛ и интегральный НПЭР. Затем проводилось физическое обоснование всех полученных величин.

В дальнейшем была определена масса минорных актинидов, выгружаемая ежегодно, в зависимости от качества используемого плутония.

- 1. Д. А. Клинов, А.В. Гулевич, В. А. Елисеев, В. И. Усанов, В. М. Декусар, И. В. Тормышев, И. В. Бурьевский, В. П. Долгих, В. А. Мишин Возможность облагораживания плутония в БН-800 // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. 2020. №2. С. 15-21.
- Ю.М Ашурко, К. А. Андреева, И. В. Бурьевский, А. В. Волков, В. А. Елисеев, А. В. Егоров, И. А. Кузнецов, Л. В. Коробейникова, В. И. Матвеев, Н. В. Соломонова, Ю. С. Хомяков, Исследование влияния натриевого пустотного эффекта реактивности на безопасность быстрого натриевого реактора большой мощности. Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. 2014. №3. С. 5-14.

### Определение критерия классификации трещин по водопроводимости в массиве горных пород методом ультразвукового каротажа

Чумаков А.А., м.н.с. ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: д.т.н. зав. лаб. ИБРАЭ РАН Гупало В.С. Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: +7 (915) 533-34-67, эл. почта: chumakov@ibrae.ac.ru

В соответствии с международным опытом исследований массивов скальных горных пород, рассматриваемых для глубинного захоронения РАО, особое внимание при их изучении уделяется параметризации трещинной сети, способной оказывать влияние на изолирующие свойства массива, в том числе на фильтрационные свойства.

Одним из основных методов оценки фильтрационных свойств массива являются опытнофильтрационные работы, заключающиеся в определении изменения дебитов водопоглощения в ограниченных интервалах скважины. При этом в обследуемом интервале могут находится несколько трещин с различными водопроводящими свойствами. Это вносит неопределенность в получаемые результаты, в части локализации конкретных водопроводящих участков массива.

Для классификации трещин по водопроводимости в массиве горных пород был использован метод ультразвукового каротажа. Предложена методика выполнения работ, заключающаяся в последовательном проведении опытно-фильтрационных работ и ультразвукового обследования. Так, после выполнения опытных нагнетаний в скважине часть трещин в следствие действия капиллярных сил на берегах трещин оказываются заполнены водой. Такие трещины называются капиллярными и в общих классификациях имеют среднее раскрытие 10<sup>-3</sup>-10<sup>-7</sup> м [1]. Дополнительно, для уточнения характерного раскрытия трещин в породах Енисейского участка были проведены лабораторные исследования по ультразвуковому прозвучиванию образца керна с изменяемым раскрытием трещины. Для оценки влияния раскрытия водозаполненной трещины на особенности прохождения упругой волны было применено два способа: изменение энергии сигнала во времени и расчёт отношения максимальной энергии сигнала в голове сигнала к минимальной в хвосте сигнала. Характерное раскрытие составило 150 мкм.

Дополнительно, для определения критерия выделения водозаполненной трещины было проведено компьютерное моделирование проведения ультразвукового каротажа скважины. Моделирование проводилось методом конечных элементов в среде COMSOL Multiphysics с использованием двух модулей: Elastic wave и Acoustic pressure. Для определения критерия выделения водозаполненной трещины в следствие действия капиллярных сил были проведены спектральный анализ упругих ультразвуковых волн и сравнение спектров для монолитного участка и участка с трещинами раскрытия (Рисунок 1).



Рисунок 1 – Амплитудные спектры фронтов волн длительностью 150 мкс для монолитного участка и участков с трещиной

Полученные результаты показали, что в случаях монолитного массива и при наличии водозаполненной трещины в спектре присутствуют два ярко выраженных пика в районах частот равных 50 кГц и 80 кГц, Однако в случае наличия водозаполненной трещины амплитуда гармоник 50 кГц и 80 кГц снижается на 10.5 дБ и 3.2 дБ, соответственно.

Проведённые лабораторные исследования и компьютерное моделирование показали возможность выделения водозаполненных трещин капиллярного раскрытия посредством ультразвукового каротажа на основе изменения спектральных характеристик сигнала.

#### Литература

1. Козлов, В. А. Действие сил капиллярно-вакуумного механизма проникновения воды в поверхностный слой мерзлой песчано-глинистой горной породы / В. А. Козлов // Горный информационно-аналитический бюллетень. – 2006. – № 11. – С. 14-18.

### Моделирование микрокампании экспериментальной сборки в активной зоне быстрого реактора с помощью связанного 3D кода

Шурыгин Р.Е., инженер ИБРАЭ РАН

Научный руководитель: к.т.н., и.о. зав. отделом ИБРАЭ РАН Колташев Д.А.

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

тел.: 7(495) 955-23-96, эл. почта: shurygin@ibrae.ac.ru

Проведение связанных мультифизичных расчетов позволяют учесть при реакторном моделировании влияние обратных связей. Использование трехмерных кодов позволяет также учесть возникновение различных неоднородностей, вызванных, например, конструктивными особенностями установки.

В ИБРАЭ РАН в рамках проекта «Коды нового поколения» проектного направления «Прорыв» развивается связанный 3D код MCT, который предназначен для моделирования режимов нормальной и нарушений нормальной эксплуатации реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями путем проведения связанных нейтронно-физических, гидродинамических и термомеханических расчетов.

В состав связанного 3D кода входят следующие модули: нейтронно-физические CORNER и MCU-FR, теплогидравлический CONV-3D и термомеханический TERMA.

Целью данной работы являлось расширение возможностей связанного 3D кода за счет включения в его состав модуля на базе кода BPSD, предназначенного для решения задачи изотопной кинетики, расчета активации и остаточного тепловыделения для материалов РУ, подвергающихся нейтронному облучению.

В качестве тестовой была выбрана задача по моделированию облучательного устройства с ампулами со свинцом (OУ-AC) в экспериментальном быстром реакторе с натриевым теплоносителем. Облучательное устройство – это чехловая сборка, содержащая 19 твэлов подогрева с виброуплотненным урановым топливом и 3 экспериментальные ампулы со свинцом, содержащие твэл со СНУП топливом.

На первом этапе был проведен расчет энерговыделения по коду MCU-FR, затем, используя полученные данные, был проведен расчет полей температур по коду CONV-3D и расчет напряжений и деформаций по коду TERMA.

После этого с помощью кода BPSD был проведен расчет выгорания в режиме 64 дня облучения и 2 дня планово-предупредительного ремонта (ППР). По результатам расчетов выгорание для экспериментальных твэлов составило от 0,3% до 1% т.а.

После ППР из экспериментальной сборки была извлечена одна ампула для послереакторных исследований, а на ее место была загружена свежая ампула. Сама сборка была перемещена в другую ячейку, ближе к боковому экрану.

На втором этапе в расчетной модели для кода MCU-FR было изменено положение OУ-AC на картограмме и были обновлены составы топлива в твэлах с учетом рассчитанного выгорания. Был проведен расчет энерговыделения. Максимальная разница энерговыделения на первом и втором этапах составляет 15% для экспериментальных твэлов и 17% для твэлов подогрева. Стоит отменить, что свежий и выгоревший твэлы со СНУП топливом имеют схожие энерговыделения. Различие на этапах обусловлено перестановкой сборки, а минимальное выгорание слабо влияет на энерговыделение.

По результатам данной работы выполнено моделирование экспериментальной сборки с помощью связанного 3D кода. Выгорание составило от 0,3 до 1% т.а. Максимальное изменение в энерговыделении для экспериментальных твэлов составило 15%.

Работы выполнены в рамках государственных контрактов № Н.40.241.19.21.1068 от 14.04.2021 года и № Н.40.241.19.24.1034 от 04.04.2024 года.

## Обоснование радиационной безопасности технологии обращения с радийсодержащими материалами

Юсупов А.Н., Губкина А.И., Ивахнова А.А., Галицкая Р.Р., Шарапова Т.В.

Акционерное общество

«Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов»

#### тел.: (84235) 7-96-16, эл.почта: anyusupov@niiar.ru

В АО «ГНЦ НИИАР» начаты работы по проектированию опытного образца технологической линии для отработки технологии получения препаратов на основе альфа-излучающих радионуклидов (далее по тексту – опытный образец). Проектируемый опытный образец предполагает сооружение совокупности взаимосвязанных радиационно-защитных камер и боксов в здании бывшей реакторной установки АСТ-1, в шахте которого в настоящее время расположено хранилище высокоактивных твёрдых радиоактивных отходов (ВТРО). На основании анализа возможности совместной эксплуатации инженерных систем здания в условиях взаимного расположения опытного образца и хранилища ВТРО сделан вывод о необходимости модернизации систем обращения с жидкими радиоактивными отходами, системы спецвентиляции и радиационного контроля.

На опытном образце предполагается обращение с радий содержащими материалами в различных агрегатных состояниях и температурных режимах. В процессе эксплуатации опытного образца основную опасность для населения будут представлять выбросы трудно сорбируемых радионуклидов <sup>220</sup>Rn и <sup>222</sup>Rn, что обусловило необходимость многоступенчатой очистки с применением как фильтров на основе ткани Петрянова, так и на основе активированного угля.

Для оценки радиационного воздействия на население проектируемого опытного образца использовалась модель, представленная в PБ-106-21 [1]. При этом, в модель был введён коэффициент, учитывающий накопление дочерних продуктов распада радона по мере движений радиоактивного облака в атмосфере. Также основываясь на анализе технологического процесса, принятых проектных решений, направленных на предотвращение распространения радиоактивных веществ, а также сведений о выходе радионуклидов радона из рабочего материала в зависимости от условий, представленных в работах [2-4], была проведена оценка величины годового выброса: ожидаемая величина годового выброса <sup>220</sup>Rn составляет 4,9·10<sup>10</sup> Бк/год, а <sup>222</sup>Rn – 1,9·10<sup>10</sup> Бк/год. Ожидаемый годовой выброс радиоактивных аэрозолей не превысит значения 3,0·10<sup>7</sup> Бк/год.

Согласно результатам расчётов критическая точка радиационного воздействия при эксплуатации опытного образца расположена на границе санитарно-защитной зоны на расстоянии  $\approx 3$  км от источника выброса. В качестве критической группы следует рассматривать взрослое население. При этом, ожидаемая годовая доза облучения критической группы населения в критической точке не превысит 0,02 мкЗв/год. На основании полученных результатов пересмотра действующей зоны наблюдения и санитарно-защитной зоны института, а также разрешения на выбросы не требуется.

В рамках анализа безопасности, в соответствии с требованиями [5,6], в качестве исходных событий нарушений нормальной эксплуатаций были рассмотрены следующие:

- внешние воздействия:
- метеорологические (смерч, ураган, ветер, экстремальный снегопад);
- сейсмические (землетрясение);
- техногенные (пожары, взрывы на соседних объектах).
- внутренние воздействия:
- отказ оборудования;
- ошибка персонала.

Из результатов анализа развития исходных событий следует, что облучение персонала, сверх уровней соответствующих нормальной эксплуатации опытного образца, при проектных авариях возможно только в случае краткосрочной (~60 с) потери разряжения между радиационно-защитными камерами и боксами и операторскими помещениями. Максимальная эффективная доза облучения персонала может составить 2 мЗв в результате ингаляционного поступления нелетучих радиоактивных материалов.

Наиболее тяжёлой, с точки зрения радиационного воздействия на население, является проектная авария, связанная с падением тяжёлого предмета внутри радиационно-защитной камеры. В результате падение возможна разгерметизация контейнеров с радиоактивными веществами. Годовая эффективная доза облучения критической группы населения в критической точке на границе санитарно-защитной зоны может достигнуть 29 мкЗв в течение первого года после аварии.

Таким образом, ожидаемые эффективные дозы облучения населения и персонала в результате аварий на проектируемом опытном образце не превысят основные пределы, установленные в соответствии с НРБ-99/2009. В соответствии с требованиями [7] проектируемому опытному образцу следует присвоить IV категорию потенциальной радиационной опасности.

- РБ-106-21. Рекомендуемые методы расчёта параметров, необходимых для разработки и установления нормативов предельно допустимых выбросов радиоактивных веществ в атмосферный воздух. – М.: ФБУ «НТЦ ЯРБ», 2021. – 80 с.
- 2. Бекман И.Н. Радий: учебное пособие. М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2010. 142 с.
- 3. Шашкин В.Л., Пруткина М.И. Эманирование радиоактивных руд и минералов. М.: Атомиздат, 1979. 112 с.
- 4. Сердюкова А.С., Капитонова Ю.Т. Изотопы радона и продукты их распада в природе. Изд.№2. М.: Атомиздат, 1975. – 296 с.
- 5. НП-016-05. Общие положения обеспечения безопасности объектов ядерного топливного цикла (ОПБ ОЯТЦ). –М.: Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору. 47 с.
- 6. НП-051-04. Требования к отчёту по обоснованию безопасности ядерных установок ядерного топливного цикла. М.: Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору. 85 с.
- 7. МУ 2.6.5.08-2019. Установление категории потенциальной опасности радиационного объекта. М.: ФМБА России, 2019. – 13 с.

# ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

## СБОРНИК ТЕЗИСОВ XXIV НАУЧНОЙ ШКОЛЫ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ИБРАЭ РАН

22-23 апреля 2025 г.

под общ. ред. акад. РАН Л. А. Большова

Оригинал-макет подготовлен ИБРАЭ РАН Иллюстрации приведены в авторской редакции

Электронное издание Гарнитура «Times New Roman», «Arial»