

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИБРАЭ РАН
доктор физико-математических наук



Л.В. Матвеев
2025 г.

Заключение

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
(ИБРАЭ РАН)

Диссертация Половникова Павла Васильевича на соискание ученой степени кандидата технических наук «Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении» выполнена в Лаборатории моделирования поведения тепловыделяющих элементов №75 Отделения разработки программного обеспечения для анализа безопасности АЭС ИБРАЭ РАН.

В 2014 году П.В. Половников окончил Московский Физико-Технический Институт (Государственный университет) по направлению «Прикладные математика и физика».

В 2018 году окончил аспирантуру ИБРАЭ РАН, где ему выдана справка о сдаче кандидатских экзаменов.

Научный руководитель – старший научный сотрудник ИБРАЭ РАН, кандидат физико-математических наук Тарасов Владимир Иванович.

В период подготовки диссертации соискатель П.В. Половников работал в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук в Лаборатории моделирования поведения тепловыделяющих элементов №75 Отделения разработки программного обеспечения для анализа безопасности АЭС на должностях техника, инженера и младшего научного сотрудника.

По итогам обсуждения диссертации П.В. Половникова «Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении» на семинаре Отделения разработки программного обеспечения для анализа безопасности АЭС ИБРАЭ РАН, состоявшегося 6.02.2025 года, принято следующее заключение.

Диссертация П.В. Половникова является ценной завершенной научно-квалификационной работой, результатами которой являются разработанные и имплементированные в топливный код MFPR усовершенствованные математические модели, описывающие влияние нейтронного облучения на микроструктуру и параметры ядерного топлива под облучением, а также рассчитанные параметры таких моделей.

Актуальность работы заключается в том, что разработка и постоянное совершенствование физико-математических моделей для твэльных кодов, а также оценка входящих в них параметров, являются важными задачами для современных реакторных технологий. Их актуальность продиктована жесткими требованиями к безопасности и эффективности ядерных реакторов. Механистические модели позволяют глубже понять сложные физические процессы в топливе под облучением, однако их предсказательная сила напрямую зависит от точности используемых в уравнениях микроскопических параметров. Применение методов атомистического моделирования (молекулярная динамика, кинетический Монте-Карло) для определения входящих в уравнения параметров позволяет существенно сократить объем дорогостоящих и длительных

экспериментов. Кроме определения параметров, разработка новых моделей на основе актуальной теории и экспериментальных данных напрямую влияет на надежность и предсказательную способность твэльных кодов, в которые имплементированы данные модели.

Таким образом, точность прогнозов твэльных кодов напрямую зависит от того, насколько полно имплементированные в них модели описывают весь спектр ключевых физических процессов в топливе и насколько корректны используемые в таких моделях микроскопические параметры.

Целью диссертационной работы являлась разработка усовершенствованных математических моделей влияния нейтронного облучения на микроструктуру, параметры ядерного топлива и выход продуктов деления с последующим внедрением полученных результатов в топливный код MFPR. В рамках диссертационного исследования поставленная цель была выполнена, для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

- определены параметры аtermальной диффузии в нитридном топливе;
- определены параметры мгновенного выхода продуктов деления из ядерного топлива под оболочку твэла по механизмам отдачи (recoil) и выбивания (knock-out);
- проведена разработка, верификация и валидация моделей, описывающих механизмы роста и коагуляции радиационных пор и пузырей, а именно: модель коагуляции подвижных внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена, модель коагуляции крупных пор в рим-зоне облученного топлива UO_2 в тепловых реакторах, модель «взрывного» распухания интерметаллидного уранового топлива;
- полученные результаты и разработанные модели имплементированы в топливный код MFPR.

Личный вклад соискателя заключается в:

- участии в постановке задач исследований, анализе литературы и обобщении результатов исследований других авторов;
- проведении молекулярно-динамических расчетов с помощью пакета прикладных программ LAMMPS и Монте-Карло расчетов с помощью пакета SRIM;
- выводе аналитических зависимостей, связывающих концентрацию пор с пористостью в рим-зоне облученного топлива и в интерметаллидных видах топлива;
- разработке численной схемы на основе метода Монте-Карло для моделирования эволюции пористости в материале топлива и интерпретации результатов расчетов;
- имплементации разработанных моделей, полученных зависимостей и рассчитанных параметров в топливный код MFPR.

Достоверность и обоснованность результатов работы подтверждается:

- сравнением полученных аналитических зависимостей с результатами численного моделирования аналогичных систем;
- сравнением получаемых расчетных результатов с имеющимися экспериментальными данными;
- соответствием полученных результатов и выводов (в том числе для хорошо изученных видов топлива) общепринятым понятиям, отраженным в научной литературе.

Научная новизна работы заключается в следующем:

- впервые рассчитаны коэффициенты аtermальной (радиационно-стимулированной) диффузии для нитридного топлива на основе совместного использования методов Монте-Карло и молекулярной динамики. Уточнены физические параметры, необходимые для описания механизмов мгновенного выхода продуктов деления из приповерхностной области топливной таблетки для нитридного и оксидного видов топлива;

– впервые разработана модель коагуляции подвижных внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена, позволяющая обосновать и уточнить существующие модели броуновской коагуляции пузырей и распухания топлива, использующие упрощенные подходы теории случайных блужданий. На основе разработанной модели получены более точные по сравнению с упрощенными подходами корреляционные выражения для ядра парных столкновений в уравнении Смолуховского, которые могут быть также применены для решения задач коагуляции аэрозолей, образующихся в результате выхода продуктов деления в атмосферу под защитной оболочкой реакторной установки;

– развита теория коагуляции малоподвижных пор на основе модели их слияния в процессе роста. На основе проведенных исследований впервые разработана модель коагуляции крупных пор в периферийной области таблетки («рим-зоне») облученного топлива UO_2 в реакторах на тепловых нейтронах, а также более сложная модель, описывающая «взрывное» распухание интерметаллидных соединений урана в процессе облучения в исследовательских реакторах.

Практическая значимость работы определяется тем, что найденные микропараметры внедрены в код MFPR, являющийся топливным модулем в аттестованных твэльных кодах БЕРКУТ-У и SFPR/C++, используемых для обоснования безопасности реакторов на быстрых и тепловых нейтронах. Кроме этого полученные результаты расширили возможности кодов и уточнили параметры моделей топлива, позволив точнее описывать образование газонаполненных пор и пузырей, изменение теплофизических свойств под облучением. Результаты моделирования с помощью метода Монте-Карло позволили описать распухание оксидного топлива в периферийной зоне тепловых реакторов и объяснить явление «взрывного» распухания в интерметаллидном топливе исследовательских реакторов.

Диссертация соответствует специальности 2.4.9 «Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность». Полученные в диссертационной работе результаты являются новыми, научно обоснованными. Их использование позволит повысить точность прогнозирования поведения твэлов в различных режимах эксплуатации. При заимствовании материалов в диссертации присутствуют ссылки на автора или источник заимствования материалов.

Все положения и результаты работы, выносимые на защиту, получены соискателем лично или при его непосредственном участии, с достаточной полнотой изложены в 4 печатных работах, опубликованных в журналах, входящих в международную реферативную базу данных Scopus.

Работа Половникова П.В. «Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении» рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.4.9 – Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность.

Заключение принято на заседании Отделения разработки программного обеспечения для анализа безопасности АЭС. На заседании присутствовало 65 человек, в том числе 22 кандидата наук и 5 докторов наук. Результаты голосования составили: «за» - 65 человек, «против» - 0 человек, «воздержались» - 0 человек.

Заместитель директора по
разработке интегрированных
программных комплексов
анализа безопасности
АЭС и ЯТЦ ИБРАЭ РАН
доктор технических наук



13.02.2025 Мосунова Настасья Александровна