

СЕКЦИЯ № 7 «РАСЧЕТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ЯДЕРНУЮ И РАДИАЦИОННУЮ БЕЗОПАСНОСТЬ ОИАЭ»

*Н.Л. Харитонова, к.т.н., Р.Б. Шарафутдинов, к.т.н., С.А. Шевченко, к.т.н.
(ФБУ «НТЦ ЯРБ»)*

Секция № 7 «Расчетное моделирование физико-химических процессов, влияющих на ядерную и радиационную безопасность ОИАЭ» является одной из «молодых» секций экспертного Совета Ростехнадзора по аттестации программных средств. Если Совет Ростехнадзора по аттестации программных средств отмечает свое 25-летие, то секция моделирования физико-химических процессов приближается к своему 15-летию юбилею. Разнообразие проблематики задач, решаемых программными средствами, которые рассматриваются секцией № 7, определяется многообразием разделов физической химии, к которым относятся химическая термодинамика (включая статистическую химическую термодинамику и термохимию), химическая кинетика, катализ, теория растворов, поверхностные явления, радиационная химия, коллоидная химия, электрохимия, кристаллохимия и др.

ПС, проходящие экспертизу и аттестацию (то есть процедуру признания возможности использования этих ПС в заявленной области применения, а также получения с использованием ПС значений расчетных параметров с определенной погрешностью) в секции №7, можно условно разделить на две основные группы:

- (1) для расчета задач моделирования физико-химических процессов, протекающих в системах и элементах энергоблоков атомных станций, в рамках обоснования обеспечения безопасности атомных станций;
- (2) для расчета задач геофильтрации и геомиграции в рамках учета факторов воздействия источников загрязнения на геологическую среду и обоснования безопасности захоронений РАО.

В статье приведено краткое описание ПС, проходящих экспертизу в секции № 7 в настоящее время и тех, которые были предметом рассмотрения секции № 7 в последние годы её работы. Кроме того, обсуждаются проблемы верификации расчетных моделей, с которыми столкнулись эксперты при рассмотрении этих программ.

1. Программные средства для моделирования физико-химических процессов, протекающих в системах и элементах энергоблоков атомных станций

Физико-химические процессы в системах и элементах энергоблоков АЭС (коррозия конструкционных материалов, изменение форм существования примесей, присутствующих в контуре циркуляции теплоносителя, распределение примесей и продуктов коррозии между теплоносителем и парогазовой средой, осаждение твердых соединений на поверхностях контура циркуляции теплоносителя, взаимо-

действие примесей и продуктов коррозии с различными добавками, корректирующими химический режим рабочих сред) происходят в условиях нагрева рабочей среды, парообразования, упаривании и конденсации, то есть в условиях протекания определенных теплофизических процессов. Поэтому необходимо всегда учитывать тесную связь и влияние теплофизических параметров на протекание физико-химических процессов, т.е. моделирование физико-химических процессов должно рассматриваться в связи с условиями теплообмена и гидродинамики. С другой стороны, теплофизические и физико-химические процессы протекают внутри отдельных систем и элементов, выполненных из различных *конструкционных материалов*. Это определяет необходимость системного, а не разобщенного подхода к решению существующих задач таких, например, как:

- обоснование водородной пожаро- и взрывобезопасности;
- снижения эрозионно-коррозионного износа элементов оборудования и трубопроводов АЭС;
- расчет массопереноса и накопления активированных продуктов коррозии в контурах циркуляции теплоносителя.

1.1 Обоснование водородной пожаро- и взрывобезопасности

Одной из важнейших проблем безопасности АЭС с водоохлаждаемыми реакторными установками (РУ) является водородная взрывобезопасность. Наличие водорода является неотъемлемым условием работы РУ с водяным теплоносителем. Неконтролируемая утечка и возможность горения и/или взрыва водородсодержащих смесей в РУ и гермопомещениях АЭС могут привести, в конечном счете, к нарушению целостности контаймента и выходу активности за пределы АЭС, в количествах, многократно превышающих проектные пределы. Проблема обоснования водородной взрывобезопасности является актуальной и для условий нормальной эксплуатации, что подтверждается неоднократными нарушениями, отмеченными на российских и зарубежных энергоблоках с ВВЭР, где было зафиксировано возгорание гремучей смеси в коллекторах парогенераторов и «хлопки» гремучей смеси под крышкой реактора при нахождении РУ в «холодном» состоянии.

В настоящее время в секции №7 проводится экспертиза верификационных материалов ПС «МОРАВА-Н2» (АО ОКБ «ГИДРОПРЕСС»), предназначенного для расчёта образования водорода и других газов и распределения этих газов, а также технологических добавок теплоносителя в оборудовании первого контура реакторных установок с ВВЭР. ПС «МОРАВА-Н2» применяется для обоснования водородной пожаро- и взрывобезопасности оборудования первого контура реакторных установок с ВВЭР, а также для анализа химического состава теплоносителя при разработке и обосновании норм водно-химического режима первого контура и при расследовании инцидентов, связанных с нарушениями водно-химического режима первого контура.

1.2 Расчетное моделирование эрозионно-коррозионного износа элементов оборудования и трубопроводов атомных станций

Устранение проблемы эрозионно-коррозионного износа (ЭКИ) элементов оборудования и трубопроводов АЭС признано одним из важнейших направлений деятельности концерна «Росэнергоатом». Проблему ЭКИ начали интенсивно изучать после крупной аварии по причине ЭКИ на АЭС США «Сарри-2» в 1986 г. После не менее крупной аварии на японской АЭС «МИХАМА» в 2004 г. работы по изучению ЭКИ еще более интенсифицировались. Ряд аварий на зарубежных и отечественных АЭС, причиной которых явился ЭКИ элементов трубопроводов, изго-

товленных из углеродистых сталей, послужили основанием для разработки отечественных ПС расчета скорости ЭКИ. Для оценки ЭКИ элементов оборудования и трубопроводов АЭС аттестованы следующие ПС:

- ПС «ЭКИ-02» и «ЭКИ-03» (АО «ВНИИАЭС»), предназначенные для расчета скорости ЭКИ и средней скорости ЭКИ стенок трубопроводов второго контура на АЭС с ВВЭР-440. Срок действия аттестационных паспортов ПС «ЭКИ-02» и «ЭКИ-03», аттестованных в начале 2000-х годов, истек, поэтому на основании п.16 РД-03-33-2008 проводится процедура продления сроков действия указанных аттестационных паспортов.

- ПС «РАМЭК-1» (ЗАО «ГЕОТЕРМ»), аттестованное применительно к АЭС с реакторными установками ВВЭР-1000» (АП № 359 от 14.10.2014) и применительно к АЭС с реакторными установками ВВЭР-440 и БН-600» (АП № 331 от 18.04.2013), предназначено для проведения расчетов скорости эрозии-коррозии в однофазном (жидком) водном теплоносителе основного металла трубопроводов и оборудования конденсатно-питательного тракта, изготовленных из перлитной стали. Экспертиза отчета о верификации и проекта аттестационного паспорта ПС «РАМЭК-1» проходила сложно, поскольку эксперты не могли прийти к единому мнению относительно результатов проведенной разработчиком ПС «РАМЭК-1» верификации. Особое внимание экспертов было уделено оценке погрешности результатов расчетов.

Стоит отметить, что существующие в настоящее время расчетные модели ЭКИ обладают значительными неопределенностями, что безусловно сказывается на обеспечиваемой такими ПС точности в области их применения. Именно поэтому экспертным Советом по аттестации ПС было принято решение о необходимости, регулярного подтверждения погрешности расчета. Для этих целей разработчик ПС должен раз в три года проводить сопоставление получаемых с применением данного ПС расчетных результатов с новыми данными эксплуатационного контроля элементов трубопроводов и оборудования (толщинометрии), полученными на энергоблоках АЭС с реакторами ВВЭР-1000, ВВЭР-440 и БН-600.

1.3 Решение задач по массопереносу и накоплению активированных продуктов коррозии в первом контуре ВВЭР

Для расчета накопления стабильных и активированных продуктов коррозии в активной зоне и на поверхностях оборудования первого контура энергоблоков с ВВЭР в настоящее время в секции №7 проводится работа по продлению срока действия аттестационного паспорта № 204 от 28.07.2005 ПС «СОТРАН-М» (РНЦ КИ). Верификация ПС «СОТРАН-М» была выполнена путем сопоставления результатов расчета по ПС «СОТРАН-М» с имеющимися экспериментальными данными, полученными на энергоблоках АЭС с ВВЭР-1000 (проект РУ В-320). Однако с помощью ПС «СОТРАН-М» проводились расчеты при обосновании безопасности водно-химического режима первого контура энергоблоков ВВЭР-1200 (проект РУ В-392М и В-491 – ЛАЭС-2). В частности, с помощью ПС «СОТРАН-М» для энергоблоков ВВЭР-1200 проводилось обоснование координирующей зависимости между молярной концентрацией ионов щелочных металлов (калия, лития и натрия) в теплоносителе первого контура от текущей концентрации борной кислоты.

В этой связи необходимо отметить, что повышение тепловой мощности ТВС и активной зоны энергоблоков ВВЭР-1200 по сравнению с энергоблоками ВВЭР-1000 (РУ-320) увеличивает вероятность и интенсивность локального кипения («подкипания») теплоносителя на поверхности оболочек твэлов (массовое паросодержание на выходе из горячего подканала для энергоблоков ВВЭР-1200 составляет согласно проекту 11,4 %, а для энергоблоков ВВЭР-1000 – 5 %). Это, в свою

очередь, согласно опыту эксплуатации зарубежных АЭС может приводить к проблеме образования на поверхности твэлов отложений продуктов коррозии, в порах которых имеет место локальное концентрирование («хайд-аут») соединений бора. Указанные явления при разработке и верификации ПС «CONTRAN-M» не принимались во внимание и требуют дополнительной верификации ПС.

2. Программные средства для расчета задач геофильтрации и геомиграции в рамках учета природных и техногенных факторов воздействия источников загрязнения на геологическую среду и обоснования безопасности захоронений РАО

Наиболее полный учет природных и техногенных факторов воздействия источников загрязнения на геологическую среду достигается математическим моделированием геофильтрационных и геомиграционных процессов распространения загрязнения в подземных водах.

В этой части секцией аттестованы разработанное в ЗАО «Геоспецэкология» ПС «GEON-3D/ GEON-3DM (аттестационный паспорт №294 от 14.04.2011) и разработанное в Томском политехническом университете ПС «HYDRO GEO» (аттестационный паспорт № 274 от 13.05.2010).

ПС «GEON-3DM» предназначено для трехмерного моделирования геофильтрации и геомиграции с учетом плотностных эффектов и позволяет:

- учитывать плотность подземных вод за счет не только концентрации нитрата натрия, но и других химических компонент (сульфатов, ацетатов и т.д.);
- моделировать разломы с помощью специальных граничных условий на соответствующих внутренних межблочных границах;
- разделить области моделирования по сетке геологических разломов;
- осуществить аппроксимацию границ сеточным разбиением;
- провести автоматизированную калибровку модели.

ПС «HYDRO GEO» аттестовано для выполнения оценочных геотермических (температурное поле водоносного пласта) и гидрогеохимических (фильтрационно-емкостные свойства пород, водородный показатель pH, окислительно-восстановительный потенциал Eh, химический состав и газонасыщенность пластовой воды) расчетов, для моделирования геомиграции радионуклидов и неактивных компонентов при удалении жидких РАО низкого уровня активности в глубинные водоносные горизонты.

По состоянию на декабрь 2016 г. секцией №7 проводится экспертиза следующих ПС, предназначенных для расчета задач геофильтрации и геомиграции в рамках обоснования безопасности захоронений РАО, обоснования концепции радиационно-миграционной эквивалентности захоронений, решения обратных задач по определению приемлемых характеристик РАО, направляемых на захоронение.

ПС «ГЕОПОЛИС» (ИБРАЭ РАН) предназначено для моделирования распространения компонентов закачиваемых на полигоне «Северный» жидких радиоактивных отходов в геологической среде. Рассматриваемое ПС (геофильтрационная и геомиграционная модели) настроено на геоморфологические, геологические и гидрогеологические особенности конкретного объекта – полигона «Северный» (площадка ФГУП «ГХК»). Разработчиками ПС «ГЕОПОЛИС» делается попытка решения сразу двух проблем:

- первая проблема объединяет комплекс задач, связанных со схематизацией природных геолого-гидрогеологических условий, обоснованием структуры гидрогеологической модели, процессов и параметров, описывающих фильтрацию подземных вод в водоносных горизонтах и разделяющих их слоях, а также миграцию в них техногенных (радиоактивных) растворов;

- вторая проблема – создание, тестирование и верификация математического аппарата, способного адекватно описывать геофильтрационный и геомиграционный процессы, протекающие в пластах-коллекторах.

ПС «GeRa / v.1» (ИБРАЭ РАН) разработано по заказу Госкорпорации «Росатом» в рамках проекта «Коды нового поколения» проектного направления «Прорыв». Область его применения являются гидродинамические и геомиграционные расчеты на площадках проектируемых и существующих глубинных и приповерхностных пунктов захоронения твердых и жидких радиоактивных отходов, а также иных ОИАЭ, потенциально оказывающих воздействие на грунтовые воды. С помощью ПС возможно рассчитывать следующие параметры: напор, поток грунтовых вод; концентрацию или активность загрязнителей в грунтовых водах. Верификация ПС «GeRa / v.1» в заявленной области проведена на 28 тестовых примерах (аналитические тесты и кросс-верификация с другим аналогичными ПС). ПС «GeRa/v.1» представляется к аттестации в качестве инструмента для:

- гидрогеологического моделирования;
- проведения прогнозного и эпигнозного численного моделирования распространения радионуклидов и химических загрязнений в геологической среде;
- обоснования безопасности объектов ядерного наследия, потенциально способных оказывать воздействие на грунтовые воды.

ПС «НИМФА» (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и ФГБУ «Гидроспецгеология») предназначено для численного моделирования нестационарных трехмерных неизо-термических геофильтрационных и геомиграционных потоков локального и регионального масштаба в напорных водоносных горизонтах, неоднородных по физическим свойствам. К основному преимуществу ПС «НИМФА», по сравнению с аналогичными ПС, можно отнести высокую точность и скорость вычислений за счет применения:

- схем повышенного порядка точности при решении уравнений тепло-массо-переноса;
- параллельного генератора неструктурированных сеток общего вида и их адаптации к объектам моделирования;
- суперкомпьютерных технологий, используемых для существенного сокращения времени проведения расчетов и обеспечения высокой точности при моделировании больших территорий.

3. Оценка моделей физико-химических процессов, реализованных в интегральных программных средствах

Эксперты секции № 7 также принимают участие в проводимых другими секциями Совета оценках комплексных мультифизичных ПС, в которых в том числе реализованы модели различных физико-химических процессов, определяющих безопасность при эксплуатации ОИАЭ.

Например, при экспертизе ПС «СОКРАТ-БН» (предназначено для анализа и обоснования безопасности АЭС с реакторами типа БН, обеспечивает «сквозной» расчет параметров реакторной установки, важных для безопасности) экспертами секции № 7 проводилась оценка верификации в части расчетов поведения радионуклидов (продуктов деления топлива и активированных продуктов коррозии) в системах РУ с натриевым теплоносителем. В результате экспертизы из аттестуемой области применения ПС «СОКРАТ-БН» была исключена возможность расчета накопления активированных продуктов коррозии на поверхностях оборудования, поскольку было показано, что разработчиком не приведены и не обоснованы критерии осаждения и смыва радионуклидов с поверхностей оборудования.

При экспертизе ПС «GARRIC_2.2» (предназначено для расчета распределения неконденсирующихся газов в первом контуре в стационарных режимах работы водо-водяного реактора интегральной компоновки) экспертами секции № 7 рассматривалось обоснование ПС в части расчета процессов растворения и выделения газа из жидкой фазы, а также расчета равновесных концентраций аммиака, азота и водорода в теплоносителе. Экспертами секции № 7 был выполнен сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных по константам Генри для неконденсирующихся газов (кислорода, водорода, азота, гелия и ксенона) при повышенных температурах и давлениях. По результатам экспертизы было показано, что в расчетной модели ПС «GARRIC 2.2» использовались данные 1952 – 1967 гг по растворимости инертных газов в воде в области температур только до 316°C, отличающиеся от рекомендаций Международной ассоциацией по свойствам воды и водяного пара. В результате разработчиком в ПС «GARRIC_2.2» была реализована возможность расчёта растворимости и констант Генри неполярных газов (k_H) в широком диапазоне температур (вплоть до значений, близких к критике) по рекомендациям МАСВП.

В результате экспертизы ПС «КОРСАР-BR» (предназначено для численного моделирования стационарных состояний, переходных и аварийных режимов реакторных установок с реакторами блочной и интегральной компоновки и с водо-водяными энергетическими реакторами) экспертами секции № 7 были сформулированы рекомендации по верификации расчетной модели источников поступления в контур РУ неконденсирующихся газов.

При экспертизе программы ПС «КУПОЛ-М» (предназначено для расчета параметров среды в помещениях герметичного ограждения при различных условиях на АЭС) экспертами секции № 7 были отмечены замечания к обоснованности расчета концентраций компонентов парогазовой среды в помещениях герметичного ограждения и моделирования функционирования системы аварийного удаления водорода на основе каталитических рекомбинаторов водорода. При экспертизе были учтены результаты международных проектов SAMARA – ERCOSAM, в рамках которых выполнялось изучение стратификации водорода и влияние систем безопасности на стратифицированную атмосферу.

Заключение

Несмотря на то, что секция № 7 была сформирована значительно позже остальных тематических секций экспертного Совета по аттестации ПС, представленные в настоящей статье итоги 15-летней работы секции свидетельствуют о неоспоримой актуальности ПС, используемых для моделирования физико-химических процессов на ОИАЭ.

Опыт выполненной специалистами секции № 7 экспертизы ПС, предназначенных для расчета задач геофильтрации и геомиграции захоронений РАО, и ПС, предназначенных для моделирования физико-химических процессов, протекающих в системах и элементах энергоблоков атомных станций, может стать основой для соответствующих руководств по безопасности, содержащих рекомендации по верификации указанных выше ПС.

