



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

Расчетная оценка безопасности внереакторных технологий ЗЯТЦ: задачи и система кодов

XVII Международная конференция
«ЗАБАБАХИНСКИЕ НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ»
19-23 мая 2025 года, г. Снежинск

**Инга Равильевна Макеева, Н.Д. Дырда, И.В. Пешкичев,
О.В. Шмидт**

Введение

В настоящее время практически не существует верифицированных и аттестованных кодов для моделирования технологических процессов вне реакторной части топливного цикла

Безопасность технологических процессов радиохимических производств обосновывается, в основном, с использованием специальных экспериментов, моделирующих условия технологических процессов, либо по опыту эксплуатации аналогичных производств

Экспериментальный подход ограничивает высокая активность материалов, невозможность промоделировать большое число нештатных ситуаций

Создание интегральных расчетных моделей, предназначенных для обоснования безопасности технологических переделов замкнутого ядерного топливного цикла и проведения комплексного моделирования и оптимизации параметров и компоновок технологий и производств ЗЯТЦ

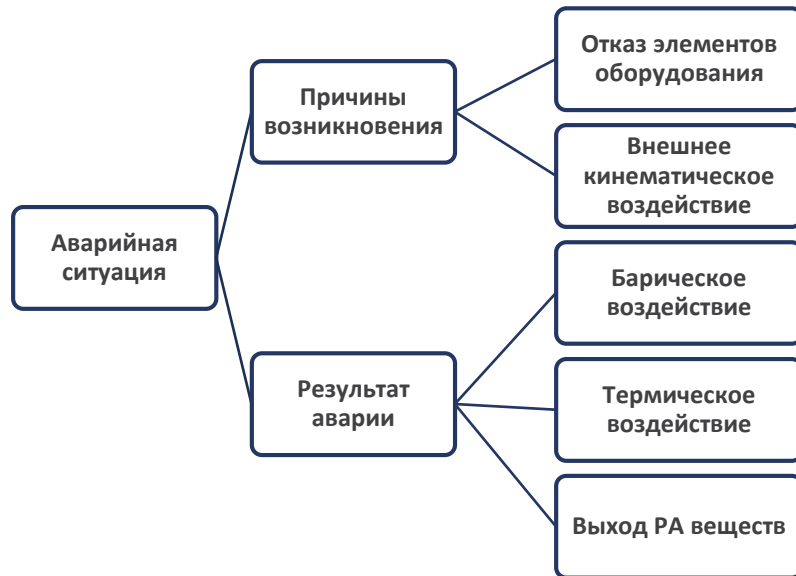
Основные цели расчетной оценки безопасности

Определение пределов безопасного функционирования аппаратов, узлов, производства в целом

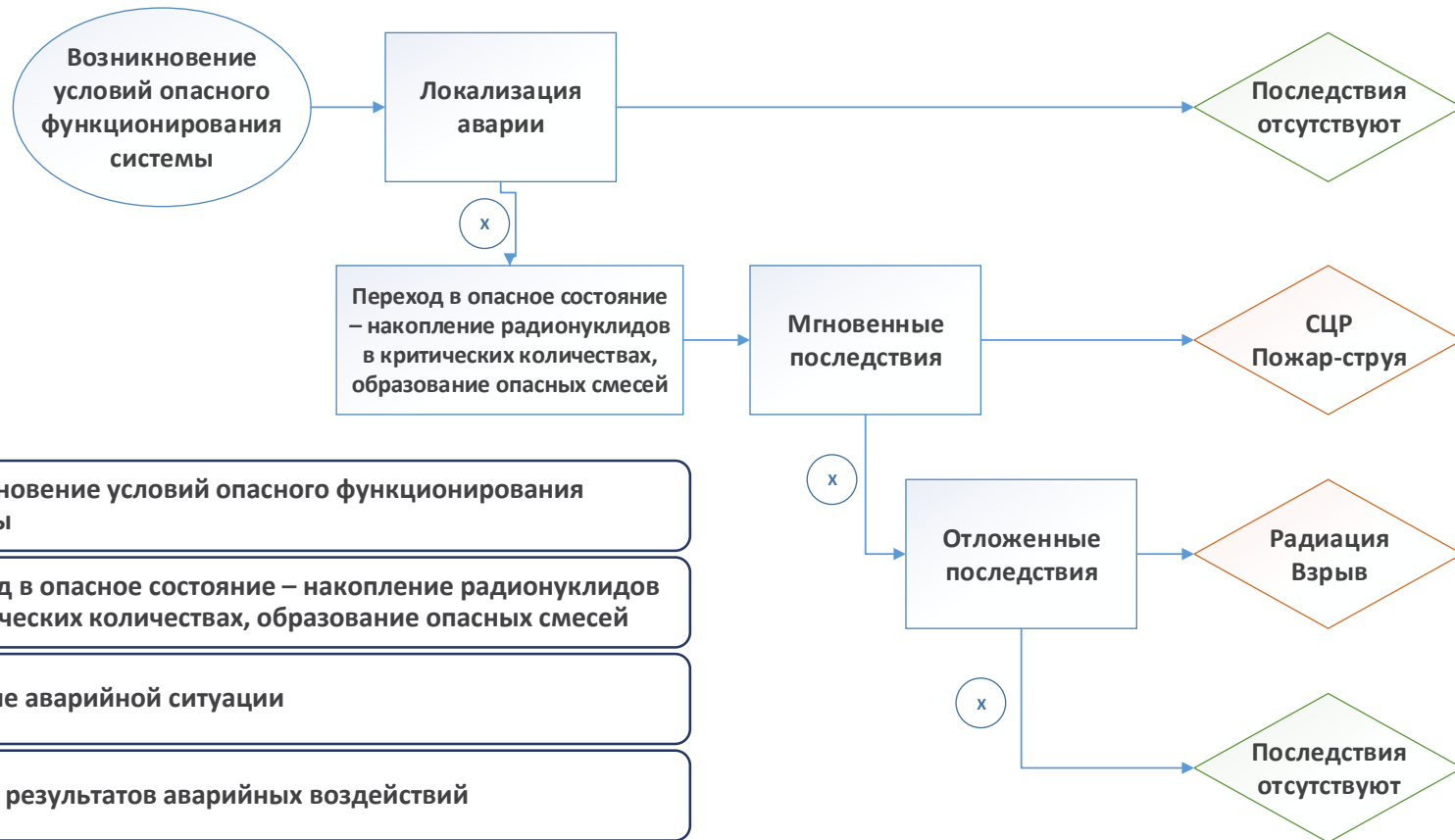
Определение максимальных уровней опасных воздействий при аварийных ситуациях

Определение требований к конструкционным материалам, защитным барьерам, системам безопасности и реагирования в аварийных ситуациях

Оценка достаточности защитных барьеров, систем безопасности и реагирования в аварийных ситуациях



Аварийный сценарий





Подходы к моделированию

Макромодели

Физ.-хим.
процессы
(растворение,
электролиз)

Элементы
оборудования
(вентилятор,
фильтр)

Малая
длительность
расчета

Предсказательная
способность в
ограниченном
диапазоне
изменения
параметров

МСС

Перенос и
перемешивание
веществ

Распространение
тепла

Взаимодействие
потоков с
элементами
конструкций

Предсказательная
способность в
широком
диапазоне
изменения
параметров

Большая
длительность
расчета, более
сложная
верификация и
валидация

Типы задач моделирования технологических процессов и аппаратов



РФЯЦ-ВНИИТО
РОСАТОМ

Нормальные режимы эксплуатации

- Выбор, обоснование, оптимизация режимов и характеристик оборудования
- Модели технологических процессов (растворение, фильтрация, электролиз)

Отклонения от нормальных режимов

- Модели управления техпроцессом
- Каким воздействием можно вернуть в штатный режим?

Проектная авария

- Оценка последствий
- Консервативные методы (методики НТЦ ЯРБ)

Запроектная авария

- Оценка последствий аварийных ситуаций
- Реалистичные коды (CFD)

- Для моделирования нормальных режимов эксплуатации, включая пусковые и остановочные, необходимо упрощение моделей МСС – несжимаемые, несмешивающиеся жидкости и т.д.
- Результаты моделирования нормальных режимов являются исходными данными для моделирования аварийных ситуаций
- Необходимо уточнение сценариев аварии
- Возможно сквозное моделирование

Диапазоны значений параметров в различных режимах



Моделирование типовой аварийной ситуации



Основные опасности, их источники и условия возникновения на радиохимических производствах



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

	Источник опасности	Условия возникновения
Ядерная опасность	Накопление радионуклидов в аппаратах, трубопроводах и промежуточных емкостях в критических количествах	<ul style="list-style-type: none">• Застойные зоны• Нештатные ситуации
Радиационная опасность	Накопление радионуклидов в аппаратах, емкостях, таре и промежуточных хранилищах Нарушение защитных барьеров	<ul style="list-style-type: none">• Застойные зоны• Изменение состава рабочих сред• Нештатные ситуации
Пожаро-взрыво-опасность	Образование и/или использование горючих сред Переход горючих сред в состояние, соответствующее критериям воспламенения	<ul style="list-style-type: none">• Нарушение технологического режима• Изменение состава рабочих сред• Отказ или неисправность инженерного оборудования• Внешние воздействия
Опасность выхода РВ в окружающую среду	Нарушение барьеров безопасности	<ul style="list-style-type: none">• Экстремальные режимы технологических процессов• Нештатные и аварийные ситуации, в том числе отказ оборудования• Износ, в т.ч. коррозионный, оборудования• Внешние воздействия

Требования к моделям и кодам

- Накопление радионуклидов в аппаратах, трубопроводах и промежуточных емкостях
- Нарушение защитных барьеров
- Образование и/или использование горючих сред
- Переход горючих сред в состояние, соответствующее критериям воспламенения
- Застойные зоны
- Изменение состава рабочих сред

- Модели механики сплошной среды
- Тепломассоперенос
- Химические реакции, нуклидная кинетика
- БД характеристик рабочих сред, включая критерии воспламенения
- Геометрические характеристики оборудования
- Изменение состава рабочих сред

Требования к моделям и кодам

- Нештатные ситуации
- Нарушение технологического режима
- Отказ или неисправность инженерного оборудования
- Внешние воздействия
- Экстремальные режимы технологических процессов
- Износ, в т.ч. коррозионный, оборудования

- Аварийные ситуации и сценарии
- Граничные условия
- Характеристики конструкционных материалов
- Характеристики защитных барьеров
- БД параметров технологических процессов

Требования к моделям



Требование	Реализация
<p>Расчет характеристик рабочих сред в зависимости от времени:</p> <ul style="list-style-type: none">• Распределение плотности• Поля давлений, температур, концентраций• Учет застойных зон• Учет химических превращений, в т.ч. образование горючих смесей• Учет фазового состояния	<p>ПК CFD-CNFC – моделирование теплопереноса в многокомпонентных химически реагирующих средах с учетом протекающих в узлах и аппаратах ЗЯТЦ физико-химических процессов</p>
<p>Расчет нагрузки на конструкцию аппарата, камеры, каньона</p>	
<p>Методика оценки пожаровзрывобезопасности</p>	<p>ПК FIREX (разрабатывается совместно с НТЦ ЯРБ)</p>
<p>Изменение прочностных характеристик конструкционных материалов и защитных барьеров в зависимости от времени</p>	<p>–</p>
<p>Расчет критериев безопасности на основе информации о состоянии в узле, аппарате, камере, каньоне</p>	<p>Согласованные форматы выходных файлов, автоматизация системы подготовки расчета</p>

Типовые аварийные ситуации

Пожаровзрывоопасные

- нарушение параметров инертной атмосферы, связанное с разгерметизацией бокса или изменением состава газового потока;
- потеря теплосъема из-за отказа охлаждающей системы;
- накопление водорода и/или газообразных углеводородов из-за радиолиза рабочих сред;
- поступление растворов, температура которых выше рабочей из-за нарушения технологического режима;
- радиационно-термическая деструкция компонентов технологической среды, приводящая к образованию горючих веществ;
- осушение колонки с сорбентом из-за отказа инженерных систем;
- попадание примесей в технологическую среду, приводящих к ускорению/появлению дополнительных химических реакций, не характерных для нормальной эксплуатации;
- нарушения в режиме дозирования компонентов, приводящее к изменению состава технологической среды и протеканию реакций, отличных от режима нормальной эксплуатации.

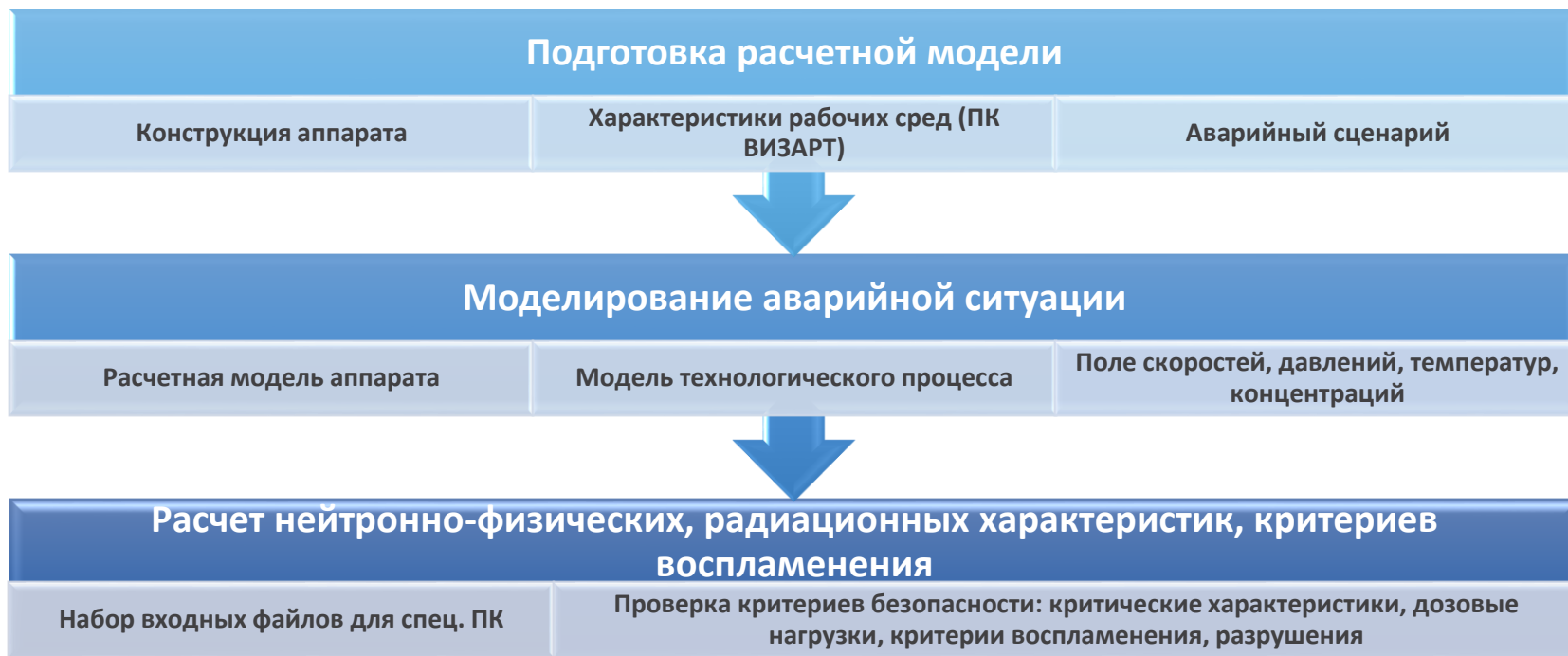
Радиационноопасные

- Накопление радионуклидов в аппаратах, емкостях, таре и промежуточных хранилищах, приводящее к превышению допустимого уровня ионизирующего излучения;
- Выход радионуклидов за пределы защитных барьеров в результате нарушения их целостности под воздействием экстремальных давлений и температур или длительной эксплуатации в агрессивной среде;
- Попадание растворов с РВ в защитные камеры при переливах, попадание РВ на следующие стадии ЦСГО в результате проскоков на фильтрах.

Ядерноопасные

- Накопление радионуклидов в критических количествах из-за сбоев в работе оборудования, из-за нарушения технологических режимов, из-за образования застойных зон

Общий подход к моделированию



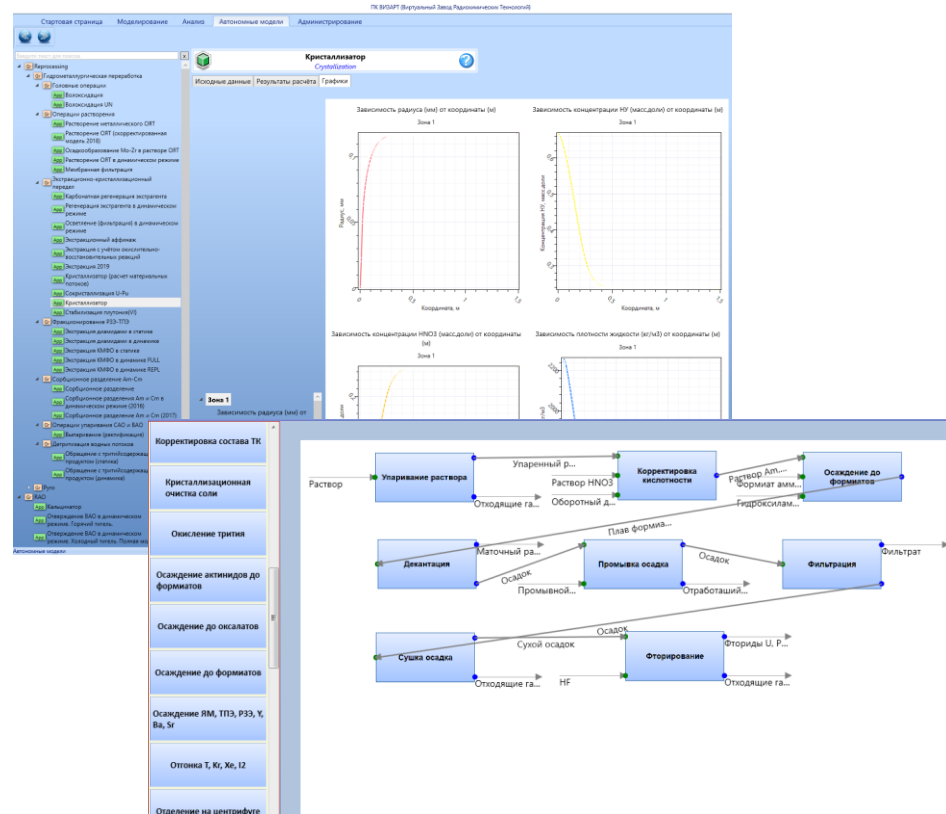
Компоненты системы кодов для расчетной оценки безопасности

Компоненты	Состояние
ПК ВИЗАРТ, MCU, ODETTA...	Разработаны, используются
Модели технологических процессов	Разработаны, будут внедрены в CFD-CNFC
БД характеристик веществ, процессов, оборудования	Разработаны, пополняются
Сценарии аварийных ситуаций	Подготовлен список типовых аварийных ситуаций
ПК FIREX – оценка критериев воспламенения	Разрабатывается
ПК CFD-CNFC – моделирование теплопереноса в многокомпонентных химически реагирующих средах	Разрабатывается



Исходные данные для моделирования

- ПК ВИЗАРТ – характеристики рабочих сред: расходы, составы, массы, плотности, активности, тепловыделение
- Автономные модели ПК ВИЗАРТ – параметры процессов: температура, давление, кислотность...



Многокомпонентный CFD модуль для моделирования гидродинамических процессов в аппаратах ЗЯТЦ

Моделируемые процессы

- газодинамический перенос энергии и массы,
- выделение энергии в ходе самопроизвольных распадов
- взаимодействие между компонентами рабочих сред,
- химические реакции (включая горение и детонацию),
- выделение энергии, обусловленное химической реакцией,
- движение дисперсных частиц,
- перемешивание растворов,
- теплообмен между дисперсной и сплошной фазой,
- фазовые переходы

Объекты моделирования

- защитная камера,
- фильтры локальной системы газоочистки,
- пенал с ОТВС,
- установка волоксации ОЯТ,
- аппарат-растворитель,
- установка электрохимической стабилизации,
- экстрактор,
- установка доизвлечения ЯМ,
- сепаратор,
- кристаллизатор,
- выпарной аппарат,
- печь СВЧ денитрации,
- емкости,
- хроматографическая колонна,
- установка детритизации,
- аппарат-плавитель,
- ИПХТ

Программа для ЭВМ FIREX

Назначение

Расчетная оценка пожаровзрывоопасных показателей технологических сред, в которых присутствуют горючие газы, горючие жидкости, конденсированные вещества и смеси, пирофорные материалы

Функционал

Программа для ЭВМ FIREX позволяет рассчитывать следующие показатели пожаровзрывоопасности:

Базы данных

- свойства изотопов (на основе данных ENDFB-VII) для расчета суммарной поглощенной дозы и тепловыделения
- пожароопасные свойства веществ и материалов

Горючие газы

- скорость наработки ГГ под действием ионизирующего излучения
- скорость накопления ГГ в оборудовании и трубопроводах технологических узлов
- нижний концентрационный предел распространения пламени для смеси ГГ

Горючие жидкости

- скорость наработки ГЖ под действием ионизирующего излучения
- интенсивность испарения и концентрация паров ЛВЖ и ГЖ
- температурный предел распространения пламени
- температура вспышки смесей ГЖ

Конденсированные вещества и смеси

- критическая температура возникновения теплового взрыва
- период индукции теплового взрыва

Пирофорные материалы

- интенсивность тепловыделения
- интенсивность выделения газообразных продуктов реакции

Оценка последствий

- максимальные давления и температуры, которые могут возникнуть в оборудовании и помещении в случае воспламенения рабочих сред

База данных характеристик веществ, процессов и оборудования. Состав БД

Свойства веществ и рабочих сред

- термодинамические характеристики: изобарная теплоёмкость, энтропия, энтальпия, энергия Гиббса, энтальпия образования, энергия Гиббса образования, их зависимости от температуры и давления
- физико-химические свойства: плотность, модули упругости, пределы текучести, пластичности, вязкость и т.п., необходимые для описания процессов

Характеристики процессов

- экспериментальные данные: зависимости описывающие протекание технологического процесса при заданных технологических режимах
- кинетические параметры процессов (например, константы скорости реакций)
- условия (технологические режимы) проведения процессов: температурно-временные характеристики, концентрации компонентов, давление в системе, расходы реагентов
- критические характеристики процессов (предельные диапазоны давлений, температур, предельно допустимые накопления ЯМ...)

Характеристики оборудования

- геометрические размеры оборудования,
- конструкционные материалы,
- производительность,
- мощность ...

Применение программного кода FIREX

Расчетная поддержка экспериментов АО «ВНИИНМ»

Задача

Расчет скорости наработки водорода под действием ионизирующего излучения в постановках, соответствующих трем сериям экспериментов по [радиолизу азотнокислых растворов ОЯТ](#).

Исходные данные

Задаваемый параметр расчета	Раствор 1	Раствор 2	Раствор 3
Концентрация HNO_3 , моль/л	5,47	4,4	1,38
Плотность, г/л	1366,1	1449,5	1517,5
Объем раствора, мл	16,4	14,4	14
Радиационно-химический выход водорода, молекул/100 эВ*:			
Альфа	0,19	0,21	0,35
Бета	0,04	0,05	0,09
Гамма	0,04	0,05	0,09

Результат

Скорость выхода H_2 , мл/мин	Эксперимент		Расчет
	min	max	
Раствор 1	6,30E-06	1,82E-04	5,028E-5
Раствор 2	6,44E-05	1,82E-04	1,075E-4
Раствор 3	5,46E-05	1,35E-04	1,703E-4

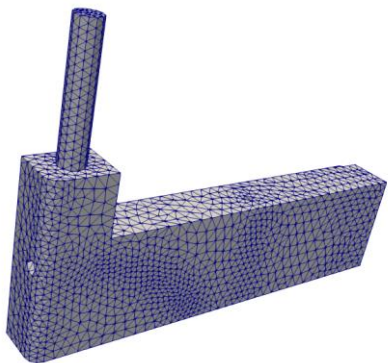
Выводы

Высока вероятность, что экспериментальные значения выхода для [раствора 3 с низкой концентрацией \$\text{HNO}_3\$](#) являются [заниженными](#), что требует анализа постановки эксперимента и проверки [системы улавливания](#) водорода.

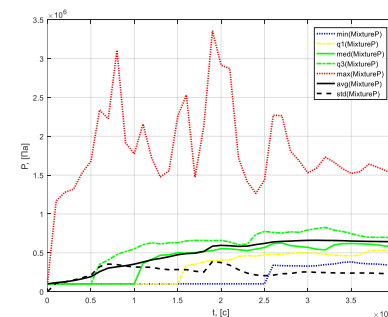
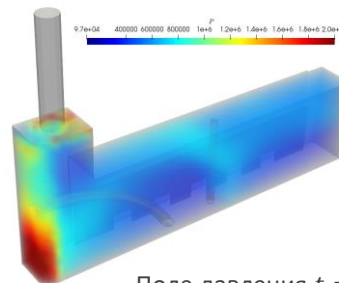
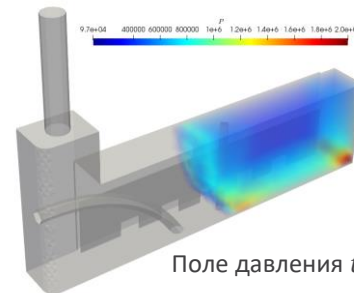
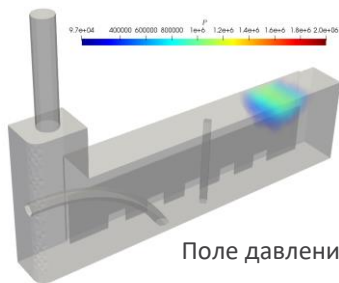
В ряде экспериментов с длительной выдержкой значения выхода водорода ниже, чем при короткой выдержке, что также требует дополнительного анализа постановки экспериментов.

Распространение волны горения в аппарате электрохимического растворения

- Радиолитический выход водорода по FIREX составляет $4 \cdot 10^{-3}$ л/ч
- Нижний концентрационный предел $C_{H_2min} = 7\%$ достигается в течении 26 ч
- Параллельно происходит электрохимический выход водорода существенно большей интенсивности



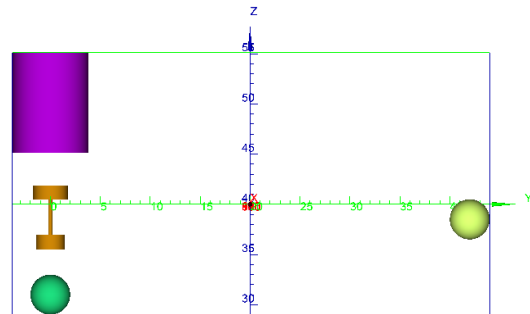
Сеточная модель рабочей камеры аппарата электрохимического растворения



Статистика поля давления в приповерхностном слое ячеек

Расчет радиационных полей экстракционного каскада

- Расчетная модель каскада из 12 экстракторов
- Эффективная доза гамма-квантов и нейтронов рассчитывалась в точках:
 - между экстракторами на уровне центров камер смешения и разделения;
 - под камерой смешения;
 - в месте расположения проема для перчаток.



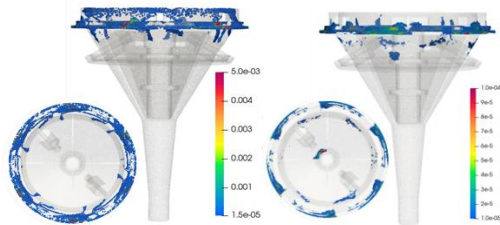
Двигатель и область с источником нейтронов и фотонов в координатах Y-Z (см)

Норма накопления эффективной дозы для персонала согласно НРБ 99/2009 составляет **не более 50 мЗв в год.**

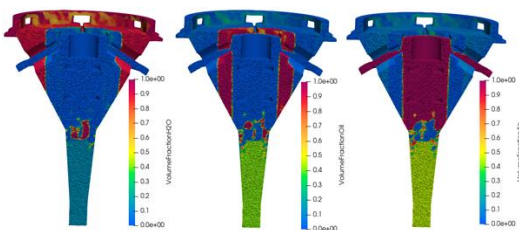
Мощность дозы, достигаемая в экстракторе, позволяет работать оператору в случае необходимости достаточно продолжительное время – интегральная доза за календарный год составит ~ **15 мЗв**

Компьютерные модели оборудования. Центробежный экстрактор

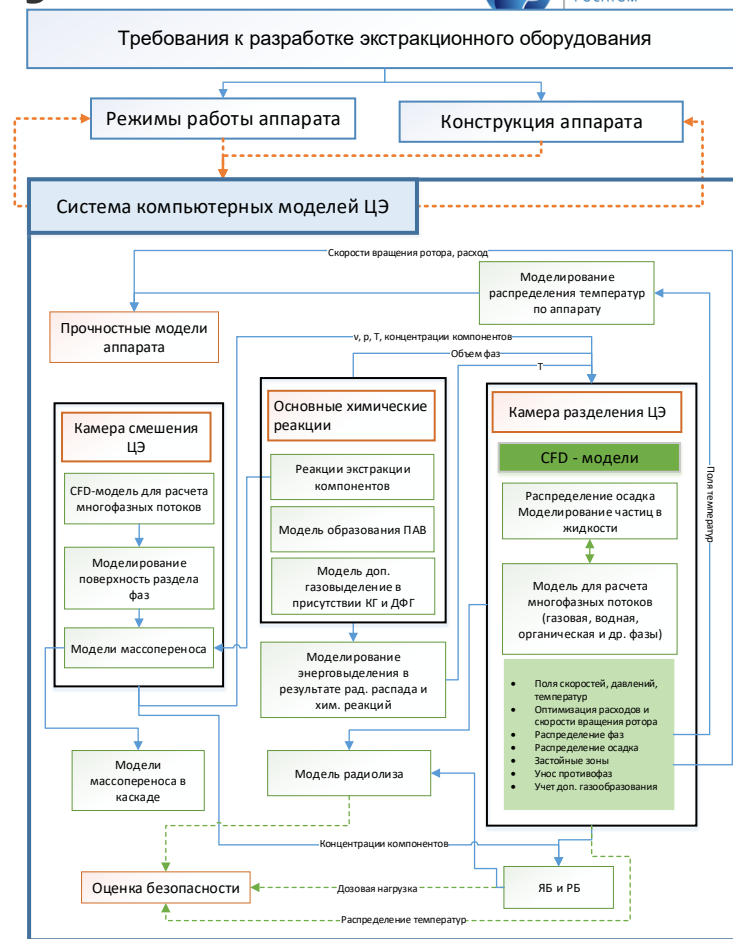
Технические требования к аппарату
Набор моделей процессов
Исходные данные
Программа экспериментов для определения параметров процессов и валидации модели
Компьютерные гидродинамические модели камер разделения и смешения



Зоны накопления твердой фазы внутри камеры разделения

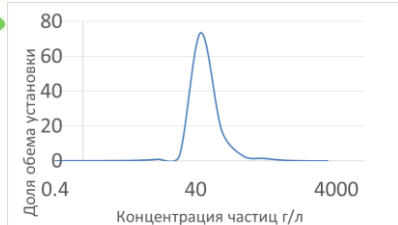
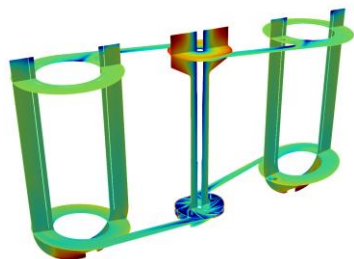


Распределение фаз внутри камеры разделения



Компьютерные модели оборудования. Аппарат электрохимического растворения

Технические требования к аппарату
Набор моделей процессов
Исходные данные
Программа экспериментов для определения параметров процессов и валидации модели



Распределение частиц твердой фазы



Заключение

- Выделены типовые аварийные ситуации на радиохимических производствах
- Разрабатывается код, реализующий методику оценки пожаровзрывобезопасности технологических процессов ЗЯТЦ
- Наполняются базы данных основных характеристик отдельных процессов, узлов, аппаратов и производств
- Для моделирования аварийных ситуаций разрабатывается многокомпонентный CFD-код, позволяющий моделировать целый комплекс физико-химических процессов
- Разрабатываемая система кодов применяется для оценки дозовой нагрузки на экстрагент, оценки выхода радиолитического водорода, оптимизации технологических режимов и элементов конструкции оборудования, что показывает работоспособность как отдельных кодов, так и предлагаемого подхода в целом

Участники работ

- АО «ВНИИНМ»
 - О.В. Шмидт, В.А. Кашеев, А.А. Рыкунова, Ю.А. Евсюкова...
- НТЦ ЯРБ
 - Кошечева А.М., Л.В. Гезалян, М.В. Скворцов...
- Частное учреждение «Наука и инновации»
 - А.Ю. Шадрин, А.В. Родин,
- РФЯЦ-ВНИИТФ
 - Е.А. Белоногова, П.Е. Беляев, А.А. Бочкарева, О.В. Вербицкая, Н.Д. Дырда, Д.А. Мастюк, И.В. Пешкичев, Е.Е. Пигасов, Н.Ю. Романова, У.Ф. Алтынникова, О.В. Шульц...

Спасибо за внимание

Макеева Инга Равильевна
Начальник отдела

Тел.: +7 (35146) 54885

Моб. тел.: +7 (982) 280 05 32

E-mail: i.r.makeyeva@vniitf.ru