

## Метод поиска минимума энергии Гиббса для описания фазового состава системы U-Zr-O

А.П. Долгодворов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

Вопросы безопасного функционирования ядерного реактора включают исследования возможных аварийных ситуаций и анализ поведения системы в них. В тяжелых авариях с деградацией активной зоны в реакторах типа ВВЭР происходит формирование многокомпонентного расплава, называемого кориумом. Кориум содержит смесь веществ, из которых состоит топливо с наработанными продуктами деления, циркониевые оболочки, стержни системы управления и защиты реактора, стальные конструкции и бетон. Исследование системы с элементным составом U-Zr-O-Fe проводилось в работе [1]. В настоящей работе исследуется поведение трехкомпонентной системы U-Zr-O. Рассчитывается фазовая диаграмма системы путем минимизации энергии Гиббса. В работе предлагается метод минимизации, основанный на переборе соотношений концентраций химических элементов в веществах и фазах системы с целью поиска конфигурации с наименьшей энергией Гиббса с использованием параллельных компьютерных вычислений.

Система состоит из двух фаз, каждая фаза имеет одинаковый состав:  $UO_2$ ,  $ZrO_2$ , O, U, Zr. Для описания системы используется модель регулярного раствора, которая дает возможность описать расслоение смеси. Энергия Гиббса системы строится следующим образом

$$G = \sum_{p=1}^2 (G_p^{ld} + G_p^{Ex}), \quad (1)$$

где  $p$  – номер фазы. Первое слагаемое отвечает модели идеального раствора

$$G_p^{ld} = \sum_i N_{p,i} (G_i^0 + RT \ln x_{p,i}), \quad (2)$$

где  $G_i^0$  – энергия Гиббса чистого вещества при нормальных условиях,  $N_{p,i}$  – число молей вещества  $i$  в фазе  $p$ ,  $T$  – температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $x_{p,i}$  – мольная доля компонента  $i$  в фазе  $p$ . Второе слагаемое описывает избыточную энергию, представленную в форме полиномов Редлиха-Кистера[2],

$$G_p^{Ex} = M_p \sum_i \sum_j x_{p,i} x_{p,j} \sum_{v=0}^2 L_{j,k}^{(v)} (x_{p,i} - x_{p,j})^v, \quad (3)$$

$M_p$  – полное число молей в фазе  $p$ ,  $L_{j,k}^{(v)}$  – константы, которые брались из работы [3].

Перебор осуществляется путем пошагового прироста компонентов системы на  $\Delta n$  молей. Величина  $\Delta n$  выбирается как общий делитель числа молей элементов  $n_U$ ,  $n_O$  и  $n_{Zr}$ . Чем меньше заданное значение  $\Delta n$ , тем точнее найденная конфигурация по числу молей с минимальной энергией Гиббса. Для вещества  $A_j B_j$  число приростов не может превышать величины

$\min\left(\frac{n_A}{i\Delta n}, \frac{n_B}{j\Delta n}\right)$ , где в  $n_A$  и  $n_B$  должен быть учтен вычет числа молей, идущих на формирование

других веществ, содержащих элементы А и В.

Расчет одной точки трехкомпонентной фазовой диаграммы U-Zr-O в распараллеленной программе при помощи технологии OpenMP на процессоре Intel Core i7-4790 с 8 логическими ядрами при  $\Delta n = 0.01$  молей составил порядка 1 часа (4101.5 с). Суммарное число молей элементов было взято  $n_U + n_O + n_{Zr} = 3$  моля. Аналогичный расчет при последовательном вычислении составил более 8 часов.

Таким образом, предлагаемый метод позволяет избежать использование трудоемких алгоритмов минимизации функции энергии Гиббса для моделей, описывающих неидеальные растворы, а планируемое использование вычислительных кластеров позволит увеличить скорость и точность расчета.

## Литература

1. Озрин В.Д., Тарасов О.В., Стрижов В.Ф., Филиппов А.С. Модель для расчета состава и плотности расплава активной зоны водо-водяного реактора при тяжелой аварии // Известия Российской Академии Наук. Энергетика 2010.
2. Redlich O., Kister A.T. Thermodynamics of nonelectrolyte solutions  $x$ - $y$ - $z$  relations in a binary system // Ind. Eng. Chem. 1948. V. 40. P. 341.
3. *Chevalier P.Y., Fischer E.* Thermodynamic modeling of the O-U-Zr system // J. Nucl. Mater. 1998. V. 257. P. 213.