

ОТЗЫВ

Официального оппонента Янилкина Алексея Витальевича на диссертационную работу Половникова Павла Васильевича на тему: «Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.4.9 «Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность»

Актуальность работы. Диссертационное исследование Половникова П.В. посвящено развитию механистических моделей, описывающих эволюцию микроструктуры ядерного топлива в условиях реакторного облучения. С научной и практической точки зрения актуальность данной работы не вызывает сомнений. Современные твэльные коды, используемые для проектирования активных зон и прогнозирования поведения топлива, в своей основе всё чаще опираются на физически обоснованные, а не чисто феноменологические модели. Используемые в кодах модели призваны описывать фундаментальные процессы на микроуровне – миграцию дефектов, эволюцию границ зерен, образование газовых пузырей и т.д. Однако их дальнейшее развитие упирается в два ключевых барьера.

Во-первых, это отсутствие надежных значений для целого ряда микроскопических параметров (таких, как энергии миграции дефектов, энергии сегрегации примесей на границах зерен, параметры межфазных границ), входящих в систему кинетических уравнений. Прямое экспериментальное измерение этих величин зачастую невозможно, и здесь на первый план выходят методы атомистического моделирования, в частности, молекулярная динамика и расчеты из первых принципов. Во-вторых, существует настоящая потребность не просто в уточнении параметров, но в создании новых физических моделей, адекватно описывающих сложные наблюдаемые явления, для которых существующие теоретические представления являются неполными или неверными.

Работа Половникова П.В. направлена на решение именно этих задач. Развитие предлагаемых в диссертации моделей, верифицированных как методами вычислительной физики, так и данными материаловедческого эксперимента, позволяет улучшить точность и предсказательную силу твэльных кодов. В конечном счете, такая работа слушает для повышения безопасности, экономичности и эффективности современных и перспективных ядерных энергетических технологий.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем: впервые выполнены расчеты коэффициентов радиационно-стимулированной диффузии для нитридного топлива за счет комбинации методов молекулярной динамики и Монте-Карло. Разработан комплекс физических моделей, описывающих коагуляцию пор и пузырей в ядерном топливе в различных условиях. Предложена модель коагуляции внутризеренных пузырей на основе теории Ланжевена, которая обеспечивает более точное описание ядра коагуляции в уравнении Смолуховского по сравнению с существующими упрощенными подходами. Разработаны механистические модели для описания коагуляции неподвижных пор в периферийной области топливной таблетки и "взрывного" распухания в

интерметаллидных соединениях. Для реализованных моделей создана и верифицирована численная схема на основе метода Монте-Карло. Предложенные подходы позволяют более адекватно описывать эволюцию микроструктуры ядерного топлива в различных условиях эксплуатации.

Содержание диссертации

Анализ содержания диссертационной работы позволяет оценить ее как целостное и логически завершенное научное исследование. Структура работы выстроена последовательно: от анализа радиационных процессов в топливе и обзора существующих подходов к моделированию к решению конкретных задач, имеющих значение для развития моделей твэльных кодов.

В первой главе представлен обзор физических процессов в ядерном топливе при облучении и методов их математического моделирования. Анализ ограничений существующих моделей обосновывает актуальность выбранного направления исследований. Во второй главе содержатся результаты численного моделирования каскадов смещений от пролета осколков деления. Совместное применение методов молекулярной динамики и Монте-Карло позволило получить параметры для моделей топливного модуля MFPR, используемые при моделировании атермальной диффузии и прямого выхода продуктов деления.

Третья глава представляет цикл исследований по разработке теоретических моделей, описывающих изменение пористости в различных видах топлива и условиях облучения. Предложенные модели демонстрируют универсальный характер, что подтверждается их применением к различным видам топлива (UO_2 , интерметаллиды) и различным физическим условиям. Корректность моделей подтверждена сравнением с существующими упрощенными моделями и независимыми экспериментальными данными.

Диссертация представляет собой самостоятельную научную работу, в которой теоретические разработки направлены на решение актуальных проблем повышения точности современных твэльных кодов.

Достоверность и обоснованность полученных в диссертации результатов и выводов подтверждается комплексным применением современных методов вычислительного и экспериментального материаловедения. Представленные в работе результаты молекулярно-динамического моделирования ключевых параметров, описывающих атермальный перенос вещества, были валидированы путем прямого сравнения с доступными опубликованными данными авторитетных исследовательских групп.

Разработанные в работе кинетические модели, описывающие эволюцию пористости, прошли внутреннюю перекрестную проверку. Корректность была подтверждена не только качественным, но и количественным согласием с известными аналитическими решениями для предельных случаев, а также с данными

послереакторских исследований материалов. Кроме этого, предложенные модели согласуются с существующими упрощенными подходами, уточняя их, что является доказательством их адекватности. Важным аргументом в пользу достоверности и научной значимости работы является то, что все ключевые результаты были представлены в рецензируемых научных журналах, индексируемых в международных базах данных, и прошли строгий отбор международным научным сообществом.

Теоретическая и практическая значимость работы заключается в развитии физических моделей, описывающих поведение дефектов и пористости в ядерном топливе при облучении. Полученные коэффициенты атермальной самодиффузии и параметры радиационного выбивания уточняют параметры, представленные в литературе и приводятся впервые для новых видов топлива. Разработанные модели эволюции пористости в рим-зоне оксидного топлива и при "взрывном" распухании интерметаллидов расширяют теоретическую базу для описания радиационных эффектов в различных типах топливных материалов. Практическая ценность работы подтверждается непосредственным использованием результатов в моделях современных твэльных кодов. Усовершенствованные модели повышают точность прогнозирования поведения топлива в реакторе, что создает основу для оптимизации топливных композиций и обоснования безопасной эксплуатации ядерных реакторов.

Замечания и рекомендации по диссертации и автореферату

При всей актуальности решаемых задач и научной новизне представленных результатов, в работе присутствуют аспекты, требующие дополнительного внимания и проработки. Ниже излагаются замечания и рекомендации, учет которых позволит усилить обоснованность полученных выводов.

1. В разделе 2.3 обсуждаются расчеты SRIM и утверждается, что было проведено несколько сотен расчетов для каждой пары «топливо-фрагмент деления» для усреднения. В одном расчете SRIM уже проводится усреднение по различным запускам ионов. В связи с этим не понятно, чем отличались сотни расчетов.
2. В разделе 2.3 для получения полного числа вторично выбитых атомов (n^{k0}) используется формула (2.3.1). Не ясно, почему не использовались результаты расчета SRIM для этого. Не указаны значения энергии смещения на атом (E_d), которая используется как формуле, так и в расчетах SRIM. SRIM также позволяет проводить прямые расчеты выбивания с поверхности, почему не использовались для сравнения результаты SRIM?
3. В качестве сравнения средних энергий ПБА и их количества, возникающих от осколков делений, приводится работа [35] (Nilsson G. 1966). В цитируемой работе средняя энергия U-ПБА – 102 кэВ, в диссертации от 4 до 6 кэВ в зависимости от рассматриваемого осколка деления. Отличие очень существенное. В диссертации не приводится причин такого различия. Также выглядит странным отсутствие ссылок на другие работы при таком сильном различии. Расчет энергии ПБА классическая задача для Монте-Карло.
4. На рисунке 2.3.4 приведено сопоставление распределений газовых пузырей по размерам. Экспериментальные распределения скорее имеют бимодальный

характер, который в расчетах не наблюдается. При этом в обсуждении сопоставления этот момент не оговаривается.

5. На стр. 72 сделано утверждение, что в газ в порах, размером больше 100 нм (0,1 мкм), можно считать идеальным. При этом отсутствуют оценки давления или плотности газа, подтверждающие это утверждение.

Заключение

Высказанные замечания носят частный характер и не снижают общей ценности проведенного исследования. Диссертационная работа Половникова Павла Васильевича «Моделирование микроструктурных изменений в ядерном топливе при облучении» соответствует критериям специальности 2.4.9 «Ядерные энергетические установки, топливный цикл, радиационная безопасность» и отвечает требованиям п. 9–11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Диссертация представляет собой законченное научно-квалификационное исследование, а ее автор, Половников Павел Васильевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Официальный оппонент
Кандидат физико-математических наук
начальник отдела Компьютерного
материаловедения, ФГУП «ВНИИА»,
г. Москва

Янилкин Алексей Витальевич



Подпись Янилкина Алексея
Витальевича заверяю.
Ученый секретарь НТС ФГУП
«ВНИИА»
К.Т.Н.



Феофанова Любовь Валерьевна

Федеральное государственное
унитарное предприятие
«Всероссийский научно-
исследовательский институт
автоматики им. Н.Л. Духова»
(ФГУП «ВНИИА»)

127030 Россия, Москва,
Суцевская ул., д. 22,
Тел. +7 (926) 572-85-37,
E-mail: yanilkin@vniia.ru