

УДК 621.039.58

ОЦЕНКА ВОЗМОЖНОСТИ КОДА СОКРАТ МОДЕЛИРОВАТЬ ПРОЦЕССЫ РАСТВОРЕНИЯ ДИОКСИДУРАНОВОГО ТОПЛИВА ЖИДКИМ ЦИРКОНИЕМ

Долганов К.С., Киселев А.Е., Рыжов Н.И., Томащук Д.Ю., Филиппов М.Ф., Чалый Р.В., Юдина Т.А.
(ИБРАЭ РАН, г. Москва), Шевченко С.А., Яшников Д.А., Козлова Н.А. (НТЦ ЯРБ, г. Москва)

Основной задачей валидации в соответствии с [1] является количественная оценка возможностей программного средства моделировать процессы, важные для обоснования безопасности, в заявляемой области его применения. Наиболее простым способом количественной оценки является вычисление погрешности посредством определения отклонения расчетного значения от измеренного или ее модификаций, например, методом FFTBM [2]. Как правило, ограничиваются вычислением отклонения расчета от измерения, среднего отклонения и/или его дисперсии по серии однотипных экспериментов. В качестве начальных и граничных условий для расчета задаются средние измеренные значения. В настоящей работе для удобства изложения данный подход будем называть базовым, соответствующие валидационные расчеты — базовыми.

Количественные оценки, полученные на основе базового подхода, не учитывают неопределенности измерений, которые использованы для валидации программного средства, численного решения системы уравнений, реализованной в математической модели, а также неопределенности задания нодализации или сеточной модели экспериментального стенда. Способом устранения указанных недостатков является использование более совершенного подхода, например, представленного в методике [3].

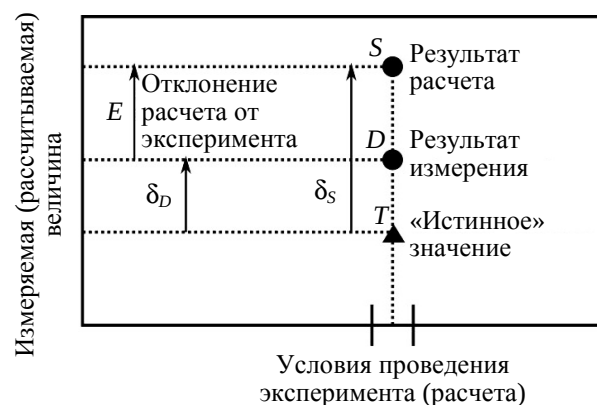
Изначально методика [3] предназначена для валидации программных средств, моделирующих теплоперенос и гидродинамику. Однако для валидации тяжелоаварийных кодов, когда необходимо оценивать погрешность по совокупности измерений, полученных в достаточно широком диапазоне начальных и граничных условий, а не по отдельному измерению, она требует дополнительной адаптации.

Следует отметить, что при проведении валидации программного средства необходимо предварительно обосновать, что используемые

экспериментальные данные описывают те процессы и явления, которые будут характерны для АЭС. Подробно данный вопрос обсуждается в работе [4].

Целями настоящей работы являются адаптация методики [3] к типовым задачам оценки погрешностей программного средства СОКРАТ и ее практическое применение для количественной оценки возможностей модели LIQF на основе моделирования трех серий экспериментов по взаимодействию расплавленного материала оболочки твэла с диоксидурановым топливом. Программное средство СОКРАТ (версии В1 и В3) [5, 6] широко используется для детерминистического анализа тяжелых запроектных аварий на АЭС с ВВЭР.

В основе методики лежат метрологические понятия «погрешность» и «неопределенность», которые используются в качестве количественных характеристик измерений в ГОСТе [7] и распространены на область расчетов. Графическое представление используемых терминов показано на рис. 1 [3]. Пусть D — измеренное значение параметра; S — рассчитанное значение параметра; T — «истинное» (неизвестное) значение параметра. В соответствии с метрологическим определением [7] погрешности δ_S рассчитанного значения S и δ_D измеренного значения D есть



Р и с. 1. Графическая иллюстрация используемых понятий [3]

$$\delta_S = S - T; \quad (1)$$

$$\delta_D = D - T. \quad (2)$$

Отклонение E расчета S от измерения D можно выразить через погрешности, учитывая выражения (1), (2):

$$E = S - D = (S - T) - (D - T) = \delta_S - \delta_D. \quad (3)$$

Погрешность δ_S расчетного значения имеет три составляющие: δ_{model} , обусловленная упрощениями и допущениями, принятыми в модели, δ_{num} , обусловленная численными методами и пространственной дискретизацией расчетной области, δ_{input} , обусловленная неточным знанием исходных данных, т.е.

$$\delta_S = \delta_{\text{model}} + \delta_{\text{input}} + \delta_{\text{num}}. \quad (4)$$

В общем случае под моделью понимается физико-математическая модель процесса или явления, реализованная в программном средстве. В частных случаях понятие модели может быть расширено за счет включения в нее неизменяемых элементов. Например, при моделировании сложных многомасштабных и мультифизических процессов термин «модель» может содержать собственную расчетную подсетку, пользователю доступно лишь изменение начальных и граничных условий для такой модели.

Искомой при валидации является погрешность δ_{model} , и для ее нахождения предложен следующий алгоритм [3]. Комбинация выражений (3), (4) дает выражение для определения отклонения

$$E = \delta_S - \delta_D = \delta_{\text{model}} + \delta_{\text{input}} + \delta_{\text{num}} - \delta_D,$$

откуда получаем

$$\delta_{\text{model}} = E - (\delta_{\text{input}} + \delta_{\text{num}} - \delta_D). \quad (5)$$

Смысл выражения (5) следующий. Искомая погрешность δ_{model} определяется не только отклонением расчета от измерения, но и погрешностями, обусловленными неточностью исходных данных, численных методов и измерений. В частном случае, когда погрешностями δ_D , δ_{num} и δ_{input} можно пренебречь, погрешность δ_{model} совпадает с отклонением E — характеристикой, используемой для оценки возможностей программного средства по базовой методике.

В правой части уравнения (5) знак и модуль известны только для отклонения E . В предположении случайности и независимости всех величин в методике [3] вводится неопределенность валидации

$$u_{\text{val}} = \sqrt{u_{\text{input}}^2 + u_{\text{num}}^2 + u_D^2}, \quad (6)$$

где u_{input} , u_{num} , u_D — стандартные неопределенности, соответствующие погрешностям δ_{input} , δ_{num} , δ_D . Она представляет собой оценку стандартного отклонения совокупности комбинации погрешностей $\delta_{\text{input}} + \delta_{\text{num}} - \delta_D$. Конечным количественным результатом валидации по методике [3] является интервал $(\bar{E} - u_{\text{val}}; \bar{E} + u_{\text{val}})$, в котором находится погрешность δ_{model} . Неопределенность измерений u_D является известной, поскольку ее оценка является составной частью эксперимента. Таким образом, задачей анализа неопределенностей по методике [3] становится оценка неопределенностей u_{input} и u_{num} .

Методика [3] предлагает два метода оценки неопределенности u_{input} : локальный на основе разложения в ряд Тейлора и глобальный на основе метода Монте-Карло. Поскольку в рассматриваемой задаче растворения диоксида нового топлива жидким цирконием может быть нелинейная зависимость результатов расчетов от варьируемых параметров, то для оценки неопределенности u_{input} использовался глобальный метод на основе метода Монте-Карло. В глобальном методе проводятся варианты расчеты с варьированием параметров эксперимента, являющихся входными для расчета, с последующей статистической обработкой расчетов. Средний результат вариантных расчетов $\bar{S}$ и неопределенность u_{input} определяются на основе несмещенных оценок математического ожидания и стандартного отклонения для N_{calc} вариантных расчетов. Неопределенность u_{num} вычисляется путем сравнения серий расчетов на сетках разных степеней детальности для каждого испытания. Более подробное обсуждение методик нахождения u_{num} приведено в [3].

Методика валидации [3] предлагает способ оценки возможности модели только на одном измерении, причем предполагается, что этот результат получен в ходе одного наблюдения. От-

метим, что в соответствии с ГОСТом [7] результат измерения может быть также получен путем усреднения нескольких значений, полученных в повторных экспериментах, характеризующихся условием повторяемости. Практический интерес представляет оценка погрешности δ_{model} , которая выполнена на основе обработки совокупности измерений, полученных в широком диапазоне изменения начальных и граничных условий, например, при различной температуре, давлении, схемах подачи мощности и др. С этой целью проведена адаптация методики [3]. Введем среднее относительное отклонение $E_{n,\%}$ и относительную неопределенность $u_{\text{input},n,\%}$, которые в предположении о независимости экспериментальных и расчетных данных можно определить по формулам

$$E_{n,\%} = \frac{1}{N_{\text{calc}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{calc}}} \frac{(S_n^k - \bar{D}_n)}{\bar{D}_n} = \frac{\bar{S}_n - \bar{D}_n}{\bar{D}_n}; \quad (7)$$

$$u_{\text{input},n,\%}^2 = \frac{1}{N_{\text{calc}} - 1} \sum_{k=1}^{N_{\text{calc}}} \frac{(S_n^k - \bar{S}_n)^2}{\bar{S}_n^2}, \quad (8)$$

где $\bar{D}_n$, $\bar{S}_n$ — среднее значение измерения и расчета соответственно; k — номер вариантного расчета. В отличие от методики [3] здесь введен дополнительный индекс n для обозначения порядкового номера измерения в совокупности измерений, а под $\bar{D}_n$ понимается результат усреднения нескольких повторных измерений. Относительная неопределенность валидации на n -м измерении находится аналогично (6):

$$u_{\text{val},n,\%} = \sqrt{u_{\text{input},n,\%}^2 \bar{S}_n^2 / \bar{D}_n^2 + u_{\text{num},n,\%}^2 \bar{S}_n^2 / \bar{D}_n^2 + u_{D,n,\%}^2}. \quad (9)$$

Определим среднее относительное отклонение $\bar{E}_{\%}$ и неопределенность валидации $\bar{u}_{\text{val},\%}$ для совокупности измерений по формулам для среднего

$$\bar{E}_{\%} = \frac{1}{N_{\text{point}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{point}}} E_{n,\%}; \quad (10)$$

$$\bar{u}_{\text{val},\%} = \frac{1}{N_{\text{point}}} \sum_{n=1}^{N_{\text{point}}} u_{\text{val},n,\%},$$

где N_{point} — число измерений.

Естественно ожидать наличия разброса отклонений $E_{n,\%}$ и неопределенности валидации $u_{\text{val},n,\%}$, полученных для совокупности изме-

ний. Для этого вычислим дисперсии $E_{n,\%}$ и $u_{\text{val},n,\%}$ по формулам

$$u_{E,\%}^2 = \frac{1}{N_{\text{point}} - 1} \sum_{n=1}^{N_{\text{point}}} (E_{n,\%} - \bar{E}_{\%})^2;$$

$$u_{u,\text{val},\%}^2 = \frac{1}{N_{\text{point}} - 1} \sum_{n=1}^{N_{\text{point}}} (u_{\text{val},n,\%} - \bar{u}_{\text{val},\%})^2.$$

Полную неопределенность валидации определим по формуле сложения дисперсий

$$u_{\text{val},\%}^{\text{tot}} = \sqrt{\bar{u}_{\text{val},\%}^2 + u_{E,\%}^2 + u_{u,\text{val},\%}^2}. \quad (11)$$

Выражения (10), (11) позволяют оценить погрешность δ_{model} на совокупности измерений через интервал $\bar{E}_{\%} \pm u_{\text{val},\%}^{\text{tot}}$. Отметим, что такая оценка включает среднее отклонение расчетов от измерений и дисперсию этого отклонения, как в базовом подходе. Но по отношению к базовому подходу дополнительно учитываются неопределенности измерений, а также неопределенности, обусловленные численными методами и неполнотой знаний о параметрах расчетной модели.

Рассмотрим результаты применения адаптированной методики [3] к оценке составляющей погрешности результатов расчетов по программному средству СОКРАТ, связанной с упрощениями и допущениями модели растворения диоксида уранового топлива расплавом оболочки твэла. Для оценок использовались эксперименты по взаимодействию расплава оболочки твэла с диоксида урановым топливом в режимах, характерных для протекания тяжелых аварий на АЭС с легководным теплоносителем.

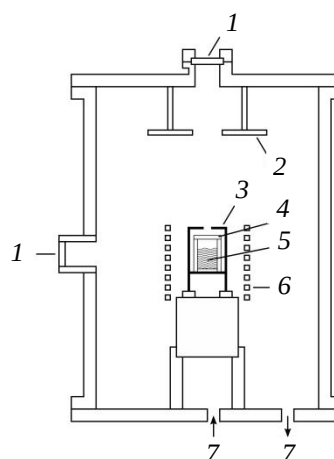
В ходе тяжелой аварии на АЭС с ВВЭР при разогреве активной зоны температура оболочек твэлов достигает температуры плавления циркония. От выхода на поверхность твэла расплав недоокисленного циркония удерживается внешним тугоплавким слоем образовавшегося при разогреве активной зоны ZrO_2 после ее осушения. Экспериментальные и теоретические работы [8—15] показывают, что расплавленный цирконий начинает взаимодействовать как с UO_2 , так и со слоем ZrO_2 и результатом этого взаимодействия является одновременное растворение твердых UO_2 и ZrO_2 . Важность моделирования растворения топлива расплавом цир-

кония обусловлена его влиянием на разрушение активной зоны, поскольку уже при температуре примерно на 1000 К ниже температуры плавления UO_2 ($T_{\text{пл}}$ 3120 К) часть топливной таблетки может перейти в расплав. Следствием этого являются более ранний выход летучих продуктов деления из топлива и формирование энерговыделяющего расплава в активной зоне.

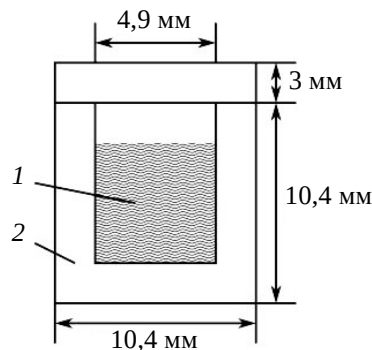
Первое предположение о механизме растворения UO_2 жидким цирконием, основанное на экспериментах на установке LAVA, было высказано в работе [9]. В основе химического взаимодействия циркония и UO_2 лежит окисление циркония до $\alpha\text{-Zr(O)}$ и соответственно восстановление стехиометрического UO_2 до нестехиометрического UO_{2-x} . При значительном уменьшении содержания кислорода вдоль границ зерен в приграничном слое UO_{2-x} появляются неокисленные атомы урана. Поскольку металлический уран обладает низкой температурой плавления (1403 К), его атомы переходят в расплав циркония. Это приводит к распаду поверхностного слоя UO_{2-x} на макрочастицы, которые в дальнейшем быстро растворяются из-за большой поверхности контакта с жидким цирконием. Конвективный массообмен, возникающий за счет роста плотности расплава вблизи границы UO_2 относительно плотности расплава в объеме, способствует отводу кислорода от границы в объем, поддерживая градиент концентрации кислорода на границе $\text{UO}_{2-x}\text{—Zr}$. Соответственно поддерживается реакция восстановления твердого UO_2 жидким цирконием. В более поздних теоретических работах [13] была также показана важная роль диффузионного механизма переноса кислорода в твердом UO_2 . Современные общие представления о растворении UO_2 , основанные на экспериментах [8—12], базируются на двустадийном характере взаимодействия. На начальной стадии происходит интенсивное растворение UO_2 , сопровождающееся насыщением расплава циркония ураном и кислородом, на последующей стадии скорость растворения UO_2 уменьшается и в расплаве образуются керамические частицы смешанного состава $(\text{U, Zr})\text{O}_{2-x}$.

В экспериментах [8, 16] изучали растворение необлученного UO_2 жидким цирконием. Эти экспериментальные данные важны для валидации моделей тяжелоаварийных кодов, поскольку измерения проведены в широком диапазоне прототипных условий и хорошо инструментированы.

На рис. 2 показана схема экспериментальной установки. В корпусе из коррозионно-стойкой стали на подставке размещена печь, состоящая из индукционной катушки и молибденового токоприемника. Внутри токоприемника расположен тигель из UO_2 с наполнителем из циркония. Сверху тигель закрыт крышкой из UO_2 . Более подробно геометрия тигля показана на рис. 3. Высота заполнения тигля в работе [8] не приводится, но принимая во внимание отношение смоченной площади к объему $S/V_{\text{Zr}} = 10 \text{ см}^{-1}$ [17] и учитывая контакт расплава по вертикальной стенке и днищу тигля, высота за-



Р и с. 2. Принципиальная схема установки: 1 — смотровое окно; 2 — тепловая защита; 3 — молибденовый токоприемник; 4 — тигель из UO_2 ; 5 — расплав циркония; 6 — индукционная катушка; 7 — подача инертного газа



Р и с. 3. Габаритные размеры тигля из UO_2 : 1 — расплав циркония; 2 — тигель из UO_2

полнения тигля горячим расплавом составляла 5,4 мм.

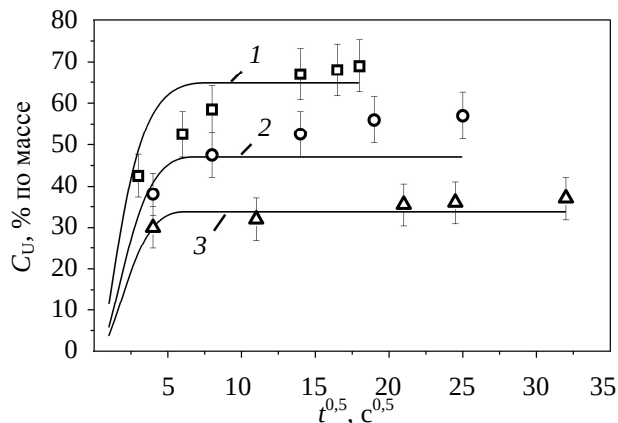
Программа включала три серии экспериментов при температуре изотермической выдержки 2273, 2373 и 2473 К в интервале 9—1024 с. В каждой серии экспериментов выполняли 5—6 измерений массовой доли урана $C_U = M_U / (M_U + M_{Zr})$ в расплаве (без учета массы кислорода). Выход на стационарный режим контролировался по показаниям пирометра, измеряющего температуру молибденового токоприемника. В начале эксперимента температуру токоприемника медленно повышали до 1973 К. На втором этапе выполняли разогрев со скоростью 15 К/с на 100 К выше необходимой температуры изотермической выдержки. После короткой выдержки температуру снижали до требуемой. Эта процедура позволила быстро выйти на изотермическую фазу. Температуру тигля из UO_2 и циркония оценивали расчетным путем, на фазе разогрева она была существенно ниже температуры молибденового чехла, но к выходу на изотермическую фазу температура токоприемника, тигля и заполнителя выравнивалась [16]. Эксперименты проводили в инертной среде с целью исключить окисление расплава паром. После требуемой длительности изотермической выдержки образец быстро охлаждали. Содержание урана и циркония в расплаве определяли методом рентгенофлуоресцентного анализа.

Измерения представлены данными о массовой доле урана на окончание экспериментов, а также температуре и длительности изотермической выдержки. Неопределенность измерений температуры образца, обусловленная надежностью калибровки пирометра и точностью аналитического метода вычисления температуры расплава по температуре молибденового токоприемника, оценена авторами экспериментов ± 20 К [8]. Для дальнейшего анализа это значение принимается равным одному стандартному отклонению σ .

Неопределенность измерений массовой доли урана в работах [8, 16] не приведена, поэтому она была оценена на основе описания метода измерения и анализа применения подобных методов в других исследованиях. В частности,

спектрометрические методики использовали в экспериментах [8], где относительная неопределенность измерения массовой доли урана была оценена 2% (одно стандартное отклонение σ). К дополнительному источнику необходимо отнести неопределенности, возникающие при оцифровке экспериментальных данных с рисунков, приведенных в [16]. Оценка стандартной неопределенности оцифровки составляет 1,25% (одно стандартное отклонение σ). Таким образом, полная относительная неопределенность измерения массовой доли урана $u_{D,n}$ складывается из неопределенностей измерения и оцифровки по правилу сложения стандартных отклонений [18]. Для каждого результата измерений на рис. 4 указана неопределенность измерения массовой доли урана в виде $\pm 2u_{D,n}$.

Моделирование одновременного растворения твердого UO_2 и ZrO_2 расплавленным цирконием (модель LIQF [20]). В модели предполагается, что основными механизмами переноса кислорода в твердом UO_2 является диффузия, в расплаве — конвекция [19]. Скорость растворения керамики расплавом определяется из решения системы уравнений баланса массы компонентов и непрерывности потоков кислорода и урана на границах взаимодействия. Дополнительно используется упрощающее предположение о постоянстве молярной концентрации жидкого расплава. Для оценки потока кислорода по керамическим слоям вводится упрощающее предположение о квазилинейной форме профиля распределения концентрации. Распределение кислорода в слое жидкого рас-



Р и с. 4. Расчетная (—) и измеренная в серии экспериментов 1 (Δ), 2 ($\circ$), 3 ($\square$) массовая доля урана в расплаве

плава полагается однородным, за исключением тонких областей вблизи границ с керамикой. Концентрация кислорода на границах полагается равновесной (выбирается из бинарной фазовой диаграммы U—O или Zr—O со стороны керамических слоев или тройной диаграммы Zr—U—O со стороны расплава).

Особенностью модели является зависимость процессов окисления расплавленного циркония и его взаимодействия с керамическими слоями от концентрации кислорода в расплаве. Модель согласованным образом учитывает две стадии взаимодействия [8—15, 17]. На первой стадии (стадии насыщения) расплавленный цирконий интенсивно растворяет керамические слои по границе контакта, расплав быстро насыщается кислородом. На второй стадии взаимодействия в расплаве образуются керамические частицы и растворение слоя UO_2 прекращается. Выпадение керамических частиц в расплаве поддерживается потоком кислорода в расплав из UO_2 и ZrO_2 и окисляющей атмосферы (через внешний слой ZrO_2).

При моделировании экспериментов [8] с помощью программного средства СОКРАТ тигель из UO_2 с расплавом циркония внутри представляется тепловым элементом из одной расчетной ячейки, поскольку в эксперименте при растворении предполагается отсутствие градиентов температуры в тигле и расплаве. В качестве начальной и граничной температуры в расчетах задавали температуру изотермической выдержки, поскольку за начало изотермической фазы экспериментаторами было выбрано время достижения температуры изотермической выдержки. Вклад процесса растворения UO_2 на этапе разогрева и охлаждения оценивали в рамках анализа неопределенностей.

По каждому эксперименту был проведен один базовый расчет при средних входных параметрах. В рамках анализа неопределенности для каждого эксперимента было проведено два набора вариантных расчетов: $N_{calc} = 150$ и $N_{calc} = 300$. Сравнение результатов статистической обработки двух выборок показало слабую зависимость интервала $(\bar{E} - u_{val}; \bar{E} + u_{val})$, которым оценивается погрешность δ_{model} , от объема выборки N_{calc} . Для обсуждения в настоящей статье приводятся результаты вариантных расчетов

с $N_{calc} = 300$. При анализе неопределенностей в перечень варьируемых параметров расчетной модели эксперимента были включены параметры, оказывающие наибольшее влияние на растворение, а именно геометрический параметр S/V_{Zr} — с его увеличением возрастает скорость поступления кислорода из UO_2 в расплав, температура изотермической выдержки — чем выше температура, тем больше диффузионный поток кислорода из UO_2 в расплав, а также максимальная растворимость урана в системе U—Zr—O, время изотермической выдержки — чем больше время, тем больше растворение для измерений, выполненных на фазе насыщения. В каждом расчете величина S/V_{Zr} варьировалась в диапазоне 9—11 cm^{-1} по равномерному закону распределения, температура изотермической выдержки варьировалась в диапазоне $\pm 3\sigma$ по нормальному закону распределения, σ полагалась равной 20 K, время изотермической выдержки варьировалось в диапазоне ± 1 с по равномерному закону распределения. Тип распределения выбран на основе принципа, рекомендованного стандартами [7, 20].

Относительные отклонения $\bar{E}_{n,\%}^{ref}$ базовых расчетов от измерений приведены в таблице. Там же представлены значения параметров, полученные после обработки вариантных расчетов по соотношениям (7)—(9), и неопределенности измерений $u_{D,n,\%}$. Отсутствие вклада неопределенности $u_{num,n,\%}$, связанной с нодализацией, обусловлено тем, что в настоящей работе исследуется локальное физическое явление, и в этом случае решение задачи не зависит от выбора сеточного разбиения объекта моделирования.

Среднее относительное отклонение $\bar{E}_{\%}$ расчетной массовой доли урана от измеренной, определенное с помощью адаптированной методики [3], составило $-1,5\%$, полная неопределенность валидации $u_{val,\%}^{tot} = 11,3\%$. Основной вклад в полную неопределенность валидации $u_{val,\%}^{tot}$ вносит неопределенность $u_{E,\%} = 9,5\%$, обусловленная разбросом относительных отклонений $E_{n,\%}$. Вклад неопределенности $u_{u, val,\%} = 1,9\%$, обусловленной разбросом значений неопределенности $u_{val,n,\%}$, в $u_{val,\%}^{tot}$ мал, и им можно пренебречь.

**Результаты валидации модели растворения
диоксида урана топливом жидким цирконием**

Темпера- тура, К	Время, с	$\bar{E}_{n,\%}^{\text{ref}}$	$E_{n,\%}$	$u_{\text{input},n,\%}$	$u_{D,n,\%}$	$u_{\text{val},n,\%}$
2273	16	2,3	1,1	2,7	4,6	5,4
	121	6,0	8,1	3,0	4,4	5,4
	441	-4,4	-2,3	3,1	4,0	5,1
	600,25	-5,8	-3,9	2,7	4,0	4,8
	1024	-8,3	-6,5	2,9	3,9	4,7
2373	16	7,2	6,4	8,1	3,8	9,4
	64	-0,6	-0,2	8,0	3,3	8,7
	196	-10,1	-9,8	7,4	3,1	7,4
	361	-15,7	-15,5	7,5	3,0	7,0
	625	-17,2	-17,1	7,8	3,0	7,1
2473	9	9,9	6,9	4,6	3,6	6,1
	36	21,1	18,6	2,8	3,1	4,6
	64	11,1	9,1	2,8	2,9	4,3
	196	-3,0	-4,8	2,8	2,7	3,8
	272,25	-4,4	-6,1	2,8	2,7	3,8
	324	-5,8	-7,5	2,8	2,7	3,7

Среднее относительное отклонение рассчитанной с помощью программного средства СОКРАТ массовой доли урана от измеренной, определенное с помощью базовой методики, составляет $E_{n,\%}^{\text{ref}} = -1,1\%$. Относительная неопределенность $u_{E,\%}^{\text{ref}}$, обусловленная разбросом значений $E_{n,\%}^{\text{ref}}$, составляет 10,2%.

Оценки погрешности δ_{model} и полного отклонения $\bar{E}_{\%}^{\text{ref,tot}}$, полученные с помощью двух методик, оказались достаточно близкими: погрешность δ_{model} , оцененная по адаптированной методике [3], характеризуется интервалом $[-12,8; 9,8]$, полное отклонение $\bar{E}_{\%}^{\text{ref,tot}}$ при использовании базового подхода — интервалом $[-11,3\%; 9,1\%]$. Такой результат обусловлен близостью среднего отклонения $\bar{E}$, а также тем, что основной вклад в ширину диапазона ($\pm u$) в адаптированной методике [3] вносит неопределенность $u_{E,\%}$, обусловленная разбросом значений относительных отклонений $E_{n,\%}$ (в базовой методике она является единственной составляющей). При этом разброс относительного отклонения $u_{E,\%}$ в обеих методиках оказался близким. Отметим также, что применение адаптиро-

ванной методики [3] к оценке погрешности δ_{model} путем моделирования экспериментов [8] по программному средству СОКРАТ показало несущественный вклад средней неопределенности валидации $\bar{u}_{\text{val}}$ в полной неопределенности валидации $u_{\text{val},\%}^{\text{tot}}$.

В общем случае близкие диапазоны оценки возможностей моделей можно ожидать при валидации программного средства на качественных экспериментальных данных с небольшим значением неопределенности измерений, а также при условии адекватности моделей программного средства исследуемому процессу или явлению. Следует отметить, что в отдельных областях экспериментальных исследований тяжелых аварий неопределенности измерений могут быть достаточно высокими. Поскольку при использовании экспериментальных данных с большими неопределенностями измерений оценка δ_{model} с помощью методики [3] будет полностью определяться неопределенностями измерений, объективная оценка качества разрабатываемых моделей и их численной реализации окажется невозможной. Это обстоятельство накладывает требования к выбору экспериментов для валидации программного средства при использовании данной методики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Требования** к составу и содержанию отчета о верификации и обосновании программных средств, применяемых для обоснования безопасности объектов использования атомной энергии. М., Федеральное надзор России по ядерной и радиационной безопасности. РД-03-34—2000.
2. **D'Auria F., Giannotti W.** Development of code with capability of internal assessment of uncertainty. — Nucl. Technol., 2000, v. 131, № 1, p. 159—196.
3. **Standard** for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer. ASME V&V20—2009. New York: ASME, 2009. 88 p.
4. **Богдан С.Н., Козлова Н.А., Соловьев С.Л. и др.** Совершенствование нормативных требований к программным средствам, используемым при обосновании безопасности объектов использования атомной энергии. — В сб.: Совет по аттестации программных средств при Ростехнадзоре: 25 лет на службе безопасности. Труды НТЦ ЯРБ. М., НТЦ ЯРБ, 2016, с. 65—78.

5. **Bolshov L.A., Strizhov V.F.** SOCRAT — the system of codes for realistic analysis of severe accidents. — In: Proc. ICAPP'06. Reno, USA, June 4—8, 2006, Paper 6439.
6. **Kiselev A.E.** Codes for NPP severe accident simulation: development, validation and applications. — In: The 11th National Conf. on Nuclear Science and Technology. Da Nang, Viet Nam, 5—7 August 2015.
7. **Неопределенность** измерения. Ч. 3. Руководство по выражению неопределенности измерения. ГОСТ Р 54500.3—2011. М.: Стандартинформ, 2012.
8. **Kim K., Olander D.** Dissolution of uranium dioxide by molten zircaloy. II. Convection-controlled reaction. — J. Nucl. Mater., 1988, v. 154, p. 102—115.
9. **Hofmann P., Uetsuka H., Wilhelm A. e.a.** Dissolution of solid UO_2 by molten zircaloy and its modelling. — In: Proc. Intern. Symp. on Severe Accidents in Nuclear Power Plants. Sorrento, Italy, 21—25 March. IEAE-SM-296/1, 1988, p. 3—17.
10. **Hayward P., George I.** Dissolution of UO_2 in molten zircaloy 4. Pt 1: Solubility from 2000 to 2200 °C. — J. Nucl. Mater., 1994, v. 208, p. 35—42.
11. **Müller K., Goryachev A.V., Smirnov V.P. e.a.** Simultaneous Dissolution of UO_2 and ZrO_2 by Molten Zircaloy. New Experiments and Modelling. FZKA 6947 SAM-COLOSS-P074. Karlsruhe, FZK, 2004. 98 p.
12. **Hayward P., Hofmann P., Stuckert J. e.a.** UO_2 Dissolution by Molten Zircaloy. New Experimental Results and Modelling. FZKA 6379 INV-CIT(99)-PO29. Karlsruhe, FZK, 1999. 81 p.
13. **Veshchunov M.S., Hofmann P.** Dissolution of solid UO_2 by molten zircaloy. — J. Nucl. Mater., 1994, v. 209, p. 27—40.
14. **Veshchunov M.S., Hofmann P., Berdyshev A.V.** Critical evaluation of uranium oxide dissolution by molten zircaloy in different crucible tests. — Ibid., 1996, v. 231, p. 1—19.
15. **Veshchunov M.S., Berdyshev A.V.** Modeling of chemical interactions of fuel rod materials at high temperatures. Pt 1. Simultaneous dissolution of UO_2 and ZrO_2 by molten zircaloy in an oxidizing atmosphere. — Ibid., 1997, v. 252, p. 98—109.
16. **Kim K., Olander D.** Dissolution of uranium dioxide by molten zircaloy. I. Diffusion-controlled reaction. — Ibid., 1988, v. 154, p. 85—101.
17. **Olander D.** Interpretation of laboratory crucible experiments on UO_2 dissolution by liquid zirconium. — Ibid., 1995, v. 224, p. 254—265.
18. **Уилкс С.** Математическая статистика. М.: Наука, 1967. 632 с.
19. **Бердышев А.А., Вещунов М.С., Киселев А.Е. и др.** Моделирование физико-химических процессов, протекающих в твэлах водо-водяных реакторов при запроектных авариях (модули PROF и LIQF). — В сб.: Труды ИБРАЭ РАН. Вып. 12. Разработка и применение интегральных кодов для анализа безопасности АЭС. М.: Наука, 2011, с. 33—95.
20. **Evaluation of Measurement Data** — Supplement 1 of the «Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement». Propagation of Distributions Using Monte Carlo Method. JCGM 101, 2008.

Поступила в Редакцию 10.05.18

УДК 669.14-404

ИЗМЕРЕНИЕ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВА МОЛЯРНОГО СОСТАВА 73LiF — 27BeF_2 И ВЛИЯНИЕ НА ВЯЗКОСТЬ ДОБАВОК ТРИФТОРИДА ЦЕРИЯ И ТЕТРАФТОРИДА ЦИРКОНИЯ

Мерзляков А.В., Игнатъев В.В., Абакин С.С. (НИЦ «Курчатовский ин-т», г. Москва)

Исследование свойств расплава молярного состава 73LiF — 27BeF_2 связано с возможностью его использования как топливного носителя в жидкосолевом ядерном реакторе-сжигателе трансурановых элементов из отработавшего топлива легководных реакторов [1]. Физические свойства системы LiF — BeF_2 исследовались ранее в разных лабораториях [2—4]. Сведения о влиянии на ее вязкость добавок фторидов трансурановых элементов (нептуний, плутоний, америций, кюрий) и растворимых продуктов деления (цирконий, редкоземельные элементы)

ограничены, что требует измерений. В качестве имитаторов фторидов трансурановых элементов в настоящей работе использовали трифторид церия и тетрафторид циркония.

Вязкость измеряли методом крутильных колебаний цилиндрического тигля, заполненного исследуемым расплавом [5]. Методики и экспериментальная установка, ранее использовавшиеся для измерения вязкости разных высокотемпературных расплавов, показали свою надежность и при определении температуры ликвидуса изучаемого расплава (рис. 1).