

## КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭВОЛЮЦИИ ЖИДКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В СОЛЯНЫХ ПОРОДАХ ПРИ ВЫСОКИХ ГРАДИЕНТАХ ТЕМПЕРАТУРЫ

А. Р. Аветисян, О. О. Корчагина, Л. В. Матвеев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 20 декабря 2021 г.

*Статья посвящена разработке кинетической модели эволюции ансамбля включений в соляных породах (галитах) в поле градиента температуры. Исследования процесса термомиграции жидких включений необходимы для обоснования безопасности захоронения тепловыделяющих радиоактивных отходов в галитах. Для описания эволюции жидких включений в галитах в простейшем приближении было получено уравнение типа Больцмана для функции распределения в зависимости от изотермического размера включения с учетом коалесценции и мгновенного равновероятностного распада. На основании работы был разработан программный модуль для численной реализации кинетической модели.*

**Ключевые слова:** радиоактивные отходы, галиты, ансамбль включений, коалесценция, бинарный распад, изотермический размер.

### Введение

Утилизация радиоактивных отходов (РАО) является одной из наиболее важных задач, определяющих перспективы развития атомной энергетики. Создание пунктов захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО) на основе принципа «мультибарьерной защиты» рассматривается как наиболее предпочтительный вариант окончательной изоляции всей совокупности РАО.

В настоящее время в качестве одной из вероятных геологических сред для создания подземных ПЗРО рассматриваются солевые массивы (галиты), которые рекомендованы МАГАТЭ. Преимуществами данных формаций являются их высокая теплопроводность, необходимая для отвода тепла от РАО с высоким остаточным тепловыделением, а также пластичность,

являющаяся предпосылкой к способности заживать трещины и разрывы. Кроме того, считается, что данные породы обладают низкими показателями проницаемости, что препятствует переносу флюида (а вместе с ним и примесей) на значительные расстояния.

Несмотря на отсутствие грунтовых вод, в соляных породах всегда присутствуют мелкие включения, содержащие рассол и/или газовые включения. Их относительная объемная доля составляет, согласно разным источникам, приблизительно от 0,5% [1] до 2–3% [2]. Они возникают в процессе формирования соляных формаций и находятся в стабильном (метастабильном) состоянии при условии, что отсутствуют внешние возмущения.



Термомиграция ансамбля включений

Цель данной работы состоит в определении количества рессола, которое может достичь области захоронения РАО, поэтому необходимо моделировать поведение ансамбля жидких включений.

Для его описания используется  $f(R, y, t)$  — функция распределения, зависящая от изотермического размера включения, его координаты и времени. В настоящей работе принимается, что  $V(R)$  — установившаяся скорость миграции включений, зависящая от изотермического размера включения и определяемая выражением (1). Будут учтены явления коалесценции и мгновенного распада включений [4, 5].

Пусть есть процесс столкновения двух включений, которые образуют новое большое ( $R_i > R_{cr}^{max}$ ), но при этом неустойчивое включение, которое тут же распадается на два. Функция распределения будет удовлетворять следующим условиям:

$$\frac{df_i}{dt} + \frac{df_j}{dt} = \sum_{k+l=i+j} a_{kl} \left( \frac{df_k}{dt} + \frac{df_l}{dt} \right). \quad (2)$$

При таком процессе должны сохраняться количество включений и их суммарный объем

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = -f_i \sum_{j=0}^I a_{ij} f_j + \sum_{j,k=0}^I a_{jk} f_j f_k \begin{cases} \Delta r \delta(R_j + R_k - R_i), & j+k < I+1 - \frac{r}{\Delta r} \\ \frac{1}{j+k+1}, & I+1 - \frac{r}{\Delta r} \leq j+k \leq I, \quad i = \overline{j+k}, \\ \frac{1}{2I} + 1 - (j+k), & I < j+k < 2I, \quad i = \overline{j+k-I, I} \end{cases} \quad (3)$$

где  $f_i$  — функция распределения жидких включений в зависимости от изотермического размера  $R_i$ ,  $V$  — скорость миграции (1),  $a_{ij} = \Delta r S |V_i - V_j|$ ,  $S = \pi(R_i + R_j)^2$  — эффективная площадь сечения взаимодействия включений,  $R_i = r + I\Delta r$ ,  $I$  — индекс максимального устойчивого включения.

Первый член правой части уравнения (3) отвечает за уменьшение количества включений с изотермическим размером  $R_i$ , а второй — за его увеличение, которое происходит за счет коалесценции и мгновенного бинарного

(в случае докритических частиц сохраняется только объем). Предположим, что все  $a_{kl}$  равны. Поскольку частицы сталкиваются и рождаются парами, то  $\frac{df_i}{dt} = \frac{df_j}{dt}$  и  $\frac{df_k}{dt} = \frac{df_l}{dt}$ . Кроме того, считается, что из двух частиц получаются две новые, поэтому  $\frac{df_i}{dt} = N \frac{df_k}{dt} = v$ , где  $N$  — количество вариантов размеров частиц,  $v$  — число столкновений за единицу времени.

Для описания эволюции жидких включений в галитах в простейшем приближении было получено уравнение типа Больцмана для функции распределения в зависимости от изотермического размера включения с учетом коалесценции и мгновенного равновероятностного распада [6]. В данном случае не рассматривается ее пространственное распределение. Принимается во внимание только изменение размеров включений в результате столкновений маленьких включений и распада больших ( $\geq 210$  мкм). Скорость миграции определяется выражением (1). Если равномерно разбить весь диапазон изменения размеров включений на  $N$  частей с шагом  $\Delta r$  и учесть вышеперечисленные допущения, кинетическое уравнение принимает следующий вид:

равновероятностного распада больших включений. Из формулы (3) видно, что неустойчивые включения бывают двух видов: полученные в результате слияния включений, суммарный индекс которых меньше или равен максимальному индексу устойчивого включения  $I$ , а суммарный объем больше максимального устойчивого объема, и те, суммарные индексы и объемы которых больше максимальных устойчивых значений.

С учетом пространственной зависимости функции распределения уравнения (3) примут вид:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} - V_i \frac{\partial f_i}{\partial y} = -f_i \sum_{j=0}^I a_{ij} f_j + \sum_{j,k=0}^I a_{jk} f_j f_k \begin{cases} \Delta r \delta(R_j + R_k - R_i), & j+k < I+1 - \frac{r}{\Delta r} \\ \frac{1}{j+k+1}, & I+1 - \frac{r}{\Delta r} \leq j+k \leq I, \quad i = \overline{j+k}. \\ \frac{1}{2I} + 1 - (j+k), & I < j+k < 2I, \quad i = \overline{j+k-I, I} \end{cases} \quad (4)$$

Для решения системы уравнений (4) с заданными начальными и периодическими граничными условиями применялся метод Эйлера второго порядка.

Согласно численным расчетам, полученным в результате решения кинетического уравнения с учетом пространственной зависимости функции распределения (4), в процессе термомиграции включения стремятся к определенному спектру изотермического размера. Со временем диапазон сужается и стремится к максимально устойчивому размеру (рис. 2).

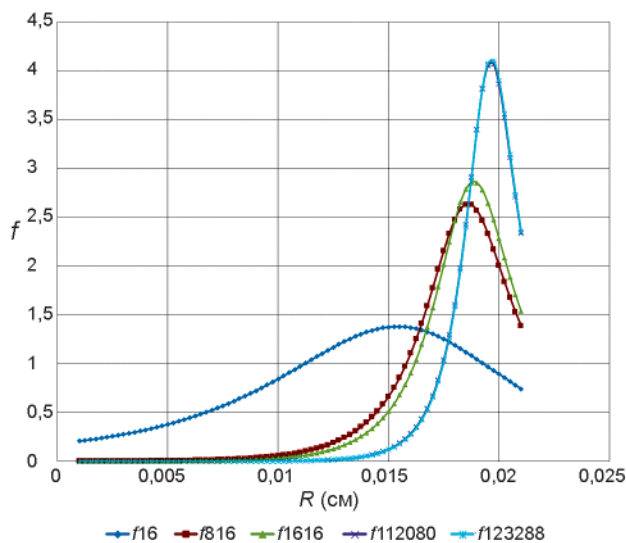


Рис. 2. Зависимости  $f(R)$  для разных значений времени

В рамках вышеизложенной модели эволюции жидких включений с учетом коалесценции устойчивых частиц и мгновенного равновероятного бинарного распада неустойчивых включений можно определить их количество в расчетной области для конкретного момента времени:

$$N = \int_{Y_0}^{Y_{\max}} \int_{R_0}^{R_{\max}} f(R, y, t) dR dy. \quad (5)$$

## Информация об авторах

*Аветисян Артур Робертович*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: avetis@ibrae.ac.ru.

*Корчагина Олеся Олеговна*, младший научный сотрудник, аспирант, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: ok@ibrae.ac.ru.

*Матвеев Леонид Владимирович*, доктор физико-математических наук, директор, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: matweev@ibrae.ac.ru.

## Выводы

Проанализированы процессы миграции жидких включений в монокристаллах галитов при наличии градиента температуры. Разработана кинетическая модель поведения жидких включений в галитах при высоких градиентах температуры с учетом коалесценции и их мгновенного бинарного распада.

В рамках этой модели были проведены расчеты, которые показали, что термомиграция жидких включений носит упорядоченный характер. Размеры основной части включений со временем стремятся к узкому диапазону около максимально устойчивого размера.

Модель также позволяет рассчитать количество включений в расчетной области для конкретного момента времени, что будет полезно при дальнейших исследованиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 20-08-01192).

## Литература

1. Коэн Б. Захоронение радиоактивных отходов ядерных реакторов // Успехи физических наук. 1978. Т. 126. Вып. 1. С. 101–121.
2. Савоненков В. Г., Шабалев С. И. Геохимические исследования подземных ядерных взрывов в каменной соли как аналогов захоронения РАО в соляных формациях. — Санкт-Петербург, Издательский дом «Инфо Ол», 2014. 270 с.
3. Pigford T. H. Migration of Brine Inclusions in Salt // Nuclear Technology. 1982. Vol. 56. no. 1. Pp. 93–101.
4. Гегузин Я. Е., Дзюба А. С., Кружанов В. С. Исследование поведения жидких включений в кристалле в поле температурного градиента // Кристаллография. 1975. Т. 20. Вып. 2. С. 383–390.
5. Anthony T. R., Cline H. E. Thermal Migration of Liquid Droplets through Solids // Journal of Applied Physics. 1971. Vol. 42. Pp. 3380–3387.
6. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Теоретическая физика. Том X. — М.: Физматлит, 2002. 536 с.

### Библиографическое описание статьи

Аветисян А. Р., Корчагина О. О., Матвеев Л. В. Кинетическая модель эволюции жидких включений в соляных породах при высоких градиентах температуры // Радиоактивные отходы. 2022. № 1 (18). С. 86–90. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-1-86-90.

## KINETIC MODEL SHOWING THE EVOLUTION OF LIQUID INCLUSIONS IN SALT ROCKS UNDER HIGH TEMPERATURE GRADIENTS

Avetisyan A. R., Korchagina O. O., Matveev L. V.

Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Article received on December 20, 2021

The paper focuses on a kinetic evolution model developed for an ensemble of inclusions in halites in a temperature gradient field. To demonstrate the safety of heat-generating radioactive waste disposal in salt rocks (halites), thermally induced migration of liquid inclusions should be studied. A simplest approximation was assumed to describe the liquid inclusion evolution in halites: Boltzmann type equation was obtained for the distribution function depending on the isothermal size of the inclusion, taking into account coalescence and instantaneous equiprobable decay. The research allowed to develop a software module providing numerical implementation of the kinetic model.

**Keywords:** radioactive waste, halite, ensemble of inclusions, coalescence, binary decay, isothermal size.

### References

1. Cohen B. Zakhoroneniye radioaktivnykh otkhodov yadernykh reaktorov [Disposal of Radioactive Waste from nuclear reactors]. *Uspekhi fizicheskikh nauk — Physics-Uspekhi*, 1978, vol.126, iss. 1, pp. 101–121.
2. Savonenkov V. G., Shabalev S. I. *Geokhimicheskie issledovaniya podzemnykh yadernykh vzryvov v kamennoi soli kak analogov zakhoroneniya RAO v solyanykh formatsiyakh* [Geochemical research of underground nuclear explosions in rock salt considered as analogues of radioactive waste disposal facilities in salt formations]. Saint-Petersburg, Publishing house “Info Ol” Publ., 2014. 270 p.
3. Pigford T. H. Migration of Brine Inclusions in Salt. *Nuclear Technology*, 1982, vol. 56, no. 1, pp. 93–101.
4. Geguzin Ya. Ye., Dzyuba A. S., Kruzhanov V. S. Issledovanie povedeniya zhidkikh vkluychenii v kristalle v pole temperaturnogo gradienta [Behavior of liquid inclusions in a crystal under a temperature gradient field]. *Kristallografiya — Crystallography*, 1975, vol. 20, iss. 2, pp. 383–390.
5. Anthony T. R., Cline H. E. Thermal Migration of Liquid Droplets through Solids. *Journal of Applied Physics*, 1971, vol. 42, pp. 3380–3387.
6. Lifshits E. M., Pitaevskii L. P. *Teoreticheskaya fizika* [Theoretical Physics]. Volume X. Fizmatlit Publ., 2002. 536 p.

### Information about the authors

Avetisyan Artur Robertovich, PhD, Senior Researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: avetis@ibrae.ac.ru.

Korchagina Olesya Olegovna, junior researcher, graduate student, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: ok@ibrae.ac.ru.

Matveev Leonid Vladimirovich, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Director, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: matveev@ibrae.ac.ru.

### Bibliographic description

Avetisyan A. R., Korchagina O. O., Matveev L. V. Kinetic model showing the evolution of liquid inclusions in salt rocks under high temperature gradients. *Radioactive Waste*, 2022, no. 1 (18), pp. 86–90. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-1-86-90. (In Russian).