



## Образование Pb-O в возмущенном потоке жидкого свинца: молекулярно-динамический подход

Хнкоян Г.В., Галигеров В.С., Павлов Д.Г., Николаев В.С., Стегайлов В.В.

Объединенный институт высоких температур РАН

Задача контроля состояния кислорода в свинцовых расплавах имеет практическую важность. Для создания моделей, описывающих систему на макроскопическом уровне, необходимо понимание процессов, происходящих на атомистическом масштабе. Нами созданы межатомные потенциалы для системы Pb-O, показана их точность в описании транспортных свойств атомов и концентрации насыщения расплава кислородом. Предложен метод и проведен расчет для предтурбулентного режима течения расплава свинца.

### Введение

На текущий момент перспективным для атомной энергетики является введение в эксплуатацию реакторов на быстрых нейтронах для замыкания топливного цикла. Ввиду принципа действия в таких реакторах в качестве охладителя первого контура используются тяжелые металлические теплоносители, в частности, свинец. Использование свинцового охладителя влечет за собой технологи-

ческую сложность – металлическую коррозию конструкционных сталей. Для предотвращения негативных эффектов коррозии и растворения стали вследствие непосредственного контакта со свинцовым охладителем в расплав вводится кислород для роста защитной оксидной пленки на поверхностях. Контроль состояния кислорода в расплаве также важен для предотвращения шлакообразования – роста твердофазных частиц PbO в объеме теплоносителя.

Нуклеобразование в свинцовом расплаве описывается из термодинамических и кинетических соображений. Практический интерес представляет создание континуальной (CFD) модели, корректно учитывающей процессы в контуре и описывающей его функционирование. В работе [1] предложена модель на основе классической теории нуклеации. Уравнения из работы [1] внедрены в CFD модель, результаты расчета с использованием которой сравнивались с результатами для экспериментального контура [2]. Практическая важность второй работы заключается в учете влияния турбулентного перемешивания как в CFD расчете, так и в эксперименте. Указанная теоретическая модель нуклеации содержит ряд существенных предположений о процессах, протекающих на микроскопическом уровне, в частности, о химическом состоянии кислорода и его диффузии в расплаве, что

© Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УФИЦ РАН  
© Институт проблем механики им А.Ю. Ишлинского РАН  
© Хнкоян Георгий Врежович, [khnkoian.gv@phystech.edu](mailto:khnkoian.gv@phystech.edu)  
© Галигеров Владислав Сергеевич, [vladgl3@yandex.ru](mailto:vladgl3@yandex.ru)  
© Павлов Даниил Глебович, [pavlov.dg@phystech.edu](mailto:pavlov.dg@phystech.edu)  
© Николаев Владислав Сергеевич, [nikolaev.vs@mipt.ru](mailto:nikolaev.vs@mipt.ru)  
© Стегайлов Владимир Владимирович, [stegailov.vv@mipt.ru](mailto:stegailov.vv@mipt.ru)

также существенно для измерения концентрации кислорода датчиками. Подобные вопросы могут быть изучены первопринципными атомистическими методами (см., например, [3]), которые, однако, позволяют исследовать только системы размером порядка нанометра. Классическая молекулярная динамика (МД) с использованием потенциалов взаимодействия с одной стороны является атомистическим подходом, а с другой позволяет проводить масштабные расчеты для изучения нуклеообразования и турбулентного течения. Актуальной задачей является создание межатомных потенциалов для расплава свинца с примесями и исследование вышеописанных процессов.

### Модель межатомного потенциала взаимодействия

Для оптимизации потенциалов взаимодействия нами создана выборка на основе данных полученных в первопринципных расчетах. Также первопринципные расчеты используются для анализа физико-химического состояния уединенного атома кислорода в расплаве свинца. Показано, что поведение уединенного атома кислорода в расплаве Pb качественно совпадает с таковым в эвтектике свинец-висмут (LBE), см., например, [4].

Для системы Pb-O оптимизированы межатомные потенциалы взаимодействия форм EAM и MTP. Первая используемая модель межатомного потенциала — EAM является вычислительно более эффективной, что позволяет проводить масштабные расчеты (для сотен миллионов атомов), но в то же время менее точной в описании первопринципных данных, чем MTP модель. Выбранная нами модель MTP20 требует примерно в 200 больше вычислительного времени, чем EAM для аналогичного расчета. Целью создания таких моделей, как уже отмечалось выше, является проведение расчетов систем больших размеров, чем те, которые доступны для первопринципных расчетов. При этом мы стремимся воспроизвести наблюдаемое в первопринципных расчетах поведение кислорода.

### Валидация созданных потенциалов

С использованием созданных потенциалов проводятся МД расчеты для сравнения результатов с первопринципными расчетами и экспериментальными данными. Показано соответствие в описании транспортных свойств атомов, а также в описании температурной зависимости концентрации насыщения свинцового расплава кислородом.

На Рис. 1 и Рис. 2 показано соответствие экспериментальным данным температурных зависимостей для коэффициента самодиффузии свинца, а

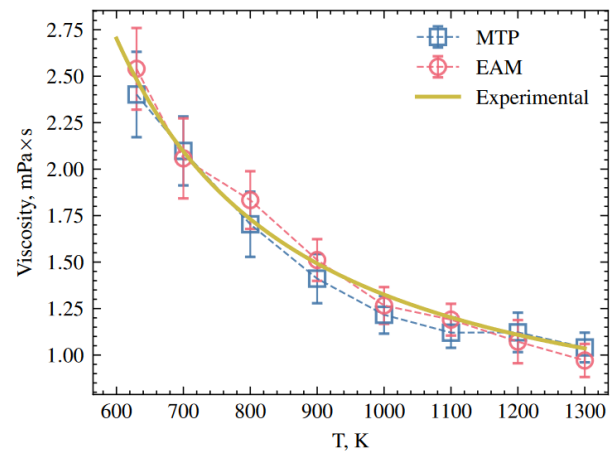


Рис. 1. Сравнение динамической вязкости свинца с экспериментальными данными [5]

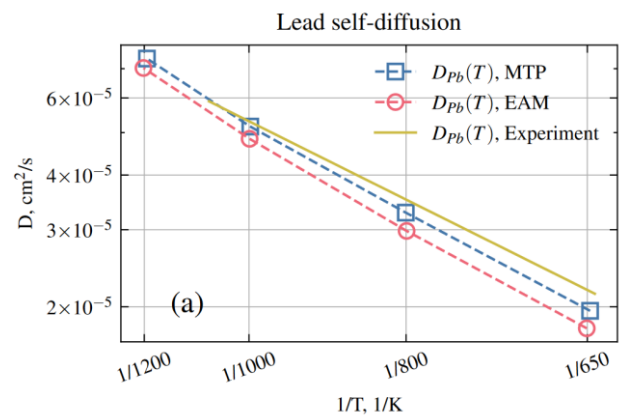


Рис. 2. Сравнение коэффициента самодиффузии свинца с экспериментальными данными [5]

также динамической вязкости расплава свинца. Из соответствия зависимостей можно сделать вывод о точном описании транспорта атомов свинца в расплаве предложенными потенциалами.

### Моделирование предтурбулентного течения в расплаве свинца

Развитие технологий параллельных вычислений на GPU ускорителях делает масштабные атомистические расчеты более доступными при возможности эффективной параллелизации задачи.

Ввиду относительно малых, как правило субмикроскопических размеров рассчитываемых систем, для предотвращения возможных эффектов влияния свободной поверхности в большинстве случаев используются периодические граничные условия (ПГУ). Однако при необходимости поддержания скорости потока, а также его ламинарно-

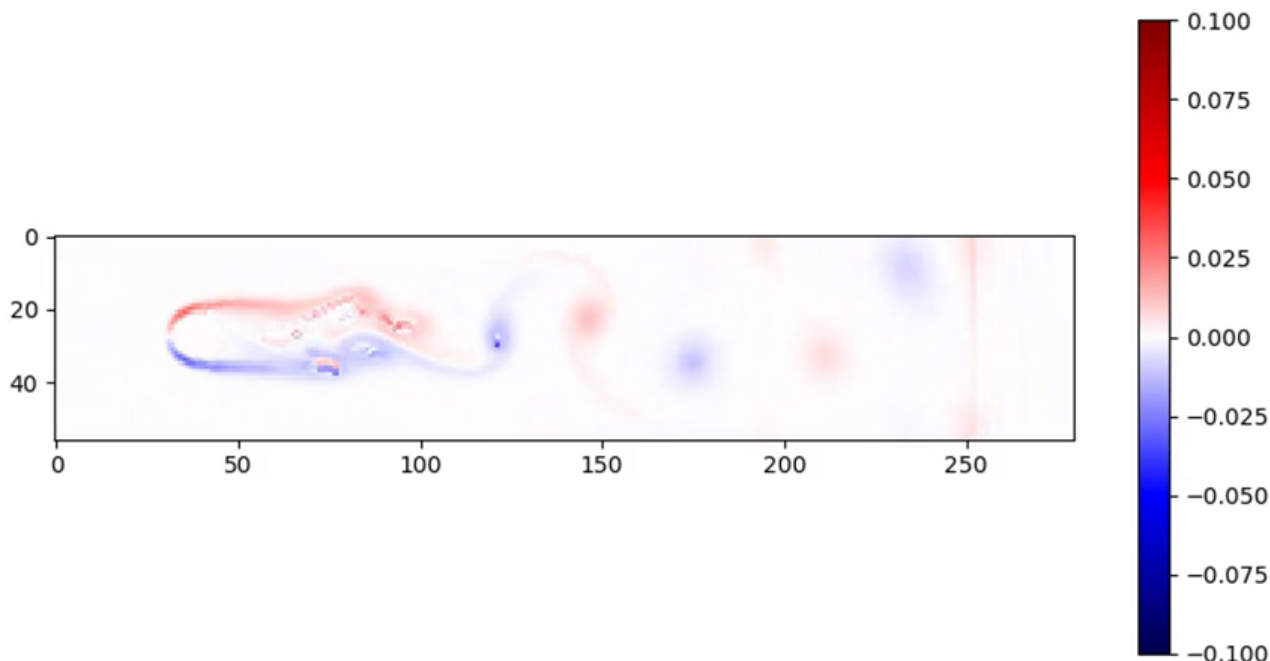


Рис. 3. Завихренность  $\omega = \text{rot } \vec{V}$ ) скорости потока атомов свинца в расчете

сти перед препятствием использование только ПГУ недостаточно.

Для озвученных целей предложен и теоретически обоснован метод, реализующий специальные граничные условия. Суть этого метода состоит в использовании ПГУ и при этом дополнительном переназначении скоростей атомов при их переходе через границу. Метод реализован для широко используемого в случае атомистических расчетов программного пакета LAMMPS. Добавлена поддержка для эффективной параллелизации кода на GPU в рамках модуля LAMMPS/КОККОС.

С использованием разработанного метода, а также потенциала ЕАМ показана возможность получить отрывное течение для потока расплава свинца в атомистическом расчете. Моделирование проводится для ячейки размером  $2500 \times 500 \times 3 \text{ nm}$ , система состоит из  $\approx 108$  миллионов атомов расплава свинца, поток которого обтекает цилиндр свинца радиусом  $R = 321 \text{ nm}$ . Скорость потока атомов свинца составляет  $V = 300 \text{ m/s}$ . Данные параметры расчета соответствуют числу Рейнольдса  $Re \approx 230$ . При таком режиме течения наблюдается вихревая дорожка в потоке за цилиндром. Завихренность  $\omega = \text{rot } (V)$  скорости потока атомов, обтекающего цилиндр, показана на Рис. 3.

Показана возможность масштабирования расчета — увеличения системы с сохранением относительной производительности для достижения больших чисел Рейнольдса. Масштабирование системы также существенно для моделирования нуклеации твердофазного Pb-O в потоке атомов расплава свинца.

### Список литературы

- [1] Gladinez K., Rosseel K., Lim J., Marino A., Heynderickx G., Aerts A. Nucleation and growth of lead oxide particles in liquid lead-bismuth eutectic. // Physical Chemistry Chemical Physics. 2017. V. 19(40). p. 27593–27602.
- [2] Gladinez K., Rosseel K., Lim J., Marino A., Heynderickx G., Aerts A. Formation and transport of lead oxide in a non-isothermal lead-bismuth eutectic loop // Nuclear Engineering and Design, 2019. V. 349, p. 78–85.
- [3] Gil J., Oda T. Structural and chemical analysis of second-row impurities in liquid lead-bismuth eutectic by first-principles molecular dynamics // Physical Chemistry Chemical Physics, 2018, V. 20(48), p. 30480–30491.
- [4] Li D., Song C., He H. Y., Liu C. S., Pan B. C., Wu Y. C. The behavior of oxygen in liquid lead-bismuth eutectic // Journal of nuclear materials, 2013, V. 437(1-3), p. 62–65.
- [5] Fazio C. Handbook on lead-bismuth eutectic alloy and lead properties, materials compatibility, thermal-hydraulics and technologies-2015 edition // Organisation for Economic Co-Operation and Development. 2015. №. NEA-7268.