



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Абрау-2016 • Труды конференции



Г.В. Белов, Н.М. Аристова

Базы данных по свойствам веществ и материалов для ядерной энергетики

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Белов Г.В., Аристова Н.М. Базы данных по свойствам веществ и материалов для ядерной энергетики // Научный сервис в сети Интернет: труды XVIII Всероссийской научной конференции (19-24 сентября 2016 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2016. — С. 86-93. — doi:[10.20948/abrau-2016-4](https://doi.org/10.20948/abrau-2016-4)

Размещена также [презентация к докладу](#)

Базы данных по свойствам веществ и материалов для ядерной энергетики

Г.В. Белов^{1,2}, Н.М. Аристова¹

¹ *Российская академия наук, Объединенный институт высоких температур, Москва*

² *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет*

Аннотация. Представлен обзор баз данных по свойствам веществ и материалов для ядерной энергетики. Приведен анализ информации, которая содержится в базах данных, используемых для термодинамического моделирования процессов ядерной энергетики.

Ключевые слова: базы данных, материалы ядерной энергетики, термодинамические свойства веществ

Исследование реальных процессов, явлений и объектов с использованием методов математического моделирования становится все более массовым. Этому способствуют развитие и распространение средств вычислительной техники, повышение квалификации исследователей, создание и совершенствование математических моделей. Однако для того, чтобы практически применять модель, необходимо располагать информацией о ее параметрах. Параметрами модели могут быть, в частности, свойства веществ и материалов. Информация такого рода долгое время издавалась в виде справочников, а в последнее время хранится, распространяется и используется в виде баз данных. Иными словами, любая достаточно серьезная компьютерная программа, предназначенная для решения задач атомной энергетики, имеет в своем составе базу данных параметров моделей. В качестве примера можно привести программу для моделирования процессов в ядерном топливе АМР [1]. Естественной средой для распространения информации из баз данных является сеть Интернет.

Как показал проведенный обзор литературы, имеющиеся базы данных, предназначенные для использования на предприятиях атомной энергетики и в соответствующих научных учреждениях, можно разделить на несколько классов:

- базы данных по свойствам материалов [2-4],
- базы данных для подразделений, обеспечивающих безопасность эксплуатации АЭС [5],

- базы данных для организаций, занимающихся вопросами хранения и переработки жидких радиоактивных отходов [6-9],
- базы данных по термодинамическим свойствам веществ и систем [10-13].

В настоящем обзоре рассматриваются в основном базы данных по термодинамическим свойствам веществ. Точность и достоверность результатов термодинамического моделирования сильно зависят от полноты базы данных и качества этой информации. К сожалению, на сегодняшний день не существует универсальной базы данных по термодинамическим свойствам веществ, которую можно было бы применять для анализа любой термодинамической системы. Однако существует несколько баз данных, которые можно рассматривать как относительно универсальные, поскольку с их помощью можно решать задачи из нескольких областей науки и техники. В свое время Л.В. Гурвич, основатель Термоцентра им. В.П. Глушко, сформулировал основные требования к справочным данным о термодинамических свойствах веществ [14]:

- рекомендуемые данные должны быть получены в результате критического анализа всех опубликованных данных с использованием адекватных методов обработки первичной информации и вычисления термодинамических свойств;
- рекомендуемые значения термодинамических свойств должны образовывать систему взаимосогласованных величин;
- рекомендуемые данные должны быть получены с использованием наиболее современной информации о фундаментальных константах, ключевых термохимических величинах и атомных массах;
- для каждой рекомендуемой величины должна приводиться оценка ее надежности;
- информация о способах получения рекомендуемых величин и их погрешностей должна быть доступной;
- необходимо указывать источники первичной информации, которые были использованы при получении рекомендуемых данных;
- рекомендуемые данные следует приводить для широкого, логически обоснованного набора веществ.

Термодинамические данные нельзя рассматривать как раз и навсегда выбранные величины, они должны непрерывно пополняться и уточняться по мере накопления и уточнения экспериментальной и теоретической информации.

Как отмечается в ряде работ, см. в частности [15], попавшая в базу данных информация является продуктом работы нескольких исследователей, работающих зачастую в разных странах. Например, один ученый измеряет теплоемкость некоторого вещества в области низких температур, другой измеряет приращения энтальпии этого соединения в высокотемпературной

области, третий — изучает тепловые эффекты реакций. Результаты исследований представлены в научных публикациях, прежде всего в журналах. Для того чтобы получить целостный набор данных о веществе, который можно использовать в качестве параметра термодинамической модели, эксперт по термодинамическим свойствам веществ должен собрать и проанализировать всю имеющуюся информацию о данном веществе, выполнить необходимые расчеты, оценить погрешность полученных данных и предоставить их в некоторой стандартной форме, пригодной для публикации в справочнике или для занесения в базу данных. Главными результатами работы эксперта являются весь собранный им массив информации о веществе (первичные данные), а также текстовый комментарий к процедуре обработки исходной информации и обоснованию полученных результатов. Этот комментарий можно рассматривать в качестве «родословной» данных, поскольку он поясняет их происхождение. Наличие такого комментария позволяет другому эксперту проверить работу коллеги, а в случае появления новых экспериментальных или теоретических сведений о веществе повторить процедуру анализа и получить новый, уточненный набор данных. При этом желательно хранить исходные экспериментальные данные в виде таблиц, текстов статей и библиографической информации. Наличие исходных данных в виде статей позволяет обнаружить новые подробности об эксперименте, найти возможные ошибки переноса информации из источника в базу, а наличие исходных экспериментальных данных дает возможность применить для их анализа альтернативные методы или программы, которые могут появиться в будущем.

Термодинамическое моделирование дает возможность оценить последствия возможного распространения в почве и водоемах химических элементов и их соединений, загрязняющих окружающую среду. Соответствующая база данных ThermoChimie (<http://www.thermochimie-tdb.com/>) разработана французским национальным агентством, занимающимся хранением и утилизацией радиоактивных отходов Andra [7, 8]. В 2014 году база данных по термодинамическим свойствам веществ ThermoChimie содержала сведения примерно о 2300 веществах, образованных, в основном, следующими химическими элементами: H, Be, B, C, N, O, F, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, As, Se, Br, Rb, Sr, Zr, Nb, Mo, Tc, Pd, Ag, Cd, Sn, Sb, I, Cs, Ba, Hf, Pb, Bi, Ra, La, Sm, Eu, Ho, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm. При создании базы данных разработчики придерживались трех основополагающих принципов: полнота, точность и согласованность. Предполагалось, что база должна содержать все данные, которые необходимы для моделирования поведения радионуклидов во всем возможном в реальных условиях диапазоне параметров. Точные диапазоны параметров не указаны, но насколько можно понять, база данных предназначена для моделирования относительно низкотемпературных процессов (0-80°C). Проверка точности данных в базе осуществляется путем сравнения результатов моделирования с экспериментально полученными значениями физических величин, описывающих процессы. База данных

ThermoChimie содержит информацию об энтальпиях образования и энергиях Гиббса образования веществ, константах реакций (константы равновесия, изменение энергии Гиббса, изменения энтальпии, энтальпии и теплоемкости реакции), абсолютные значения энтропий и теплоемкостей веществ. Для конденсированных веществ в базе хранятся значения мольных объемов. Все данные в базе согласованы в рамках основных законов термодинамики. Данные из базы могут быть экспортированы в форматы основных программ моделирования геохимических процессов. Существенная особенность базы данных — в ней хранятся сведения о растворимости веществ и свойствах водных растворов электролитов.

В статье [12] представлена информация об интернет-проекте WebBook (<http://webbook.nist.gov>). Это сайт, который предоставляет доступ к информации о химических и физических свойствах веществ. Сайт был создан в 1996 году и с тех пор непрерывно развивается. Представленные на сайте данные собраны группой сотрудников Национального института стандартов и технологий (НИСТ) США. Большинство данных получены экспериментально. Перечень данных, хранящихся в базе данных WebBook, представлен следующим списком: термодинамические свойства, теплоемкости веществ в конденсированном состоянии, энергетические характеристики ионов, данные о колебательных и электронных энергетических уровнях, частоты колебаний молекул, константы двухатомных молекул, термодинамические данные металлоорганических соединений, энтальпии сублимации, параметры точек кипения, постоянные Генри, теплофизические характеристики жидкостей, спектроскопические данные, названия, 2-D структуры молекул.

Разработчики базы приняли решение хранить данные в том виде и в той системе единиц, в которых они опубликованы с сохранением числа значащих цифр. Предусмотрена и возможность обратной связи, которой может воспользоваться читатель, обнаруживший ошибку в данных. Данные на сайте представлены в виде таблиц с возможностью построения графиков. Поиск вещества возможен по формуле, названию, индексу CAS.

Существенным недостатком справочника является ограниченный по температурным интервалам объем выводимой информации. Например, для воды в газообразном состоянии выводятся данные, начиная с 500 К, а для воды в конденсированном состоянии сведения выводятся до 500 К. Это означает, что данные справочника нельзя использовать для расчета равновесия пар-жидкость. Еще более существенным недостатком является статичность данных, уже много лет они не обновляются. Таким образом, значительная часть информации базы данных NIST Chemistry Webbook на сегодняшний день устарела.

База данных по свойствам материалов, разработанная в Институте проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук, представлена в работе [2]. Авторы сформулировали общие требования к базе данных по свойствам материалов, используемых в атомной энергетике, привели обзор основных функциональных возможностей и ключевых компонентов

разработанной ими базы данных. База данных содержит сведения о большом числе свойств (около 2500) относительно небольшого количества материалов (180). Свойства разбиты на 9 групп: неконденсируемые газы, замедлители, защитные материалы, конструкционные материалы, поглощающие материалы, продукты окисления, теплоносители, топливо, элементы периодической системы Д. И. Менделеева.

Информация в базу отбиралась после экспертного анализа и оценки. Рассматривались как общепринятые свойства (теплофизические, транспортные, физико-механические, диэлектрические), так и специфические свойства, используемые при моделировании процессов, протекающих на АЭС (выход газообразных продуктов деления, скорость распухания, коэффициент излучения). Каждое свойство в базе имеет ссылку на источник данных. Предусмотрена возможность создания базы данных пользователя, что позволяет создавать специализированную базу для конкретного расчетного кода и проводить эксперименты с пользовательской базой, не нарушая при этом информации основной базы данных.

Для хранения информации в базе данных использован формат XML (eXtensible Markup Language), который обладает удобным инструментарием для ввода, вывода, экспорта и импорта данных и является универсальным форматом для обмена информацией между различными системами.

База данных для термодинамического анализа материалов ядерной энергетики, включая бинарные и тройные системы U-Th, U-Pu, Th-Pu, and (U, Th, Pu)-X (где X = Al, Co, Cr, Cu, Fe, Ga, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, Si, Ta, W, Zr), представлена в статье [13]. База данных позволяет прогнозировать поведение материалов, в частности, с ее помощью можно получать информацию о стабильном и метастабильном фазовом равновесии, областях существования веществ. Данную базу можно использовать также для построения более сложных моделей многокомпонентных термодинамических систем. Статья содержит большое количество иллюстративного материала, примеры двойных и тройных фазовых диаграмм, построенных с использованием информации из базы данных.

В работе [16] представлена база данных по свойствам системы U-Pu-Zr-Np-Am-Fe, которая предназначена для разработки металлических топлив, содержащих малые актиниды. Свойства бинарных систем, содержащих Np, Am и Fe, были оценены с использованием метода CALPHAD. Построены фазовые диаграммы тройных систем, при расчете которых были использованы параметры бинарных систем и экспериментальные данные. Обеспечивается удовлетворительное согласие фазовых диаграмм с данными эксперимента. Полученная база данных содержится в формате, который обеспечивает возможность ее использования с программой термодинамического моделирования Thermocalc.

База данных согласованных термодинамических величин, предназначенная для термодинамического моделирования ядерного топлива

нового поколения, описана в статье [17]. Список химических элементов, из которых образованы вещества в базе: Ba-C-Cs-Fe-La-Mo-O-Pu-Ru-Si-Sr-U-Zr + Ar-H. База содержит информацию о свойствах 78 бинарных, 34 квазибинарных, 18 тройных, 2 квазичетверных системах, 219 конденсированном и 151 газообразном веществе в интервале температур от 298 до 3500 К. Указанные данные позволяют рассчитать фазовые диаграммы, химические потенциалы, энтальпии смешения, теплоемкости и т. д. При подготовке данных за основу была взята база данных SGTE [18].

В работе [5] рассмотрена база данных по термодинамическим свойствам NUCLEA, которая развивается при финансовой поддержке ЕС. База данных NUCLEA предназначена для термодинамического моделирования аварийных ситуаций на атомных электростанциях, в частности, для моделирования кориума. Расчет фазового и равновесного состава сложных термодинамических систем производится на компьютере с использованием специальной программы. База содержит данные о свойствах веществ, образованных 20 химическими элементами: O, U, Zr, Ag, In, B, C, Fe, Cr, Ni, Ba, La, Sr, Ru, Al, Ca, Mg, Si, Ar, H, также информацию о свойствах 15 оксидных систем: UO_2 , ZrO_2 , In_2O_3 , B_2O_3 , FeO , Fe_2O_3 , Cr_2O_3 , NiO , BaO , La_2O_3 , SrO , Al_2O_3 , CaO , MgO , SiO_2 . Используемая с базой программа позволяет рассчитывать фазовые диаграммы, фазовый и равновесный состав. Ее можно использовать в сочетании с программой расчета гидродинамических процессов, а также для расчета состава выделяемых газообразных продуктов. Приведенные в статье результаты сравнения вычисленных и экспериментально полученных значений показывают, что программу и базу данных можно использовать для моделирования кориума. Вопросы термодинамического моделирования кориума и результаты экспериментов приводятся также в работе [19].

В статье [20] описана технология Интернет-доступа к научно-технической информации, в частности, к функциям по свойствам рабочих тел и материалов атомной энергетики на удаленном сервере, который находится в сети Интернет по адресу http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/VPU_Book_New/mas/index.html. Авторы статьи создали интернет-справочник, в рамках которого исследователям предоставлен доступ к теплофизическим свойствам воды, водяного пара, водорода, гелия, аргона, воздуха, свинца, висмута, галлия, лития, натрия, калия, цезия, урана, плутония, тория, диоксида урана, графита, циркония и эвтектического сплава Bi-Sb. Предусмотрены возможности проведения расчетов теплофизических свойств, термодинамического анализа рабочих процессов и циклов атомных энергетических установок в режиме on-line и скачивания пакета функций для расчета теплофизических свойств перечисленных выше веществ и материалов. Исследователь имеет возможность внедрить соответствующие функции в свои собственные расчеты, которые зачастую проводятся с использованием специализированных инженерных и научно-технических компьютерных программ.

Как показывает проведенный обзор литературы, потребности ядерной энергетики в справочных данных о свойствах веществ и материалов достаточно велики. Это обстоятельство обуславливает необходимость создания отраслевых центров справочных данных, которые на регулярной основе занимались бы анализом всей доступной информации о свойствах веществ и материалов, пополняли и корректировали бы базы данных, а также распространяли бы актуальную информацию. Например, отраслевая служба стандартных справочных данных о физических константах и свойствах веществ и материалов (ОСССД), которая обеспечивает разработку и использование стандартных справочных данных в области атомной науки, техники и технологии, действует в рамках Госкорпорации Росатом (<http://gsssd-rosatom.mephi.ru/>). Основные базы данных ОСССД перечислены на странице <http://www.gsssd-rosatom.mephi.ru/DB-links.php>. В число задач, стоящих перед ОСССД входят, в частности, обеспечение аттестованными справочными данными организаций Росатома; определение и прогнозирование потребностей в стандартных справочных данных; разработка и реализация программ создания стандартных справочных данных.

Подробная информация о химических элементах, применяемых в атомной энергетике, приводится по адресу <http://www.ippe.ru/podr/abbn/libr/rosfond.php>.

Литература

1. Clarno K.T., Philip B., Cochran W.K., Sampatha R.S., Allua S., Baraia P., Simunovica S., Berrill M.A., Otta L.J., Pannalaa S., Dilts G.A., Mihailab B., Yesilyurtc G., Leec J.H., Banfield J.E. The AMP (Advanced MultiPhysics) Nuclear Fuel Performance code // Nuclear Engineering and Design, 2012, vol. 252, p. 108–120.
2. Беликов В.В., Вабищевич Н.П., Вабищевич П.Н., Катъшков Ю.В., Мосунова Н.А. База данных по свойствам материалов // Математическое моделирование, 2014, том 26, номер 8, стр. 20-30.
3. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. Справочник под общей редакцией П.Л. Кириллова. — М.: ИздАТ, 2007, 200 с.
4. Jo S., Bilbao y Leon S., Kim J., Kim Y. Development of an Online Nuclear Materials Thermo-physical Property Database (THERPRO) // Journal of the Korean Physical Society, 2011, vol. 59, No. 2, p. 1107-1110.
5. Bakardjieva S., Barrachin M., Bechta S., Bottomley D., Brissoneau L., Cheynet B., Fischer E., Journeau C., Kiselova M., Mezentseva L., Piluso P., Wiss T. Improvement of the European thermodynamic database NUCLEA // Progress in Nuclear Energy, 2010, vol. 52, p. 84–96.
6. Altmaier M., Brendler V., Bube C., Marquardt C., Moog H.C., Richter A., Scharge T., Voigt W., Wilhelm S., THEREDA Thermodynamic Reference Database Summary of Final Report, 2011, 72 p. Режим доступа: <https://www.researchgate.net/publication/290429265>.

7. Grivé M., Campos I., Colàs E., Perrone J. THERMOCHIMIE. TDB guidelines. 2015. Режим доступа: <https://www.thermochimie-tdb.com/>
8. E. Giffaut et. al. Andra thermodynamic database for performance assessment: ThermoChimie // Applied Geochemistry, 2011, vol. 49, p. 225–236.
9. Thoenen T., Hummel W., Berner U., Curti E. The PSI/Nagra Chemical Thermodynamic Database. 2014. Режим доступа: https://www.psi.ch/les/DatabaseEN/PSI-Bericht%2014-04_final_druckerei.pdf.
10. Гурвич Л.В. ИВТАНТЕРМО – автоматизированная система данных о термодинамических свойствах веществ // Вестник АН СССР, 1983, № 3, с. 54-65.
11. Belov G.V., Iorish V.S., Yungman V.S. IVTANTHERMO for Windows - database on thermodynamic properties and related software. CALPHAD, 1999, vol. 23, No. 2, p. 173-180.
12. Linstrom P.J., Mallard W.C. The NIST Chemistry WebBook: A Chemical Data Resource on the Internet // Journal of Chemical and Engineering Data, 2001, vol. 46, p. 1059-1063
13. Wang C.P., Li Z.S., Fang W., and Liu X.J. Thermodynamic Database and the Phase Diagrams of the (U, Th, Pu)-X Binary Systems // Journal of Phase Equilibria and Diffusion, 2009, vol. 30, No. 5, p. 535–552.
14. Gurvich L.V. Reference books and data banks on the thermodynamic properties of individual substances // Pure and Applied Chemistry, 1989, vol. 61, No. 6, p. 1027-1031.
15. Cheney J., Chiticariu L., Tan W.-C. Provenance in Databases: Why, How, and Where // Foundations and Trends in Databases - FTDB , 2009, vol. 1, No. 4, p. 379-474.
16. Kurata M. Thermodynamic database on U-Pu-Zr-Np-Am-Fe alloy system II - Evaluation of Np, Am, and Fe containing systems // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2010, vol. 9, p.1-8.
17. Cheynet B., Fischer E. MЕРHISTA: A thermodynamic database for new generation nuclear fuels. 2007. Режим доступа: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00222025>.
18. Dinsdale A.T. SGTE data for pure elements // Calphad, 1991, vol. 15, p. 317-425.
19. Bakardjieva S., Barrachin M., Bechta S., Bezdicka P., Bottomley D., Brissonneau L., Cheynet B., Dugne O., Fischer E., Fischer M., Gusarov V., Journeau C., Khabensky V., Kiselova M., Manara D., Piluso P., Sheindlin M., Tyrpekl V., Wiss T. Quality improvements of thermodynamic data applied to corium interactions for severe accident modelling in SARNET2 // Annals of Nuclear Energy, 2014, vol. 74, p. 110–124.
20. Очков В.Ф., Яньков Г.Г. “Облачный” сервис по свойствам рабочих тел и материалов атомной энергетики // Автоматизация и ИТ в энергетике, 2012, № 3, с. 9-17.