

使用多物理场仿真 揭示复杂材料特性

加拿大核实验室的研究人员利用多物理场仿真透彻地分析核燃料的复杂材料特性。

作者 SARAH FIELDS

当工程师们探索是否可能用多物理场仿真软件替代成熟但却繁琐的内部代码时，会遇到什么情况呢？在加拿大顶尖核科学技术组织——加拿大核实验室的计算技术分部（Canadian Nuclear Laboratories, 简称 CNL），核工程师们就这一问题展开了深入探索。

在致力于提高反应堆的安全性、效率和经济性的核工程领域，经常会采用成熟而稳定的内部计算机代码进行模拟研究。但不幸的是，即使对系统进行微小的调整，也必须梳理大量的代码才能探明调整对系统的潜在影响，这对创新构成了障碍。作为修改成熟代码和沿用代码的替代方案，多物理场仿真平台

提供了一个让工程师能在数据和建模方法方面进行探索的环境，从而省去了修订冗长代码的麻烦。

作为一名 CNL 的燃料安全科学家，Andrew Prudil 在使用仿真软件对存在已久且看似不可改变的核反应堆设计进行改进的研究中扮演着重要角色。

“从本质上讲，核科学就是材料科学，但需要考虑辐射的影响。” Prudil 解释说：“我们研究的材料包括核燃料，以及一些外围组件的成分。”

核燃料：复杂的材料科学问题

Prudil 利用多物理场仿真软件建立了一个仿真模型，内含数量惊人的物

理现象。他的模拟工作包括核燃料芯块描述，涵盖热量传输、结构变形、机械接触、裂变气体释放引起的压力累积，以及由于晶粒生长、辐射损伤和燃烧引起的微观结构变化以及核燃料外围包壳的特性。

在核反应堆中，原始核燃料芯块（图 1）被放置在包壳或密封金属管内。受到辐射时，这些燃料芯块温度升高，并将热量通过密封金属管传递给水。热水最终被用来产生蒸汽，进而发电，这一过程与常规发电厂的工艺流程一致。

在受到辐射时，裂变反应会在燃料芯块内产生热量，导致燃料芯块的高温、高热梯度和热膨胀。由于裂变产物聚集在燃料芯块中，因此还需在研究中考虑核反应特有的现象。

图 1 所示为核燃料芯块在经历持续高温运行后的复杂微观结构。最初形成的晶粒结构仅保持在外部最接近冷却剂处，因为这里的温度最低。在温度略高处，晶粒生长（粗化），形成等轴晶粒生长区。而在温度最高处，蒸汽的输送机制使燃料中的孔隙沿温度梯度（朝中心方向）迁移，形成中心空隙，并在其尾流中留下长柱状晶粒。

由于上述影响，陶瓷核燃料内部会出现裂纹。另一方面，陶瓷与金属包壳（用于包裹核燃料的金属层）之间存在接触，高能裂变产物（如伽马和中子辐射）会改变所有材料的微观结构，因此必须考虑辐射损伤。而裂变时原子一分为二，导致占据的空间更大，所以还存在宏观膨胀。

稀有气体氙和氪这两种裂变产物均为惰性，会在燃料芯块内部形成气泡（图 2）。

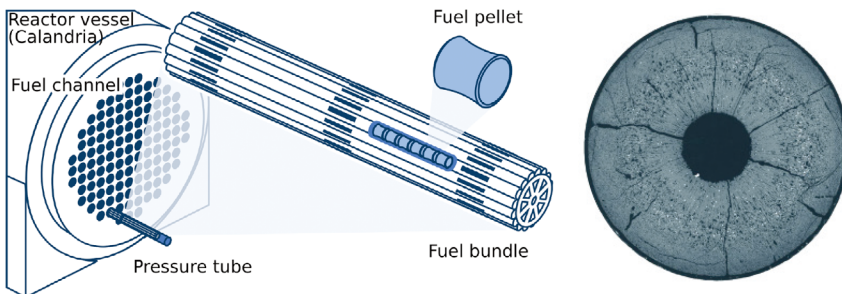


图 1. 左图显示燃料芯块在燃料棒束中的位置。右图为燃料芯块截面的显微照片，显示了在运行过程中产生的微观结构。图注：Reactor Vessel (Calandria) - 反应堆容器（排管式堆容器）；Fuel Channel - 燃料通道；Pressure tube - 压力管；Fuel pellet - 燃料芯块；Fuel bundle - 燃料棒束

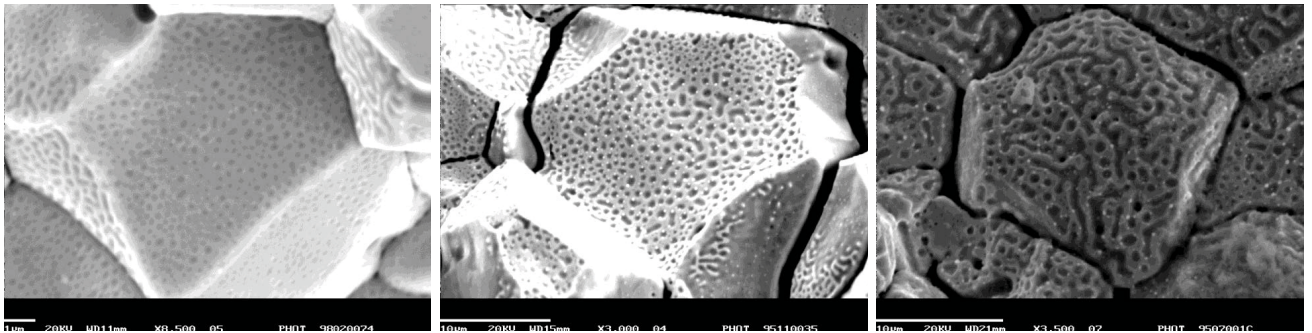


图 2. 显微照片显示了二氧化铀燃料晶界上裂变气泡的发展。随着燃耗的增加, 从左到右, 气泡变得越来越大, 并进一步相互连通。
“Development of grain-face porosity in irradiated fuel”, J. Nuc. 2004 年, 第 325 卷

还有一些腐蚀问题也需加以考虑, 这是因为辐射环境中的高温水会促使辐射分解产物的形成, 进而腐蚀包壳外部。

» 防止核燃料失效

由于核燃料芯块的特性会随着辐射发生显著变化, 因此工程师们在很大程度上需要依靠模型在实验结果之间进行插值处理, 以预测燃料的性能参数, 如峰值温度、气体压力和包壳应变等。类似地, 想知道在辐射环境中会如何显现各种设计变化, 也需要大量模拟并通过实际测量加以验证。

Prudil 研究的主要目标之一是模拟及预测包壳的应变, 因为包壳的变形是燃料失效的重要原因。一旦建立起包壳应变模型, 就可以在计算机上优化系统。优化策略包括直接改变燃料、包壳与燃料的间隙、或燃料进入反应堆后的处理方式。

Prudil 表示: “建立模型相对简单, 但是要为模型赋予正确的材料属性就不那么容易了, 尤其是这些属性会随时间及辐射强度变化。”完成一个新模型后, 他会比较模拟结果与实验结果, 以评估模型的预测能力。

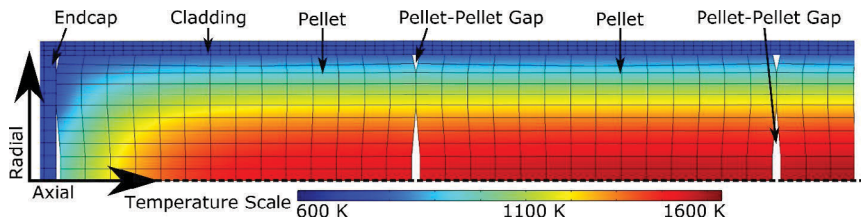


图 3. “燃料和包壳建模工具 (FAST)” 的仿真结果显示了整个包壳、燃料芯块及芯块-芯块间隙的温度。图注: Endcap - 端盖; Cladding - 包壳; Pellet - 芯块; Pellet-Pellet Gap - 芯块-芯块间隙; Radial - 径向; Axial - 轴向; Temperature Scale - 温标

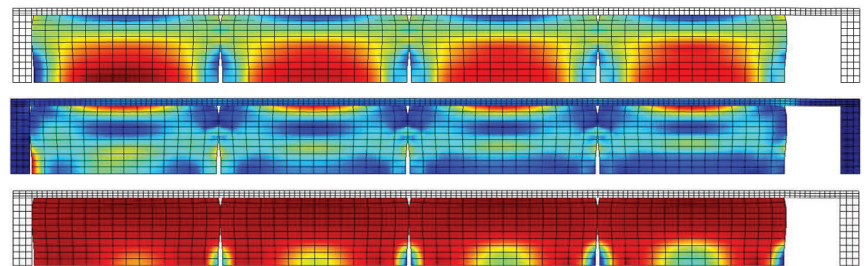


图 4. FAST 的仿真结果显示了整个包壳、燃料芯块以及芯块-芯块间隙中的静水压力(上)、von Mises 应力(中)和轴向蠕变(下)。

更换燃料本身是一种极具吸引力的核反应堆改进方法, 因为核燃料本来就是设计为可更换的。由于无需更换任何反应堆零件, 所以这种方法比较节省成本: 工程师只需在反应堆需要燃料时为系统提供新的燃料。

“我们面临的最大挑战是准确地描述所研究的材料。” Prudil 指出。

» 在一个模型中耦合多种物理现象

Prudil 使用 COMSOL Multiphysics® 软件创建了模拟燃料和包壳的模型(简称 FAST), 以捕获核燃料、包壳以及两者间隙的复杂热传输、固体力学和材料特性。图 3 显示了芯块与包壳由于核反应所产生的温度分布。

Prudil 指出: “使用 COMSOL® 软件, 不必过多关注数值方法和编程, 以

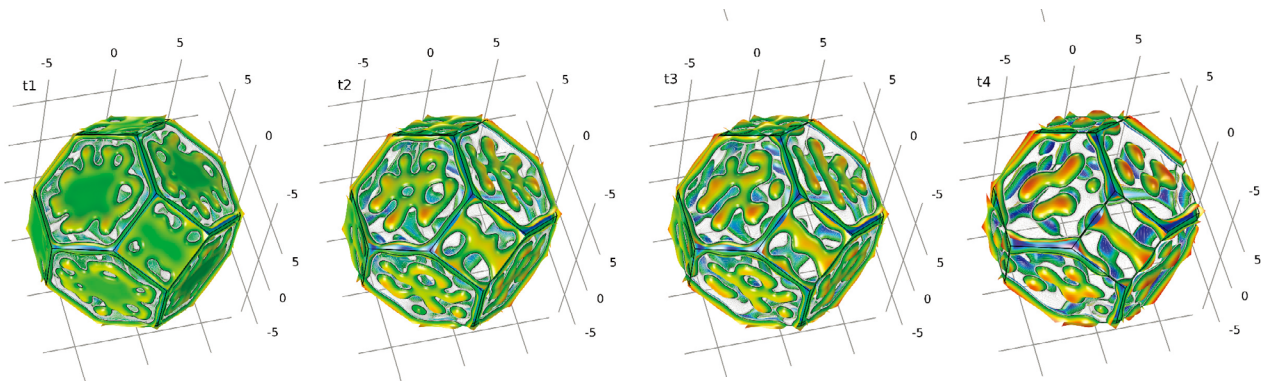


图 5. 从左至右, 对晶界上气泡形成、运动和聚结的仿真结果。

及求解过程和后处理, 我可以直接着手处理数学和物理相关的问题。与采用内部代码进行数值模拟相比, 使用 COMSOL 软件的相关费用更低、效率更高。”

Prudil 还从 FAST 模型中获得了静水压力、von Mises 应力以及贯穿包壳和燃料芯块的轴向蠕变(图 4)等仿真结果。这些物理场的分布包含了各项设计参数(如长径比和腔室尺寸)以及运行因素(如功率水平和冷却剂温度)的影响。

» 晶界孔隙演化模拟

为了以不同方式扩展模拟工具并揭示反应堆的性能, 利用 COMSOL® 提供的基于方程建模的功能, Prudil 模拟了从燃料晶粒向外的气体扩散, 以及随后晶粒边界上气泡的形成和运动(图 5)。

当核燃料承受辐射并发生化学变化时, 气体从燃料晶粒中渗出并形成气泡。然后, 这些气泡四处移动、合并(图 5)。在传统的相场分析中会模拟燃料晶粒的体积。本文所述技术的新颖和强大之处在于仿真中忽略了固体, 而只模拟固体和气体之间的运动表面。这样就可以将三维问题转化为二维问题, 从而显著减少了所需的计算资源。

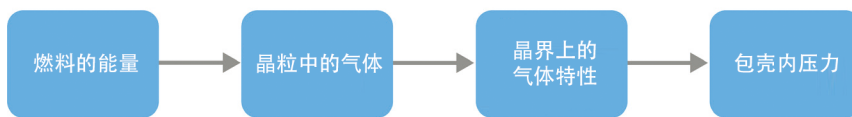


图 6. 燃料的降解过程。

模型中在晶粒表面耦合了两个弱形式方程, 一个与到气泡表面的距离相关, 另一个则与化学势相关。只要知道从燃料中排出的气体量, 该方法就可以计算燃料单元内部的导热系数和气体压力。这一分析得出的结果让 Prudil 能够确定燃料特性的其他关键指标。这些计算结果被用于燃料退化的非线性描述(图 6)。

根据仿真结果可知, 如果压力足够低则有可能获得最大利用率, 这样燃料可以继续承受辐射, 这是一项对系统安全具有重大影响的发现。

» 仿真驱动燃料技术创新

通过使用多物理场仿真, CNL 的工程师们能够创建有用的工具, 并为加快设计的迭代和创新开辟道路。Prudil 认为多物理场仿真展现了核工程在其他领域的发展前景, 如事故容错燃料的开发。工程师们对设计能够抵抗严重事故的燃料产生了兴趣, 这为他们重新思考

燃料创造了机会。

从长远来看, Prudil 注意到仿真软件在小型模块反应堆开发中的作用, 这代表核反应堆设计向更小型、更便于建造的方向转变, 并有可能降低反应堆高昂的建造投资。小型模块反应堆可采用新材料制成, 并具有新的几何形状和安全模式, 这扭转了数十年来核反应堆日益增大的趋势。

同时, Prudil 创建的对现有反应堆的综合表述, 将继续为人们深入了解核反应堆多层次的复杂性提供宝贵的见解。☉



Andrew Prudil, CNL 的燃料安全科学家。