ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА VOLUME OF FLUID ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ПЛАВЛЕНИЯ И ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ТОПЛИВА

Кабдылқақов Е.А., Сураев А.С.

Филиал «Институт атомной энергии» РГП НЯЦ РК, Курчатов, Казахстан

E-mail для контактов: kabdylkakov@nnc.kz; suraev@nnc.kz

В работе рассмотрена возможность применения метода многофазной жидкости *Volume of Fluid* (VOF), программы Ansys Fluent, для численного моделирования процесса плавления материалов экспериментального устройства и их перемещения по объему расчетной области. Для моделирования выбрана конструкция типового экспериментального устройства, испытываемого в реакторе, разработана двухмерная расчетная модель, описаны методы решения тепловой задачи, приведены результаты моделирования.

Ключевые слова: экспериментальное устройство, безопасность, расплав, метод объема жидкости, фазовый переход, вязкость.

Введение

Расчетное обоснование безопасности всех экспериментальных работ, связанных с реакторными и внереакторными экспериментами, проводится в Филиале ИАЭ РГП НЯЦ РК с помощью лицензионного программного обеспечения ANSYS Fluent [1], которое предназначено для решения широкого спектра задач теплофизики, гидро-газодинамики, аэродинамики, химии и многих других [2–5].

При выполнении анализа условий безопасного проведения реакторных экспериментов возникает необходимость моделирования теплового состояния топливной секции в момент ее плавления и перемещения в объеме устройства в расплавленном состоянии. В данный момент в филиале ИАЭ РГП НЯЦ РК такие задачи решаются путем поэтапного перестроения геометрии модели, когда новое положение и форма расплава топлива и конструкционных материалов задается расчетчиком самостоятельно [6–8]. Такой подход содержит в себе ряд допущений и предположений, а также требует значительных временных затрат на перестройку модели.

В работе представлен новый подход к решению задач моделирования теплового состояния экспериментальных устройств, который способствует развитию применяемых методов компьютерного моделирования и в существенной мере расширяет спектр решаемых задач.

В программе Ansys Fluent для решения подобных задач используется модель многофазной жидкости, а именно метод объема жидкости Volume of Fluid (VOF). Метод VOF может моделировать две или более несмешивающихся жидкости (фаз), решая один набор уравнений движения и отслеживая объемную долю каждой из них во всей расчетной области. Данный метод успешно применяется для прогнозирования разрыва струи, решения задачи перемещения больших пузырьков в жидкости, движения жидкости после прорыва плотины, а также для отслеживания границ раздела «жидкость-газ» [9, 10]. Если объемную долю q-ой фракции в ячейке обозначить как α_q , то в процессе моделирования возможны три состояния:

– $a_q = 0$ – в расчетной ячейке *q*-ая фракция отсутствует;

 $- \alpha_q = l - ячейка заполнена$ *q*-ой фракцией на 100 %;

0 < α_q < 1 – расчетная ячейка частично заполнена *q*-ой фракцией

Использующиеся в уравнениях неразрывности и движения теплофизические свойства жидкости определяются с учетом объемной доли каждой из фракций в расчетном элементе. В качестве примера приведена формула вычисления плотности материала:

$$\rho = \sum_{q=1}^{n} \alpha_q \cdot \rho_q$$

Таким образом, решая единый набор уравнений импульса, отслеживается объемная доля каждой из фаз многофазной модели по всей расчетной области [11].

В программе Ansys Fluent имеется возможность оперировать двумя типами материалов: «fluid» и «solid». Материалы типа «solid» используется для моделирования твердых тел, в которых уравнения скорости не решаются. Материалы типа «fluid» предназначены для моделирования поведения жидкостей и газов под действием внутренних и внешних сил, например, гравитации. Решение задачи плавления топлива осложняется тем, что необходимо моделировать два последовательных состояния материала – первое состояние соответствует неподвижному твердому телу до температуры плавления, второе – характеризуется изменением фазового состояния в отдельных ячейках материала, которые достигли температуры плавления и могут свободно перемещаться в пределах расчетной области.

Реализация такой задачи возможна в программе Ansys Fluent при использовании модели «solidification and melting» [12], которая отслеживает фазовое состояние каждой ячейки материала и контролирует решение уравнений скорости и импульса для данной области.

Помимо этого, есть возможность задавать функциональные зависимости свойств материалов, таких как плотность, вязкость, теплоемкость и теплопроводность от температуры, что обеспечивает наиболее точное моделирование их поведения в различных тепловых состояниях.

Постановка задачи

Цель данной работы – исследование возможности применения программного комплекса Ansys Fluent для моделирования теплового состояния экспериментального устройства (ЭУ) в момент фазового перехода материалов.

Для достижения данной цели построена расчетная модель ЭУ. Расчетная модель типового ЭУ выполнена в двухмерной постановке и имеет осевую симметрию. Модель состоит из корпуса, топливного стержня, топливной оболочки и свинцового теплоносителя (рисунок 1). Конечно-элементная сетка ЭУ состоит из 139000 элементов. Минимальный размер расчетного конечного элемента составляет 0,2 мм.





Рисунок 1. Расчетная двухмерная модель ЭУ: а) геометрия расчетной области, б) расчетная конечно-элементная сетка

Учитывая симметричность экспериментального устройства относительно вертикальной оси, расчетная область представлена одной второй частью двухмерной модели ЭУ. В таблице 1 представлены геометрические параметры ЭУ.

В качестве материала топлива задан диоксид урана, а оболочкой топлива является нержавеющая сталь ЭП-823, которая также служит материалом корпуса ЭУ. Для обеспечения неподвижности в расчетной области материалов типа *«fluid»*, при температуре ниже точки фазового перехода данным материалам заданы большие значения вязкости (10⁵ кг/м·с). Вязкость данных материалов имеет линейную зависимость от температуры. В таблице 2 приведены заданные зависимости вязкости материалов от температуры.

Таблица 1. Геометрические параметры ЭУ

Параметр	Значение
Высота экспериментального устройства, мм	278
Высота топливного столба, мм	121
Внутренний радиус корпуса, мм	18
Толщина корпуса, мм	2
Внутренний радиус топлива, мм	3,8
Внешний радиус топлива, мм	8,8
Толщина оболочки топлива, мм	0,6

Таблица 2. Зависимость вязкости диоксида урана и стали от температуры

Диоксид урана		Сталь ЭП-823	
Интервал температуры, К	μ, кг/м∙с	µ, кг/м∙с Интервал температуры, К	
300-2800	10 ⁵	300–1650	10⁵
2800–2890	105–50	1650–1698	105–50
2890-3500	50–1,06	1698–3500	50–0,3

Выбор этих температурных интервалов обусловлен тем, что необходимо обеспечить неподвижность жидкой фракции в расчетной области при температурах ниже точки фазового перехода и постепенное изменение вязкости с изменением температуры, поскольку резкое изменение вязкости приводит к потере сходимости задачи. Принятая в данной работе температура начала фазового перехода для топлива составляет 3120 K, для стали ЭП-823 – 1670 K, для свинца – 600 K.

Свойства материалов ЭУ, такие как теплоемкость и теплопроводность, были заданы для широкого диапазона температур, и заимствованы из справочной литературы [13, 14].

Начальные условия

Для моделирования плавления материала методом VOF необходимо, чтобы материал при температуре ниже точки фазового перехода был неподвижным, и после разогрева до температуры фазового перехода начал перемещаться в расчетной области. С этой целью проведены два расчета с различными начальными условиями.

В первом расчете:

включен учет влияния сил гравитации;

 начальная температура топлива из диоксида урана равна 300 К;

 начальная температура стальной оболочки топлива равна 300 К;

 начальная температура свинцового теплоносителя равна 700 К;

начальная температура стального корпуса ЭУ равна 300 К.

Во втором расчете:

включен учет влияния сил гравитации;

 начальная температура топлива из диоксида урана равна 3500 К;

 начальная температура стальной оболочки топлива равна 1000 К;

- начальная температура свинцового теплоносителя равна 700 К:

 начальная температура стального корпуса ЭУ равна 300 К.

При начальной температуре 3500 К вязкость диоксида урана имеет значение 1,06 кг/м·с, которое ниже значения вязкости диоксида урана при 300 К в 10⁵ раз [14].

В первом расчете ожидается, что фракция диоксида урана и стали будет оставаться неподвижной на протяжении всего времени расчета, а значение температуры теплоносителя (свинца) снизится за счет теплопередачи диоксиду урана и стали.

Во втором расчете предполагается, что фракция топлива при температуре 3500 К будет перемещаться под действием гравитации вниз, снижая собственную температуру за счет теплообмена с другими материалами. Стальная оболочка, поглощая тепло от диоксида урана, достигнет температуры плавления и тоже начнет перемещаться в объеме ЭУ под действием сил гравитации.



Результаты расчета теплового состояния ЭУ

при начальной температуре диоксида урана 300 К Обработка результатов расчетов проведена с использованием программы CFD-Post. Следует заметить, что программа CFD-Post входит в программный пакет ANSYS и предназначена для обработки результатов моделирования. В данной программе имеется возможность создавать анимационное видео по результатам нестационарного решения, что позволяет визуализировать процесс взаимодействия материалов ЭУ между собой.

В ходе решения получены результаты расчета в виде распределений объемных фракций материалов для различных значений времени. Результаты первого расчета, где начальная температура диоксида урана и его стальной оболочки равны 300 К, приведены на рисунке 2.

На протяжении всего расчета наблюдается процесс теплообмена между свинцовым теплоносителем, топливом и стальной оболочкой. Температура свинца снижается вдоль стенок стальной оболочки топлива и стального корпуса ЭУ (рисунок 2, б-г). При снижении температуры свинца вдоль границы взаимодействия, вязкость свинца увеличивается, что ведет к «затвердеванию» материала.



Рисунок 2. Распределение объемной фракции материалов и температуры в ЭУ для различных значений времени при начальной температуре топлива 300 К

700.0

660.0

620.0

580.0

540.0

500.0

460.0

420.0

380.0

340.0

300.0

700.0

660.0

620.0

580.0

540.0

500.0

460.0

420.0

380.0

340.0

300.0

[K]

[K]

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА VOLUME OF FLUID ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ПЛАВЛЕНИЯ И ПЕРЕМЕЩЕНИЯ ТОПЛИВА



Рисунок 3. Распределение объемной фракции материалов и температуры в ЭУ для различных значений времени при начальной температуре топлива 3500 К

Стальная оболочка и топливо из диоксида урана увеличивают свою температуру, поглощая тепло от свинцового теплоносителя (рисунок 2, б–г). Вследствие чего температура данных материалов не достигает точки фазового перехода. Поэтому объемные фракции топлива и стальной оболочки остаются неподвижными, сохраняют начальную геометрическую форму и целостность на протяжении всего расчета (рисунок 2).

Результаты расчета теплового состояния ЭУ при начальной температуре диоксида урана 3500 К

На рисунке 3 представлено распределение объемных фракций материалов ЭУ при начальной температуре диоксида уранового топлива 3500 К.

Свинцовый теплоноситель с начальной температурой 700 К нагревается на протяжении всего времени расчета, поглощая тепло от топлива и стальной оболочки (рисунок 3, а–г).

Стальная оболочка топлива имеет температуру ниже точки фазового перехода. В начальный момент времени (рисунок 3, а) целостность данного материала сохраняется. В процессе теплообмена с топливом стальная оболочка разогревается (рисунок 3, б–г), снижается ее вязкость, и начинается процесс ее разрушения. Наблюдается всплытие фракции стальной оболочки в объеме свинца, поскольку плотность стала меньше. Диоксид урана имеет низкую вязкость (таблица 2) при начально заданной температуре 3500 К, поэтому данный материал теряет свою начально заданную геометрическую форму и целостность (рисунок 3, б– г). При расчетном времени 1,5 с (рисунок 3, г) можно увидеть, что температура топлива в некоторых расчетных областях ниже точки фазового перехода, и данный материал начинает «затвердевать» из-за увеличения вязкости материала.

Выводы

В программе Ansys Fluent с использованием модели многофазной жидкости методом объема жидкости (Volume of Fluid) проведен численный расчет процесса плавления материалов ЭУ типовой конструкции. Расчет проведен для различных начальных значений температуры топлива и его стальной оболочки. Начальная температура свинцового теплоносителя оставалась неизменной. В результате численных расчетов установлено:

 применение метода VOF позволяет получить распределение объемных фракций материалов ЭУ для различных значений времени, по которым можно визуализировать динамическую картину перемещения материалов в расчетной области;

 с использованием метода VOF, с учетом модели плавления и кристаллизации (solidification and melting) и путем задания свойств материала в зависимости от температуры, было достигнуто состояние, при котором топливо и его стальная оболочка, будучи материалами типа *«fluid»*, сохраняют свою геометрическую форму при температуре ниже точки фазового перехода;

 получена картина перемещения материалов
ЭУ под действием сил гравитации и их затвердевания при снижении температуры.

Таким образом, использование метода VOF при моделировании теплового состояния ЭУ позволяет отказаться от многократных пошаговых перестроений геометрии модели и ее сетки, проводить расчет теплового состояния ЭУ с учетом возможных фазовых переходов, отслеживать перемещение жидких фракций и их взаимодействие с конструкционными материалами.

Данная работа выполнена в рамках научнотехнической программы № BR09158470 «Развитие атомной энергетики в Республике Казахстан».

Литература

- 1. ANSYS, Inc. Products Release 14.5.7, 2013.
- Shoev G. V. et al. Development and testing of a numerical simulation method for thermally nonequilibrium dissociating flows in ANSYS Fluent //Thermophysics and Aeromechanics. – 2016. – T. 23. – No. 2. – P. 151–163.
- Panchal S. et al. Thermal design and simulation of minichannel cold plate for water cooled large sized prismatic lithium-ion battery //Applied Thermal Engineering. – 2017. – T. 122. – P. 80–90.
- Muis A., Sutikno P. Design and simulation of very low head axial hydraulic turbine with variation of swirl velocity criterion //International Journal of Fluid Machinery and Systems. – 2014. – T. 7. – No. 2. – P. 68–79.
- Safiullina L., Gubaydullin I. Numerical analysis of parameter identifiability for a mathematical model of a chemical reaction //International Journal of Engineering Systems Modelling and Simulation. – 2020. – T. 11. – No. 4. – P. 207–213.
- Витюк Г. А. и др. Расчет теплогидравлических параметров испытаний топлива быстрого реактора со свинцово-висмутовым теплоносителем // Вестник НЯЦ РК. – 2016. – № 3. – С. 77–85.
- Сулейменов Н. А., Пахниц А. В., Сураев А. С. Внутриреакторный эксперимент по испытанию твэла быстрого реактора в условиях аварии с потерей теплоносителя // Вестник НЯЦ РК. – 2021. – № 1. – С. 133–138.
- Технический отчет о научно-исследовательской работе анализ условий безопасного проведения испытаний экспериментального устройства ID-6. Курчатов – 2020.
- Issakhov A., Zhandaulet Y., Nogaeva A. Numerical simulation of dam break flow for various forms of the obstacle by VOF method //International Journal of Multiphase Flow. – 2018. – T. 109. – P. 191–206.
- Сураев А. С., Иркимбеков Р. А., Вурим А. Д. Моделирование взаимодействия струи расплава со стальной стенкой // Вестник НЯЦ РК. – 2020. – № 1. – С. 19–22.

- Анализ результатов эксперимента WF. Отчет по научно-исследовательской работе // Филиал ИАЭ РГП НЯЦ РК. – Курчатов, 2006.
- Fluent A. ANSYS fluent theory guide 15.0 //ANSYS, Canonsburg, PA. – 2013. – T. 33.
- Haynes W. M. CRC handbook of chemistry and physics, (Internet Version 2011) //Taylor Francis Group: Boca Raton, FL. – 2011.
- Чиркин, В.С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники / В.С. Чиркин. – М.: Атомиздат, 1968. – 121–128, 237–239, 291–294 с.

REFERENCES

- 1. ANSYS, Inc. Products Release 14.5.7, 2013.
- Shoev G. V. et al. Development and testing of a numerical simulation method for thermally nonequilibrium dissociating flows in ANSYS Fluent //Thermophysics and Aeromechanics. – 2016. – T. 23. – No. 2. – P. 151–163.
- Panchal S. et al. Thermal design and simulation of minichannel cold plate for water cooled large sized prismatic lithium-ion battery //Applied Thermal Engineering. – 2017. – T. 122. – P. 80–90.
- Muis A., Sutikno P. Design and simulation of very low head axial hydraulic turbine with variation of swirl velocity criterion //International Journal of Fluid Machinery and Systems. – 2014. – T. 7. – No. 2. – P. 68–79.
- Safiullina L., Gubaydullin I. Numerical analysis of parameter identifiability for a mathematical model of a chemical reaction //International Journal of Engineering Systems Modelling and Simulation. – 2020. – T. 11. – No. 4. – P. 207–213.
- Vityuk G. A. i dr. Raschet teplogidravlicheskikh parametrov ispytaniy topliva bystrogo reaktora so svintsovovismutovym teplonositelem // Vestnik NYaTs RK. – 2016. – No. 3. – P. 77–85.
- Suleymenov N. A., Pakhnits A. V., Suraev A. S. Vnutrireaktornyy eksperiment po ispytaniyu tvela bystrogo reaktora v usloviyakh avarii s poterey teplonositelya // Vestnik NYaTs RK. – 2021. – No. 1. – P. 133–138.
- Tekhnicheskiy otchet o nauchno-issledovatel'skoy rabote analiz usloviy bezopasnogo provedeniya ispytaniy eksperimental'nogo ustroystva ID-6. Kurchatov – 2020.
- Issakhov A., Zhandaulet Y., Nogaeva A. Numerical simulation of dam break flow for various forms of the obstacle by VOF method //International Journal of Multiphase Flow. – 2018. – T. 109. – P. 191–206.
- Suraev A. S., Irkimbekov R. A., Vurim A. D. Modelirovanie vzaimodeystviya strui rasplava so stal'noy stenkoy // Vestnik NYaTs RK. – 2020. – No. 1. – P. 19–22.
- 11. Analiz rezul'tatov eksperimenta WF. Otchet po nauchnoissledovatel'skoy rabote // Filial IAE RGP NYaTs RK. – Kurchatov, 2006.
- 12. Fluent A. ANSYS fluent theory guide 15.0 //ANSYS, Canonsburg, PA. 2013. T. 33.
- Haynes W. M. CRC handbook of chemistry and physics, (Internet Version 2011) //Taylor Francis Group: Boca Raton, FL. – 2011.
- Chirkin, V.S. Teplofizicheskie svoystva materialov yadernoy tekhniki / V.S. Chirkin. – Moscow: Atomizdat, 1968. – 121–128, 237–239, 291–294 pp.

VOLUME OF FLUID ӘДІСІНІҢ ОТЫННЫҢ БАЛҚУ ЖӘНЕ БАЛҚЫМА ҚОЗҒАЛЫСЫН МОДЕЛЬДЕУ ПРОЦЕССІНДЕ ҚОЛДАНУ

Е.А. Қабдылқақов, А.С. Сураев

КР ҰЯО РМҚ «Атом энергиясы институты» филиалы, Курчатов, Қазақстан

Мақалада Ansys Fluent бағдарламасында *Volume of Fluid* (VOF) есептеу әдісін қолдану арқылы, материалдардың балқу және балқыманың қоғалу процессің математикалық модельдеу мүмкіндігі қарастырылады. Математикалық модельдеу үшін эксперименталдық құрылғының екі өлшемді геометрилық және сандық-есептеулік моделі жасалды. Жылулық есептің шығару әдісі сипатталып, математикалық модельдеудің нәтижелері көрсетілген. *Түйін сөздер: балқыма, қауіпсіздік, эксперименталыдық құрылғы, фаза аралық ауысу, тұтқұрлық.*

APPLICATION OF THE VOLUME OF FLUID METHOD TO SIMULATE THE PROCESS OF MELTING AND MOVEMENT OF FUEL

Ye.A. Kabdylkakov, A.S. Suraev

Branch "Institute of Atomic Energy" RSE NNC RK, Kurchatov, Kazakhstan

The article considers the possibility of using the method of multiphase fluid *Volume of Fluid* (VOF), the Ansys Fluent program, for numerical simulation of the melting process of the materials of the experimental device and their movement over the volume of the computational domain. For modeling the design of a typical experimental device tested in the reactor was selected, a two-dimensional computational model was developed, methods for solving the thermal problem were described, and the simulation results were presented.

Keywords: experimental device, safety, melt, liquid volume method, phase transition, viscosity.