压水堆材料与结构中的关键力学问题

王彪*, 张纯禹, 马显锋, 赖侃, 文豪华

中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082

*联系人, E-mail: wangbiao@mail.sysu.edu.cn

收稿日期: 2019-04-08; 接受日期: 2019-05-05; 网络出版日期: 2019-09-18

国家自然科学基金(编号: 11832019, 11472313, 13572355)和国家重点研发计划(编号: 2018YFB1900400)资助项目

摘要 积极发展核电是保持我国能源安全的重大战略. 核材料在高温、辐照和化学腐蚀环境下的力学性能及其退化决定着关键核结构和核设备的性能及寿命, 进而决定了整个反应堆及核电站的经济性与安全性. 由于尚未完全掌握核材料和核结构在复杂环境下的力学行为特性, 目前仍难以定量地回答涉及反应堆设计、建造、运行、维护以及退役等阶段的诸多问题. 为对其中的关键力学问题进行梳理, 本文首先从原理上介绍了辐照效应, 然后以主流的压水堆为研究对象, 按承受辐照作用和化学作用从强到弱的顺序, 依次介绍核燃料、反应堆堆内构件以及反应堆安全壳等关键核结构在设计和性能分析方面的研究现状以及面临的挑战. 为便于应用和参考, 对燃料材料的本构模型、结构材料的应力腐蚀模型、流固耦合问题的数值求解方法以及核电设备强度评估准则等典型结果进行了归纳和总结. 最后对压水堆实施全生命周期管理亟需突破的难题进行了总结. 在数值模拟方面需要突破的瓶颈是核材料力学行为的多尺度模拟方法, 在实验研究方面需要突破的瓶颈是新型、高效的辐照实验技术.

关键词 压水堆, 核材料, 核结构, 辐照效应, 力学性能

PACS: 28.41.-i, 61.82.Bg, 62.20.-x, 46.15.-x

1 引言

随着我国国民经济的快速发展, 清洁能源供应已经成为制约我国经济、社会和环境发展的瓶颈, 人们对于核能在可持续能源供应中的重要地位已形成共识, 我国的核电发展战略开始向“高效发展”转变. 核能主要通过裂变和聚变两种方式释放出来, 冷却剂及时、持续、安全地将产生的高密度热量转移至工质并通过发电设备转化为电能. 由于达到核反应的条件相对温和, 目前已投入商业应用以及未来五十年内重点

发展的仍是各种裂变反应堆.

核反应堆与其他能量转换装置最大的不同在于前者长期工作在由中子、 α 射线、 β 射线以及 γ 射线等形成的复杂辐照环境下. 材料在强辐照作用下其力学性能不断退化, 正如费米1946年所言, “核技术的成败取决于材料在反应堆中强辐射场下的行为”^[1]. 此外, 对目前应用最为广泛的轻水反应堆, 为了调节核反应的速率, 冷却剂中通常还加入硼酸等中子吸收剂, 复杂的水化学腐蚀环境进一步加速了核材料力学性能的退化. 核材料在辐照和化学腐蚀环境下的耐久性决定着

引用格式: 王彪, 张纯禹, 马显锋, 等. 压水堆材料与结构中的关键力学问题. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 114602

Wang B, Zhang C Y, Ma X F, et al. Key problems on the mechanical behavior of nuclear materials and structures of pressured water reactors (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2019, 49: 114602, doi: 10.1360/SSPMA-2019-0113

核设备的寿命和结构完整性,进而决定了核反应堆以及整个核电站的经济性与安全性. 2011年日本福岛核事故发生后,世界各国对核电安全提出了更高的要求. 为了保障安全性,目前正在运行和研发的反应堆在设计 and 运行上均偏于保守,如压水堆冷却剂的平均温度仅约 330°C ,导致热电的转化率仅约30%,远低于热电厂40%–60%的转化效率. 为了保障核燃料在辐照和腐蚀作用下的结构完整性,目前大型压水堆核燃料的卸料燃耗深度(即每单位质量的核燃料释放的能量)仅约50–60 MWd/kgU,对宝贵的裂变材料并未做到充分利用^[2]. 另外,由于受到持续的辐照,反应堆压力容器等关键核设备的设计寿命也只有40–60年.

随着核电技术的不断发展,提高反应堆在稳态和瞬态工况下运行的可靠性、经济性和安全性成为世界各核电国家的目标. 为保证核能持续健康地发展,必须要科学地兼顾其经济性和安全性. 实现这一目标的关键就是能对核材料和核结构在高温、辐照和腐蚀环境下的力学行为和结构完整性进行定量、可靠的分析和预测,进而能对核电站进行合理的全生命周期(设计、建造、运行、维修和退役)管理. 本文首先从原理上介绍辐照效应,然后以主流的压水堆为研究对象,按承受辐照作用和化学作用从强到弱的顺序,依次介绍核燃料、反应堆堆内构件以及反应堆安全壳等(图1)在选材、设计和安全评估中的关键力学问题及其研究现状和发展趋势.

2 辐照引起的关键力学问题

2.1 引言

核材料的辐照效应主要由反应堆中的高能粒子(如中子、裂变产物)和核材料中的原子相互作用导致^[3]. 中子进入核材料后,通过碰撞将部分动能转移给核材料中的原子,其中一部分能量通过电子激发和离子化被耗散,另一部分能量以动能的形式传递给晶格原子并使其离位. 第一个离位原子称为初级碰撞原子(Primary Knock-on Atom, PKA),此高能原子在运动过程中继续碰撞周围的晶格原子并使其离位,形成次级碰撞原子继而产生离位级联效应^[4,5],形成离位峰. 位移级联区的影响半径约几十纳米,区域内温度可高至超过材料熔点,形成热峰. 当PKA能量较高时,可以产生若干个高能次级离位原子,通过沟道效应溢出级联

图 1 (网络版彩图)压水堆结构示意图

Figure 1 (Color online) Schematic of pressurized water reactor.

区,在主级联区外形成与主级联类似的子级联^[6]. 随后,级联区域内的高能原子通过弹性碰撞的方式将能量传递到周围原子,最终通过热的形式耗散. 离位原子在热峰的高温下发生迁移,导致缺陷复合或形成稳定的团簇,最终只有1%左右的离位原子以间隙的形式存在,在级联中心区将会形成以空位为主的乏原子区,间隙原子则分布在级联区外围. 以上过程称为初级辐照损伤(Primary Radiation Damage). 接下来更长的时间里,点缺陷和团簇将会继续迁移、复合、成团,与周围的大型缺陷如位错、晶界等发生相互作用,最终导致材料微结构变化,影响材料宏观力学性能. 虽然中子辐照对金属、陶瓷等不同材料的影响各异,但初级辐照损伤的弹道过程是相似的^[7]. 辐照损伤对材料性能的影响通常需要几个小时到几十年,但是初级辐照损伤过程只持续1–10 ps,影响范围也远小于能对材料力学性能构成影响的微结构尺寸.

2.2 辐照引起的材料微结构演化

如上所述,在辐照过程中,点缺陷会由于级联碰撞形成弗兰克尔对(Frenkel Pair),即填隙原子-空位对. 填隙原子是指一个原子占据了晶格中本不应该存在原子的位置. 一般而言,填隙原子分为八面体结构和四面体结构. 在金属材料中,最稳定的自填隙原子构型一般为哑铃型,即两个填隙原子分布在格点两侧,沿能量最低方向排列. 而空位是指晶格格点缺失一个原子. 相对而

言, 自填隙原子具有较高的形成能(>2.0 eV), 体积松弛大(~2, 平衡状态下平均每个原子占据的体积)和较低的迁移能(<0.15 eV); 而空位则具有较低的形成能(<2.0 eV)、体积松弛小以及较高的迁移能(>0.5 eV). 因此, 空位相对于自填隙原子更难发生迁移. 这也是20世纪80年代最引人瞩目的发现之一的辐照产物偏置理论(Production Bias)的微观物理基础^[3], 即在辐照条件下, 级联效应所产生的等量填隙原子和空位, 经过缺陷复合过程, 大部分的填隙原子快速扩散到其他大型缺陷中去, 而空位由于较低的迁移速率, 将残留在金属内部, 最终形成空洞或气泡, 引致所谓的辐照肿胀现象. 另外, 点缺陷扩散能力的各向异性也是辐照蠕变和辐照生长现象的微观来源之一. 点缺陷的扩散系数可由著名的Arrhenius定律来描述, 即

$$D = D_0 \exp(-E_m / k_B T), \quad (1)$$

其中, D_0 是扩散系数常数, 由扩散机理决定; E_m 是迁移能. 在微观动力学中, 一种比较简单而又直观的方法是利用分子动力学模拟, 直接追踪目标原子的轨迹, 从而获得扩散系数等信息. 例如最简单的布朗运动情况, 目标原子的扩散系数可以直接通过Einstein关系获得^[8]:

$$D = \frac{\overline{R^2}}{6t}, \quad (2)$$

其中 $\overline{R^2}$ 为原子在时间间隔 t 内的均方位移, 系数6对应三维情况. 对更复杂一些的问题, 如各向异性、存在外应力场等, 还可以利用DFT及类似的原子尺度方法或模型得出原子跃迁能 E_m , 再通过式(3)来计算扩散系数:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\hat{h}} h_i h_j \lambda_0(\hat{h}) \exp[-E^m / (k_B T)], \quad (3)$$

其中 $\hat{h}$ 为单位跃迁方向, λ_0 为对应跃迁方向频率.

点缺陷在辐照后的材料中会通过扩散来复合, 或者被其他大型缺陷(如孔洞、位错、晶界、沉积物等)俘获, 这些大型缺陷被称为sink. 在介观尺度, 这种缺陷的演化通常由反应率理论(Rate-theory)来描述, 填隙原子和空位的浓度分别写成

$$\begin{cases} \frac{\partial C_v}{\partial t} = K_0 - K_{iv} C_i C_v - K_{vs} C_v C_s + \nabla \cdot D_v \nabla C_v, \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} = K_0 - K_{iv} C_i C_v - K_{is} C_i C_s + \nabla \cdot D_i \nabla C_i, \end{cases} \quad (4)$$

其中 $C_v(C_i)$ 是指空位(填隙原子)的浓度, K_0 是辐照条件

下的缺陷产生率; K_{iv} 是空位-填隙原子复合率系数; K_{is} (K_{is})是空位(填隙原子)与sink的反应率系数. 求解上述方程可以得到缺陷浓度分布的时间演化规律.

辐照会引起材料内部元素的重新分布, 使得某种元素在晶界、表面或不同相界富集或减少, 引起所谓的辐照诱发偏析效应. 这种偏析效应会极大地影响材料的宏观力学性能. 实际上, 金属中的辐照偏析效应主要是由于缺陷和合金元素之间迁移运动和复合行为的不平衡所导致的, 所以与缺陷或金属元素的原子尺度扩散行为有密切的联系. 由于处于辐照中的材料空位和填隙原子浓度维持在较高的水平(相对于热平衡条件下的浓度高几个数量级), 因此辐照条件会显著影响其扩散性质, 并直接影响缺陷和合金元素的迁移率. 例如, 铁素体钢中, 元素磷更倾向于向晶界扩散, 造成磷富集, 这些晶界变成了易断裂的高危区域.

辐照对于材料微结构的另一个影响是位错环的形成. 位错环对于填隙原子具有吸收偏置, 从而对材料在辐照后的微结构演化产生重要的影响. 此外, 位错环也会影响到辐照后材料的力学性能, 进一步改变其韧性和硬度. 一般情况下, 辐照引起的缺陷将有20%~40%产生复合, 剩余的缺陷大部分会形成缺陷团簇. 在缺陷团簇稳定后, 可能会迁移出级联碰撞区域, 与位错、晶界等其他缺陷发生相互作用. 一般来说, 填隙原子团簇相对于空位团簇更容易稳定, 且填隙原子的迁移率比空位迁移率大得多. 比较成熟的理论模型是辐照产物偏置理论(Production Bias), 其中偏置指的是驱动位错环运动和空洞形核生长的作用力. 这里以填隙原子团簇为例, 简单介绍该模型的主要物理机理. 填隙原子团簇一般出现在级联反应中的热峰相或者碰撞相到热峰相转变的过程: 首先, 大量的填隙原子团簇和空位团簇形成, 留下少部分的孤立并可自由移动的填隙原子及空位; 其他大型缺陷sink对填隙原子位错环的吸引力更大而导致吸引偏置; 孤立的点缺陷并非自由扩散, 而同样受到sink的吸引偏置; 空位团簇不稳定, 导致空位从团簇中蒸发, 而引起的空位扩散. 总而言之, 由于sink对空位团簇以及填隙原子团簇的作用偏置效应, 导致填隙原子团簇以位错环的形式存在, 为空位团簇在远离级联碰撞区域以空洞的形式存在, 两者在持续的辐照下, 将产生团簇的长大以及演化. 另外, 在辐照后的空位团簇中, 惰性气体形成的气泡, 对孔洞的稳定和形核过程也具有重要的意义. 气泡对晶体中的位错运动产生的阻碍作

用,是材料高温硬化和脆化的重要来源之一,也是当前辐照损伤微观机理的一个研究热点.

最后,辐照对合金材料微结构的相稳定性也会产生重要影响.辐照改变相稳定性最直接的方式是引起溶质的局部富集或消耗,从而跨越溶解度的极限.但辐照也可以通过反冲溶解(Recoil Dissolution)来溶解相结构,并通过产生反位缺陷导致无序,引起不同相的成核与生长.在特定条件下,辐照也可以导致包括非晶化的亚稳相的形成.由于合金的相结构会显著影响材料的物理和机械性能,因此了解辐照如何影响相稳定对于结构材料非常重要.辐照可以通过辐照增强扩散和辐照诱导偏析增加合金中的原子输运,引起溶质的富集或消耗.如果局部溶质浓度超过溶解度极限,会进一步引起溶质沉淀,或者如果溶质含量低于溶解度会导致沉淀溶解.辐照同样也可以诱导合金中形成非晶相.尽管合金可能存在的相非常多,但通常只有一个相对应最低自由能,即平衡相.在足够长的时间内,在任何非零温度下,系统总是可以形成平衡相.然而,由于自由能相空间极容易受到外界条件的影响,因此材料内部总是存在各种局部稳定相(即亚稳相),且这些局部稳定相之间具有不同的势垒深度.这些亚稳相中的某些相组成的短程有序与平衡相很相似,但却具有不同的长程序,包括玻璃相或结晶固体等.这些亚稳相的存在也对材料的力学性能产生重要的影响.

2.3 辐照引起的力学效应

2.3.1 辐照硬化和脆化

辐照对材料宏观力学性能的影响主要通过辐照对材料微结构演化的影响而作用.辐照硬化是指材料在经受辐照后其塑性屈服强度增加的现象,硬化的程度和辐照剂量及辐照温度均有关系.而辐照脆化指的辐照产生的微结构阻滞位错环滑移而使得材料韧脆转变温度降低的现象.

以低铜钢压力容器为例,辐照损伤影响的主要机理包括:1)辐照引起基体损伤(如缺陷团簇和位错环);2)辐照引起位错环网络交联;3)辐照诱发/增强脆化元素如磷的晶界偏析.辐照脆化与前两种机制相关,可采用Charpy 41J水平测量的延性到脆性转变温度 ΔT_{41J} 或屈服强度的增量来表征辐照脆化程度.值得注意的是,镍和锰强烈影响含低铜含量钢的硬化.已经证实含1 wt%镍的低铜含量钢的团簇硬化会达到饱和.而镍

含量高于1.5 wt%时,尚未观察到团簇硬化的饱和.但镍和锰对低铜钢脆化的确切影响尚未完全明确.

不论是奥氏体钢还是马氏体钢,辐照硬化都归因于金属晶体内部由于辐照而产生的各种缺陷,包括点缺陷、杂质原子、缺陷团簇、位错环、层错、空洞或气泡、金属相析出等.主要影响机制是辐照增加了位错滑移所需的开动应力以及位错滑移受到辐照产生的障碍物的阻滞.

金属材料在辐照后的屈服强度增加与辐照剂量有密切的关系.在力学本构模型中可通过缺陷数量的增加来描述,如对单晶材料,其屈服强度的增加 $\Delta\sigma_s$ 可以用式(5)表示^[9,10]:

$$\Delta\sigma_s = \alpha_1 \mu b \sqrt{\rho_d} + \alpha_2 \mu b \sqrt{Nd}, \quad (5)$$

其中 α_1 和 α_2 为常数, μ 为剪切模量, b 为伯氏矢量大小.第一项为位错引发的硬化, ρ_d 为位错密度;第二项为其他缺陷引发的硬化.辐照会引发材料微观结构的变化,加速形成一些体缺陷如空穴、沉淀和面缺陷如位错环等.公式中的 N 表示这些缺陷的体密度, d 表示对应的尺寸.式中其他的物理量可通过不同尺度的计算工具和表征工具来确定.例如,在介观尺度,可通过TMS等实验手段直接测量位错密度、辐照引发的位错环密度、位错环直径等信息;也可采用位错动力学(Dislocation Dynamics)等计算工具,基于动力学方程研究点缺陷团簇的形成和演变.

2.3.2 辐照蠕变和辐照生长

在反应堆运行过程中,燃料组件和其他结构部件会由于辐照蠕变和辐照生长而发生不可恢复的变形.蠕变是一种长期应力作用下材料发生永久形变的现象,按蠕变速率变化可以分为三个阶段,即初始阶段(蠕变率逐渐降低)、稳态阶段(蠕变速率保持恒定)和加速阶段(蠕变率快速增加).蠕变与温度有非常强的依赖关系.这是因为在一定温度和外加应力作用下,要使位错沿着非活化滑移面运动,必须要吸收相当的能量,而热扰动就是其中一个重要来源.在高温下,辐照会引起热蠕变速率的显著增加;即使在中低温下没有热激活时,辐照也会引发蠕变.描述辐照蠕变机制的理论主要分两类,其区别是在蠕变过程中是否包含了辐照产生的位错环和空洞.包含位错环和空洞的理论用于描述低温辐照蠕变,主要包含位错网络钉扎段

攀移引起的瞬态蠕变和空位环塌陷引起的稳态蠕变. 而不包含位错环和空洞的理论则用于描述高温辐照蠕变, 其主要成因是成核位错环的应力定向并加速攀移而引起的滑移. 从微观角度来看, 辐照蠕变的根本机制是所谓的爬行机制, 即填隙原子被优先吸收, 引起位错攀升、滑移, 进而引起蠕变应变. 这种填隙原子的优先吸收可以由很多原因造成, 其中比较重要的机制是应力诱导优先吸收蠕变, 即位错中的间隙的方向如果与外应力方向一致则优先被吸收, 从而在该方向引起蠕变. 该模型能解释肿胀不明显的固体(如铝合金)的辐照蠕变变形.

辐照生长是指在无外应力作用的状态下材料发生的各向异性尺寸变化. 对金属材料, 辐照生长往往表现为一个方向的尺寸增加, 而其他方向的尺寸减少, 但总体积保持不变. 辐照生长和材料的宏观各向异性密切相关, 如果金属晶粒随机取向, 则不发生辐照生长. 铝合金包壳管在塑性加工过程中晶粒会发生取向, 因此燃料包壳在辐照作用下会沿长度方向发生显著的尺寸增加.

微观各向异性(晶体结构)和宏观各向异性(晶粒取向)是产生辐照生长的必要条件. 辐照生长的微观机制是点缺陷沿着特定的晶向运动. 由于位错环对空位及填隙原子的作用不同, 导致不同方向的位错环对于空位和填隙原子的扩散偏置不同, 从而引起材料的质量输运在不同晶体方向上有所差异, 最终导致辐照生长变形的发生. 如果间隙和空位位错环密度近似, 则生长应变与间隙和空位的位错偏置因子之差成正比. 20世纪80年代, Woo^[11]提出了更基本的扩散各向异性差模型(Diffusion Anisotropy Difference, DAD), 认为点缺陷本征的迁移各向异性才是辐照生长的最主要原因. 由于铝合金的六方结构是各向异性的, 所以空位和填隙原子的本征扩散系数也是各向异性的. 这种不同缺陷的各向异性扩散引起了质量的各向异性输运, 即流向不同沉陷的空位-填隙原子数目的比例不同, 才是辐照生长的最主要因素. 例如, 空位向<0001>方向迁移, 而间隙向垂直方向迁移.

3 核燃料的关键力学问题

3.1 核燃料的工作原理和性能制约因素

目前商业压水堆使用的燃料主要是 UO_2 陶瓷燃料.

通过粉末压制、烧结和磨削, UO_2 陶瓷被制成直径约为8 mm、长度约为11 mm的圆柱形芯块, 然后堆叠在锆合金制成的薄壁包壳圆管中(图2). U^{235} 原子在中子的作用下发生裂变反应并释放出高密度的能量(~220 MeV/fission), 最终以热能的形式通过包壳输运到冷却剂中. 在此过程中, 生成的气态和固态裂变产物在晶粒内和晶界间不断积聚、迁移, 使得芯块产生显著的体积肿胀. 此外, 在温度梯度和辐照的作用下, UO_2 陶瓷的微观组织还会发生显著的变化, 相应地其热学性能和力学性能也不断退化. 同时, 锆合金包壳会在高温和辐照作用下产生蠕变, 辐照损伤还会使其发生塑性硬化. 此外在冷却剂的腐蚀作用下, 包壳外表面还会被氧化, 产生的氢原子被合金基体吸收后以氢化物的形式析出, 使包壳发生显著的脆化, 导致其延展性大大下降. 在较高的燃耗下, 芯块会由于体积肿胀而与包壳发生机械接触(Pellet-Cladding Mechanical Interaction, PCMI). 如果燃耗进一步加深、芯块进一步肿胀, 薄壁包壳则会因为过大的接触力而发生破损. 因此, 为确保燃料包壳的完整性, 目前商用压水堆燃料的最大卸料燃耗还不到60 MWd/kgU.

压水堆核电站的一、二回路均为高温高压腐蚀环境, 一回路的运行温度约350°C, 压力约为15.5 MPa, 二回路的温度和压力略低, 因此, 核电站特殊工况和长时服役安全对一、二回路所使用材料提出了严格的抗氧化、抗腐蚀要求. 特别地, 一回路结构长期处于辐照环境, 因此一回路内部结构如燃料组件、燃料格架和连接螺栓等, 都对材料提出了很高的耐辐照要求. 另外, 核反应堆的设计必须充分考虑到各种基准外事故下的安全性, 如严重失水事故(LOCA), 这就要求燃料组件

图2 UO_2 燃料元件
Figure 2 Fuel element of UO_2 .

尤其是燃料包壳必须具备优异的耐高温氧化性能.

3.2 核燃料设计和评估中的关键力学问题

为了提高核电厂经济性, 大多数核电厂都采用增加燃料组件的卸料燃耗的策略. 图3为1980–2010年期间, 美国轻水堆的平均燃耗和容量因子变化, 可以看到平均燃耗增加了一倍多, 容量因子从60%增加到90%^[12]. 但如前所述, 燃耗增加后, 燃料元件的热-力学性质均有一定程度的退化, 为分析、设计高性能、长寿期的先进核燃料, 必须要能对燃料在辐照作用下的热学和力学耦合行为进行定量的描述. 对压水堆, 则具体包括辐照下 UO_2 材料的热-力学行为、包壳材料的热-力学行为以及相关的多尺度和多物理场耦合行为.

3.2.1 考虑辐照效应的 UO_2 材料的热-力学本构模型

由于涉及裂变反应, 核燃料的辐照效应与结构材料的辐照效应有很大的不同. 考虑其力学性能的温度相关性, 本部分首先介绍 UO_2 材料的热学性能.

未受辐照 UO_2 热导率由晶格振动和自由电子的迁移(晶格间的辐射热传导可以忽略)两个因素决定, 当温度低于1900 K时前者起主要作用, 而温度高于1900 K时后者起主要作用^[13]. 对实际的 UO_2 燃料, 综合考虑可溶裂变产物、沉积裂变产物、孔洞率、偏离化学计量和辐射损伤等因素的影响, 最终修正的热导率

图3 (网络版彩图)美国轻水堆卸料燃耗和容量因子变化^[12], BWR: 沸水堆, PWR: 压水堆

Figure 3 (Color online) Evolution of the capacity factor of light water reactor in US. BWR: boiling-water reactor, PWR: pressurized water reactor.

形式为^[13]

$$k = k_{95} \times f_d \times f_p \times f_{\text{por}} \times f_x \times f_r, \quad (6)$$

其中 f_d 为可溶裂变产物修正系数, f_p 为沉积裂变产物修正系数, f_{por} 为孔洞率修正系数, f_x 为偏离化学计量数(对于 UO_2 燃料通常取1.0), f_r 为辐照损伤因子. 这些系数的具体形式为^[13]

$$k_{95} = \left(\frac{1}{0.0375 + 2.165 \times 10^{-4} \cdot T} + \frac{4.715 \times 10^9}{T^2} \exp\left(-\frac{16361}{T}\right) \right), \quad (7)$$

$$f_d = \left(\frac{1.09}{Bu} + 0.0643 \cdot \sqrt{\frac{T}{Bu}} \right) \cdot \arctan\left(\frac{1.0}{\frac{1.09}{bu^{3.265}} + 0.0643 \cdot \sqrt{\frac{T}{Bu}}} \right), \quad (8)$$

$$f_p = 1.0 + \left(\frac{0.019 \cdot Bu}{3.0 - 0.019 \cdot Bu} \right) \cdot \left(\frac{1.0}{1.0 + \exp\left(\frac{-(T-1200.0)}{100.0}\right)} \right), \quad (9)$$

$$f_{\text{por}} = \left(\frac{1.0 - p}{1.0 + 0.5 \cdot p} \right), \quad (10)$$

$$f_r = 1.0 - \frac{0.2}{1.0 + \exp\left(\frac{T-900.0}{80.0}\right)}, \quad (11)$$

其中 T 是温度(K), p 是孔隙率, Bu 是燃耗(at%, 1 at% $\approx$ 225 MWh/KgU $\approx$ 9375 MWd/tU).

UO_2 的热导率随着燃耗增加而降低; 当温度低于1900 K, 热导率随温度升高而降低; 当温度超过1900 K时, 热导率随温度升高而增加. 导热性差是 UO_2 燃料的主要缺点.

在瞬态条件中, UO_2 材料的比热是能量沉积的关键参数, 主要受温度、组分、熔融分数和氧金属四个参数的影响, 其常见形式如下式所示^[14]

$$c_p = \frac{K_1 \theta^2 \exp\left(\frac{\theta}{T}\right)}{T^2 \left(\exp\left(\frac{\theta}{T}\right) - 1 \right)} + K_2 T + \frac{YK_3 E_D}{2RT^2} \exp\left(-\frac{E_D}{RT}\right), \quad (12)$$

其中常数 K_i ($i=1, 2, 3$)是根据实验测试得到的拟合参数, θ 为参考温度, E_D 为活化能, Y 为氧金属比, R 为气体常数.

综上可以发现 UO_2 材料具有复杂的非线性热学行为, 进行热学计算以及热-力学耦合计算时需要使用非线性求解技术.

受裂变产物的影响, UO_2 材料在高温和辐照的作用下会表现出非常复杂的力学行为, 具体表现为非线性热膨胀、体积肿胀和致密化、蠕变、弹塑性变形以及开裂. 热膨胀导致燃料尺寸发生改变, 从而导致芯块-包壳间隙尺寸和间隙热传导发生改变, 进而影响燃料棒的温度. 实验表明, 燃料热膨胀是关于温度和氧金属比的函数. 当偏离化学计量数大于0.2时, 氧金属比对燃料热膨胀有显著影响. 典型轻水堆燃料的偏离化学计量数为0.1, 因此氧金属比燃料的热膨胀的影响可以忽略. 对固相燃料, 热膨胀系数与温度的一种常见关系为

$$\varepsilon_s = K_1 T - K_2 + K_3 \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right), \quad (13)$$

其中 ε_s 为热膨胀导致的线性应变(参考温度为300 K), K_i ($i=1, 2, 3$)为常数, E_D 为活化能, k 为玻尔兹曼常数, T 为温度. UO_2 在不同温度下的密度可由室温下 UO_2 理论密度和热膨胀应变计算得到.

在辐照期间, 气体裂变产物和固体裂变产物的积聚会造成燃料发生显著的体积肿胀, 肿胀应变的大小取决于裂变产物的生成量. 考虑到裂变产物的生成量与燃耗直接相关, 为了便于应用, 燃料的肿胀模型通常采用经验公式. 对固体裂变产物引起的肿胀, 常见的一种形式为^[14]

$$\Delta\varepsilon_{sw-s} = 6.424 \times 10^{-8} \rho_0 \Delta Bu, \quad (14)$$

其中 $\Delta\varepsilon_{sw-s}$ 为固体裂变产物引起的体积肿胀应变增量, ρ_0 为燃料初始密度(kg/m^3), ΔBu 为燃耗增量(MWd/kgU).

相比固体裂变产物, 气体裂变产物本身的行为及对燃料行为的影响则更为复杂. 裂变反应导致在 UO_2 晶粒内产生氦、氩、氙等裂变气体原子, 这些原子在晶粒内部聚集形成纳米尺度的气泡. 部分裂变气体原子溶解在晶粒内部或被纳米尺度的气泡捕获, 但大部分裂变气体原子会扩散到晶界, 在界面上形成气泡. 晶界面上的气泡不断增大, 并和临近的气泡发生融合. 多个晶面上的气泡联通后会形成网状的气体通道, 部

分气体会通过该通道到达燃料外表面然后释放到燃料棒的自由体积中, 直接改变燃料棒间隙气体的压力和热导率. 如果燃料芯块发生开裂, 裂缝还会成为新的气体通道. 裂变气体的生成量和释放量不仅和燃耗相关, 还和燃料的温度及温度梯度相关, 因此理想的模型应该以耦合的方式描述气体裂变产物与燃料变形之间的相互影响. 考虑到耦合模型的复杂性, 目前仍多以非耦合的经验公式描述裂变气体产物造成的肿胀变形, 常见的一种形式为^[14]

$$\Delta\varepsilon_{sw-g} = 2.261 \times 10^{-34} \rho_0 \Delta Bu (2800 - T)^{11.73} \cdot \exp(-0.0162(2800 - T) - 2.074 \times 10^{-5} Bu \rho_0), \quad (15)$$

其中 $\Delta\varepsilon_{sw-g}$ 为燃耗增量 ΔBu (MWd/kgU)下, 气体裂变产物造成的体积肿胀应变增量, ρ_0 为燃料初始密度(kg/m^3).

综合两种机制, UO_2 材料总的肿胀率如图4所示. 可以看出在高温下 UO_2 的肿胀主要是由气体裂变产物所引起; 当温度超过1500 K时, 燃料肿胀才变得显著; 当温度超过1900 K时, 裂变气体通道形成, 部分裂变气体释放到燃料棒的自由体积, 燃料肿胀开始下降.

受加工制造过程的影响, 未经辐照的 UO_2 芯块中存在一定的初始孔洞. 辐照会使这些孔洞闭合消失, 燃料进一步致密化. 致密化导致的负肿胀应变通常由不同的经验公式进行描述, 常见的一种形式为^[15]

$$\varepsilon_D = \rho_0 \left(e^{\left(\frac{Bu \ln(0.01)}{C_D Bu_D} \right)} - 1 \right), \quad (16)$$

图4 (网络版彩图)不同温度和燃耗水平下的 UO_2 的肿胀
Figure 4 (Color online) Volumetric swelling of UO_2 at different burn up levels and temperatures.

其中 ε_D 为密实应变, ρ_0 (%理论密度)为初始密度, Bu (MWd/kgU)为燃耗, Bu_D (MWd/kgU)为密实化完成时的燃耗.

在高温和辐照的作用下, UO_2 材料不仅产生热蠕变还会产生辐照蠕变, 总蠕变率是时间、温度、晶粒尺寸、密度、裂变率、氧金属比和应力等因素的复杂函数. 目前已有多种模型描述 UO_2 材料的热蠕变和辐照蠕变, 常见的一种经验形式为^[14]

$$\dot{\varepsilon}_{cr} = \frac{A_1 + A_2 \dot{F}}{(A_3 + D)G^2} \sigma e^{\left(-\frac{Q_1}{RT}\right)} + \frac{A_4}{(A_6 + D)} \sigma^{4.5} e^{\left(-\frac{Q_2}{RT}\right)} + A_7 \dot{F} \sigma e^{\left(-\frac{Q_3}{RT}\right)}, \quad (17)$$

其中 $\dot{\varepsilon}_{cr}$ 为总蠕变率($1 s^{-1}$), σ 为von-Mises应力(Pa), T 为温度(K), $D = \rho_0$ 初始密度(%理论密度), G 为晶粒尺寸(μm), $\dot{F}$ 为体积裂变率(fissions/ $m^3 \cdot s$), Q_i ($i=1, 2, 3$)为活化能(J/mol), A_i ($i=1, \dots, 7$)为材料常数. 式(17)中第一项表示热蠕变(适用于低温和低应力条件), 第二项表示热位错或幂次蠕变率(适用于高温和高应力条件), 辐照效应包含在第一项和第三项中. 热蠕变项中的活化能(Q_1 和 Q_2)很大程度上依赖于燃料的氧金属比.

UO_2 陶瓷材料的弹性模量和温度、孔隙率以及超化学计量(Hyperstoichiometry)均有关系, 通常采用拟合得到的多项式描述各个因素的影响^[16]. 作为一种典型的脆性材料, UO_2 陶瓷在室温下的最大拉伸应力仅约120 MPa. 即使不考虑辐照的影响, 燃料芯块也会因为热应力过大而发生破裂. 燃料的破裂不仅形成新的裂变气体释放通道进而影响裂变气体的释放量, 还直接影响芯块-包壳间隙的传热行为和接触行为. 然而, 目前尚未有合适的本构模型能全面地描述 UO_2 陶瓷材料在辐照作用下的破裂行为. 工程中常采用等效方式描述芯块开裂造成的包壳-芯块间隙的改变, 即不考虑具体的开裂形式, 只考虑开裂造成的芯块的名义直径的变化(即采用所谓的重定位模型^[17]). 这种方法形式简单, 但严重依赖于实验拟合, 适用范围有限. 常用的ESCORE重定位模型的具体形式如下^[17]:

$$\left(\frac{\Delta D}{D_0}\right)_{rel} = 0.80 Q \left(\frac{G}{D_0}\right) (0.005 Bu^{0.3} - 0.20 D_0 + 0.3), \quad (18)$$

其中 $\left(\frac{\Delta D}{D_0}\right)_{rel}$ 为芯块破裂造成的芯块直径的变化, D_0

(单位: in)为芯块初始直径、 G_i 为包壳-芯块初始间隙(单位: in), 平均燃耗 Bu 的单位为WMd/MTU.

另一种较常用的破裂模型为弥散开裂模型(Smeared Cracking Model)^[18], 该模型也不考虑裂纹的具体形式, 而是通过修改材料点的弹性常数来模拟开裂造成的弹性性能退化. 具体而言, 当材料点的最大主应力达到临界应力后, 材料点沿最大主应力的法线方向开裂, 该点的应力降为零. 此外, 开裂后的材料点在拉伸方向的强度为零, 但压缩方向的强度保持不变. 这种方法仍具有较大的局限性, 如需要限制裂纹数和裂纹方向.

目前较全面地描述 UO_2 陶瓷材料弹塑性变形和破坏行为的本构模型为法国原子能委员会开发的DIFF2模型^[15]. 在受压状态下, 该模型采用修正的Drucker-Prager准则和关联流动法则描述 UO_2 陶瓷材料的塑性变形, 采用连续体损伤力学描述材料的损伤和破坏行为. 在受拉状态下, 当材料点的最大主应力达到临界应力 σ_R 后, 损伤(微裂纹)将发生在最大主应力方向定义的开裂面上, 材料所能承受的最大应力和名义模量开始下降. 张开的微裂纹会导致额外的应变分量 ε_i^c (此处对重复指标不进行求和):

$$\varepsilon_i^c = \varepsilon_i^c n_i = \varepsilon_i^c \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_i. \quad (19)$$

材料点的损伤程度可用该点经历的最大损伤应变(记为 ε_i^{cm})来表示:

$$\varepsilon_i^{cm} = \max_{\tau \leq t} (\varepsilon_i^c(\tau)). \quad (20)$$

在加载阶段, DIFF2模型采用了类似屈服准则的方法来确定损伤应变:

$$\sigma_i^{eq} - \sigma_R - R_p \varepsilon_i^{cm} \leq 0, \quad (21)$$

其中 σ_i^{eq} 为沿第 i 个开裂方向的等效应力, R_p 为软化后的名义模量. 在卸载阶段, 由于变形为线弹性, 因此损伤应变正比于当前投影应力与材料所能承受的最大应力之间的比值. 在平面状态下, DIFF2模型的屈服和损伤函数形式见图5.

DIFF2模型可较真实地模拟 UO_2 芯块的开裂, 但目前该模型仍未考虑辐照效应和裂变产物尤其是气体产物的影响. 采用损伤和破坏力学模型可以全面而定量地描述芯块的开裂变形, 然而这种方法在数学形式上非常复杂, 在程序实现上也具有较高的难度.

图 5 平面应力状态下DIFF2模型的屈服和开裂准则

Figure 5 Yield and crack functions of DIFF2 model under plane stress state.

3.2.2 辐照和化学环境下的包壳材料的力学行为和本构模型

我国目前在建和在运的核电站以压水堆为主, 核燃料包壳材料主要是锆合金。锆合金包壳材料失效的主要形式有水侧腐蚀、吸氢、蠕变、疲劳等, 中子辐照会加速这些失效的发展。锆合金的耐腐蚀性能、晶粒长大行为和力学性能等与合金第二相、氢化物、织构和位错等密切相关。由于中子辐照会在锆合金中引入缺陷和位错增殖, 将导致锆合金出现强度和硬度升高、韧性下降的类加工效应。另一方面, 反应堆内的锆合金包壳材料受到高注量中子辐照还可能导致组织中第二相的非晶化和溶解, 伴随着显微组织和化学成分改变。国外研究表明^[19], 辐照可使锆合金的腐蚀速率相比未受辐照时提高2~4倍; 在高中子通量工况下, 腐蚀速率甚至可能增加10倍以上, 但是其影响机理目前尚不完全清楚^[20]。

此外, 冷却水受辐射以及锆合金包壳和冷却水反应都会产生氢并被锆合金部分吸收。超过固溶度后, 过多的氢就以片状氢化物(ZrH_x)的形式析出(图6)。作为脆性的夹杂相, 氢化物的形态、取向和分布特征等对包壳材料的延性以及热蠕变速率具有重要的影响。

如上所述, 核燃料包壳处于一回路高温高压水化学和辐照环境, 因此包壳材料的力学行为受热-机械-辐照-化学因素的共同影响。已发展的包壳材料本构模型按尺度主要可分为两类, 第一类是宏观唯象模型, 第二类是晶体塑性模型, 此外还有基于位错动力学和分

图 6 (网络版彩图)含氢化物的锆管在内压爆破实验下的破裂

Figure 6 (Color online) Crack of cladding tube with hydride under internal pressure.

子动力学的微观模型, 在此不予展开阐述。

宏观唯象本构模型大多在经典的蠕变和弹塑性等本构模型的基础上, 引入辐照剂量、温度等影响参数。比如对辐照蠕变, 一种常用的经验模型是^[21]

$$\varepsilon_{ir} = C_0 \Phi^{C_1} \sigma_m^{C_2}, \quad (22)$$

其中 ε_{ir} 为有效辐照蠕变率(1/s), Φ 为快中子通量(n/m^2), σ_m 为Mises应力(MPa), 材料常数 $C_0=9.881 \times 10^{-28}$, $C_1=0.85$, $C_2=1.0$ 。

对热蠕变, 常用的Limback模型^[22]为

$$\begin{cases} \varepsilon_{th} = A \frac{E}{T} \left(\sinh \frac{a_i \sigma_{eff}}{E} \right)^n e^{-Q/RT}, \\ a_i = a \left(1 - A_1 \left(1 - e^{-A_2 \Phi^{A_3}} \right) \right), \\ E = 1.148 \times 10^9 - 59.9T, \end{cases} \quad (23)$$

其中, $A=1.08 \times 10^9$ ($K MP a^{-1} h^{-1}$), T 为温度(K), $Q=201$ (kJ/mol), $a=650$, $n=2$, R 为气体常数, $A_1=0.56$, $A_2=1.4 \times 10^{-27}$ (n/cm^2), $A_3=1.3$ 。

对辐照生长, 经常采用ESCOR经验模型^[14]:

$$\varepsilon_g = A(\Phi t)^n, \quad (24)$$

其中, Φ 为快中子通量密度, 材料常数 $A=3 \times 10^{-20}$, $n=0.794$ 。

目前锆合金包壳的塑性模型仍然主要基于 J_2 准则(即第四强度理论), 并未考虑辐照和吸氢引起的硬化或脆化效应, 导致只能采用经验性的准则(如采用等效的应力、应变或应变能密度)作为包壳失效的依据。为对包壳的结果完整性进行预测, 较严格的方法是采用损伤力学模型描述包壳材料的塑性损伤行为, 其中较常采用的损伤塑性模型为Gurson-Tvergaard-Needle-

man (GTN)或Rousselier损伤模型. 为考虑锆合金的腐蚀吸氢致脆, 需要对经典的GTN模型或Rousselier模型进行改进. 一个重要的改进是考虑氢含量对力学参数的影响, 比如Desquines等人^[23]采用实验标定的方法建立了氢含量与再结晶锆合金GTN模型中各参数之间的关系(表1). 另一项重要的改进是考虑氢化物取向造成的各向异性, 其中最简单的方法是利用Hill等效应力代替von-Mises等效应力. 更完善的各向异性损伤塑性模型仍有待研究和开发.

在细观模型研究方面, Arsenlis等人^[24]建立了基于位错密度的晶体塑性模型, 假设缺陷强度只与缺陷大小有关、辐照缺陷分数在塑性变形中保持不变, 很好地预测了辐照硬化拉伸曲线. Krishna和De^[25]在2011年将晶体塑性模型扩展用于体心立方材料, 基于临界温度(T_c)概念将临界分切应力分为热无关和热相关两部分, 分别考虑二者的辐照缺陷影响, 解释了辐照剂量对于临界温度的影响以及对于辐照软化的影响. Patra和McDowell^[26]针对体心立方晶体塑性模型, 采用Kocks激活能相关的滑移系流动准则, 综合考虑多因素影响, 引入了辐照蠕变、位错交滑移和攀移模型以考虑对于位错密度或滑移强度的影响, 很好地描述了辐照导致多晶材料硬化曲线, 直观模拟了剪切滑移带的局域演化. Barton等人^[27]和Xiao等人^[28]进一步考虑了体心立方材料中的位错环、面心立方材料中的层错四面体与滑移系上位错的空间相互作用. 位错滑移面与缺陷平面相交时二者发生相互作用, 可更有效地模拟辐照下材料的塑性变形局部化行为. 晶体尺度模型研究为精确描述变形损伤行为提供了理论参考, 但模型的复杂性限制了其在实际工程问题中的应用.

3.2.3 核燃料设计和评估中的多物理场和多尺度耦合

作为承受辐照作用、化学作用以及热作用最为强烈的部件, 核燃料元件的性能分析和结构设计是一个典型的多物理场问题. 考虑到辐照作用是通过影响燃料的微观结构(如重结晶、裂变产物导致的肿胀等)和核素组成而间接地影响核材料的力学行为, 最理想的方式应该是通过多尺度方法描述这一复杂的耦合现象, 即在微观尺度上根据燃耗定量计算裂变产物的生成量和空间分布, 并根据燃耗和温度计算 UO_2 晶粒尺寸和形貌的演化, 然后在材料的热-力学模型中充分考

表 1 氢含量([H], ppm)对GTN模型参数的影响

Table 1 Influence of concentration of Hydrogen([H], ppm) on GTN model

参数	关系式
F_N	$[H]/16000$
ϵ_N	$6.43 \times 10^{-1} + 1.19 \times 10^{-4} [H]$
s_N	$9.90 \times 10^{-2} + 2.30 \times 10^{-4} [H]$
f_c	$8.00 \times 10^{-3} \exp(-10^{-3} [H])$

虑裂变产物和微观结构的影响. 然而, 由于相关的物理机制非常复杂且相互影响(如裂变气体的扩散和释放、燃料芯块的温度、燃料芯块破裂三个因素之间相关影响), 目前主要通过上述唯象和割裂的方式描述主要的耦合现象. 随着计算材料科学的进步以及材料实验堆的逐步退役, 近年来国际上开始尝试耦合多尺度模拟和多物理模拟, 逐渐发展机理型的核燃料热-力学本构模型. 法国原子委员会发展的MARGARET微观裂变气体模型^[29]考虑了裂变气体生成、迁移与释放的整个过程, 还考虑了温度、静水压力以及微观结构(正常晶粒结构(Normal Grain Structure, NGS)、高燃耗结构(High-Burnup Structure, HBS)和部分重构结构(Partially Re-structured, PRS))对裂变气体生成和迁移的影响. 所以通过耦合MARGARET模型和热-力学有限元计算模型, 不仅能在材料点上直接计算裂变气体导致的肿胀应变, 还能在瞬态工况下较好地预测裂变气体的生成和释放量. 美国爱达华国家实验室不仅将裂变气体模型和肿胀模型进行耦合^[30], 还通过与相场模型更加细致地考虑了 UO_2 芯块微观结构的演化及其对热-力学性能的影响^[31]. 基于多物理场、多尺度耦合的高保真模拟已成为核燃料设计和评估方法发展的重要方向.

4 核燃料组件和堆内构件的关键力学问题

4.1 流致振动和流固耦合问题

当流体流经细长杆件或薄壁构件时, 如果流体的压力波动与结构的振动产生耦合则会引发结构产生持续的振动, 进而导致磨损和疲劳等问题. 在压水堆中, 燃料棒的振动以及蒸汽发生器传热管的振动是最典型的两个流致振动问题, 前者会使燃料包壳与定位搁架的磨损加剧而导致包壳破损, 后者会使传热管因撞击和疲劳等原因而破裂. 核电发展历史上已有多起因流

致振动引发的事故. 在反应堆发生严重事故时, 流固耦合效应则更为显著. 比如一回路管道发生破裂, 冷却水的快速流失(Loss of Coolant Accident, LOCA)会导致压力迅速下降而形成卸压冲击波, 卸压冲击波传播到压力容器后会使压力容器发生不可忽略的变形, 反过来这种变形也会影响冷却水压力的变化. 这种冷却水和主管道以及压力容器结构之间的耦合作用非常显著^[32-34], 因此近些年的破口失水事故分析均考虑了流体和固体的双向耦合作用^[35-37], 计算得到的结构变形及压力变化历程和实验测量之间具有很好的一致性. 在蒸汽爆炸(堆芯熔融物跌入冷却水在瞬间产生大量蒸汽而引发的爆炸)和氢气爆炸(燃料棒和堆内构件与水发生化学反应产生大量的氢气而引发的爆炸)等严重事故中, 流体和固体结构的耦合作用更为显著. 比如对压力容器外的蒸汽爆炸, 急剧膨胀的蒸汽对压力容器的底部和堆腔产生强烈冲击, 导致压力容器和堆腔结构发生较大的变形, 反过来这种变形又会影响蒸汽压力的演化. 如果忽略这种流固耦合作用, 则预测的爆炸压力波以及结构的变形会被严重高估.

经过多年的发展, 目前已形成多种适用于流固耦合系统的数值模拟算法^[38], 根据流-固界面上的网格是否一致(即在流固界面上流体的节点和固体的节点一一对应)可大致分为两类. 采用一致性网格(即在流固界面上流体的节点和固体的节点一一对应)可以大大方便编程, 同时计算的精度也较高. 但对复杂的工业应用, 生成一致性的网格在前处理操作中并不容易. 采用非一致性网格(即在流固界面上流体的节点和固体的节点并不一一对应)非常便于单独离散流体域和固体域, 但这种网格对计算精度有一定的影响. 另外, 流固耦合作用的施加方法(耦合界面上流体节点和固体节点的速度还是将流体的压力传递到固体上)、流体域的求解方法(有限元法、节点中心有限体积法还是单元中心有限体积法)等方法均对计算的效率和精度有一定的影响.

作为一种典型的流固耦合问题, 流致振动问题由于振动频率高、作用时间长且流场更为复杂, 采用上述流固耦合算法直接研究流致振动问题的计算量过大, 难以完成有效的统计和分析. 采用半经验公式法或等效载荷法描述流固耦合效应是目前两种最常用的流致振动分析方法. 这两种方法均不求解最耗时的流动问题, 而采用半经验公式或等效载荷描述流体施加到

固体上的作用力. 对燃料棒或传热管等结构, 流致振动有四种主要的机理, 即流弹失稳、湍流激振、漩涡脱落以及声共振. 半经验公式法结合实验所得数据和理论推导, 提出描述这四种机理对结构振动影响的半经验公式. 这种方法计算效率非常高, 由于经验公式源于实验测试, 所以在精度上也有较好的保障. 但由于提出的半经验公式只针对特定的模型, 该方法的普适性较差. 等效载荷法介于直接流固耦合分析法和半经验公式法之间, 一方面在分析振动时, 采用有限元方法直接求解结构的动力学方法; 但在分析流致作用力时, 采用与半经验法类似的思路将不同的流致振动效应一一等效为施加到结构上的外荷载. 为获得等效荷载力, 通常需要先对等效荷载力应该满足的数学形式进行推导, 然后通过实验方式获取公式中的相应参数^[39-41]. 等效载荷法相比于直接流固耦合法可以大大地减少计算量, 另一方面, 此方法相对于半经验公式法又有着较高的灵活性, 因此已成为核能领域分析流致振动问题时最常用的方法.

4.2 化学效应导致的应力腐蚀问题

在压水堆中, 结构材料长期服役在流动的高温高压水中. 主回路不锈钢焊接接头的应力腐蚀、蒸汽发生器传热管(镍基690/800合金)的应力腐蚀开裂(Stress Corrosion Cracking, SCC)、二回路的流动加速腐蚀等是影响核电站长时运行安全的重要失效模式, 而且应力腐蚀开裂所占比例远高于其他模式. 特别是异材焊接区域的成分和组织复杂, 不可避免地存在成分不均、微观缺陷和残余应力等, 加上辐照效应影响, 会进一步加重SCC的发生. 异种焊接接头SCC失效是核电站安全的极大威胁, 我国和欧美日等国的核电站发生过多起异材焊接接头失效事故.

核材料应力腐蚀开裂是个复杂的过程, 受到材料微结构、水化学环境、力学因素等的综合影响^[42]. 世界各国学者们分别从温度、加载载荷、残余应力、预变形、水化学环境等方面对SCC进行了研究^[43-50]. 在材料因素方面, 现有研究表明, 晶界结构完整和成分均匀有利于抑制SCC, 小角晶界和CSL晶界对SCC的抑制比大角晶界更好, 共格 $\Sigma 3$ 晶界一般具有更强的抗SCC能力. 冷加工和辐照硬化会加速SCC, 残余应力/应变也会加速SCC. 材料表面划伤和缺陷会引起局部微结构和电化学差异而加快SCC.

材料在核电环境的腐蚀损伤实质是其在高温高压水中的电化学反应. 高温高压水中材料的电动力学与常温下显著不同: 304 不锈钢和 625 镍基合金是由化学反应控制, 而在常温下是由离子在液相中的迁移控制; 蒸汽发生器传热管 690 合金在模拟缝隙水化学条件的常温和高温下均由离子在液相中的迁移控制, 都表现出钝化行为.

核材料 SCC 受到水化学参数的直接影响, 如电极电位、溶氧、溶氢、其他离子浓度及温度等, 优化水化学参数可抑制 SCC 发展进程. 腐蚀电位升高, SCC 抗性降低. 异材焊接件 A508/52M/316L 的模拟一回路 SCC 研究表明^[44], 在较低电位时以韧性断裂为主, 在较高电位时发生显著的 SCC 断裂. Andresen 等人^[45]对不锈钢和镍基合金研究也发现裂纹扩展速率随腐蚀电位降低而减小^[46]. 在溶氧影响方面^[47], 氧气浓度增加, 不锈钢 SCC 扩展速率迅速增加而趋于饱和; 且高温高压水 SCC 在低氧气浓度时发生穿晶应力腐蚀破裂, 高氧气浓度时发生沿晶应力腐蚀破裂^[48]. 为减轻溶氧影响, 通常会向一回路的水中通入氢气, 同时降低材料腐蚀电位和溶氧量.

另外, 侵蚀性离子 Cl^- 、 SO_4^{2-} 和 NO_3^- 等对 SCC 影响显著. 304 不锈钢研究显示^[49], SO_4^{2-} 危害最显著, NO_3^- 促进 IGSCC 裂纹萌生, 但降低扩展速率. A508-309L/308L 焊接接头研究指出^[50], SO_4^{2-} 离子降低裂纹扩展门槛, 且增加裂纹扩展速率. Andresen 等人^[51]指出, 低浓度 Cl^- 和 SO_4^{2-} 离子也会显著加快低合金钢的裂纹扩展. 一回路中的 BO_3^+ 和 Li^+ 浓度对 SCC 临界应力强度因子和裂纹扩展速率影响甚微^[52]. 在温度影响方面, Andresen^[53] 研究 304 不锈钢和 Inconel 600 表明, 温度对裂纹扩展速率影响显著, 200°C 时水环境裂纹扩展速率是 25°C 的 30–100 倍. 304 不锈钢在超临界水中裂纹扩展速率和裂纹深度均随着温度升高而增加^[54]. SCC 裂纹扩展速率与温度的关系可用 Arrhenius 方程^[55] 表示:

$$\frac{da}{dt} = C \cdot \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (25)$$

其中, $\frac{da}{dt}$ 为裂纹扩展速率, Q 为裂纹扩展的激活能 (J/mol), R 为理想气体常数 ($8.3143 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$), T 为温度 (K), C 与实验加载参数有关.

国内外对于应力腐蚀开裂机理和裂纹扩展速率的研究已提出了一些机理模型, 如氧化膜破裂模型、环

境耦合断裂模型、内氧化模型、溶解或空洞蠕变模型、膜致解理模型、基于氢脆的模型等, 其中氧化膜破裂模型接受度较高, 裂纹扩展速率 V_t 表达式为^[56]

$$V_t = \frac{M}{ZF\rho} \frac{Q_f}{\varepsilon_f} \dot{\varepsilon}_{ct}, \quad (26)$$

其中 M 为原子量 (g/mol); Z 为离子价态, 其取值为 2 或 3; F 为法拉第常数 (6500 C/mol); ρ 为密度 (g/cm^3); Q_f 为参与溶解/氧化过程的电荷密度 (C/cm^2), ε_f 和 $\dot{\varepsilon}_{ct}$ 分别为裂尖氧化膜破裂应变和裂尖应变率. Vaillant 等人^[57] 通过实验分析得到了 SCC 扩展速率与应力强度因子之间的关系. Andresen 和 Ford^[58] 基于实验和理论研究提出材料应力腐蚀扩展速率的 For-Andresen 模型如下:

$$\frac{da}{dt} = \frac{M}{Z \cdot \rho \cdot F} \cdot \frac{i_0}{1-m} \left(\frac{t_0}{\varepsilon_f}\right)^m \cdot (\dot{\varepsilon}_{ct})^m, \quad (27)$$

其中 ε_f 和 $\dot{\varepsilon}_{ct}$ 分别为裂尖氧化膜破裂应变和裂尖应变率, M , Z , F , t_0 等分别为金属原子质量、氧化过程电荷变量、法拉第常量、氧化膜形成时间. 该模型被广泛用于轻水堆材料应力腐蚀裂纹扩展研究. 由于实验直接测量裂尖应变率存在较大困难, 日本 Shoji 等人^[59] 对 Ford-Andresen 模型基于我国黄克智院士团队给出的应变强化材料裂尖应变场, 修正得到了 FRI 裂尖应变率模型. 该模型能够分析环境、材料和力学因素对裂纹扩展速率的影响. 在该模型中, 与裂尖前缘表征距离 r_0 处的塑性应变变化率 $d\varepsilon_p/da$ 作为影响 SCC 的力学因素. 此外, 国内外也开展了有限元研究工作, 用以探究应力腐蚀裂纹尖端的应变演化特征和扩展行为, 提供了有价值的参考^[60].

目前关于 SCC 的微观机制和预测模型还没有完整统一的理论论述. 除了氧化膜破裂模型外, 大部分模型参数不能直接实验测得, 而且特定核材料和环境组合下是否为氧化膜破裂机制尚不清楚. 因此, 基于先进原位实验和微观分析技术阐明 SCC 从局部腐蚀向裂纹萌生转变的微观机理, 提出控制 SCC 裂纹扩展的宏微观力学参量, 发展裂纹扩展速率的定量模型和 SCC 损伤评估方法, 是迫切需要深入开展的重要工作.

5 反应堆结构安全评估中的关键力学问题

5.1 安全壳结构的设计与评估

作为第三道屏障, 反应堆安全壳是防止核事故发

生后放射性物质泄漏到环境中的最后防线. 目前我国二代(或二代半)轻水反应堆的安全壳均为单层预应力钢筋混凝土结构(图1). 即将投入运行的EPR三代堆的安全壳为双层结构(图7), 安全壳外墙的主要材料为钢筋混凝土, 其作用在于抵抗外界破坏(如飞机撞机事故等). 内墙主要材料为预应力钢筋混凝土, 其作用主要是保证安全壳的封闭性^[61]. 内外墙之间的空间主要用于收集事故中的泄露气体. AP1000三代堆的安全壳也为双层结构(图7), 外层为预应力混凝土, 内层为钢板结构. 安全壳要求能够承受约5个大气压的内部压力, 并要求在失水事故下, 安全壳泄漏率必须小于1.5%的总气体质量^[62]. 作为一种复杂的脆性材料, 混凝土在安全壳内外壁温差的作用下很容易产生裂纹, 从而导致气体泄漏. 如何准确地预测与估计安全壳的泄漏率是安全壳结构设计和安全评估面临的一项技术挑战. 此外, 如何准确地确定安全壳在爆炸、撞击等事故下的极限承载能力是另外一项挑战. 回答这些问题的核心是如何合理地描述混凝土内裂纹的产生和扩展以及如何描述混凝土与钢筋或钢索的结合.

和描述 UO_2 陶瓷材料类似, 目前主要有连续法和离散法两类方法描述混凝土材料的损伤和破坏. 连续法使用弹塑性损伤模型来模拟脆性材料的断裂^[63-66], 该方法不考虑实际的裂纹尺寸和分布, 损伤和破裂导致材料性能退化被等效为损伤因子. 然而, 这种方法在进行有限元模拟时经常面临结果过度依赖网格密度的问题. 由于材料的总能量耗散等于所有体积单元能耗的总和, 当无限细化网格时, 那么每个体积单元的体积趋于零, 即材料的总能量耗散也趋于零. 这是

图 7 (网络版彩图)EPR(左)和AP1000(右)安全壳结构示意图

Figure 7 (Color online) Schematics of the EPR reactor containment (left) and the AP1000 reactor containment (right).

采用局部本构模型(Local Model)所不可避免的缺陷. 为了避免这种问题的产生, 其中一种可能的解决方法是使用非局部模型(Non-Local Model). 非局部模型是通过在模型中引入一个固定能耗带宽度的特征长度, 或在塑性模型中引入塑性形变梯度^[67]. 单纯的离散法考虑每个裂纹的尺寸和方向, 由于事先通常并不知道裂纹的分布, 这种方法在实际应用中存在较大的局限. 因此, 研究人员一直在努力发展一种综合连续法与离散法优点的模拟方法, 常见的方法有采用内聚力模型(Cohesive Zone Model, CZM)和扩展有限元方法(Extended Finite Element Method, XFEM). CZM方法需要预先定义潜在开裂的位置并定义裂纹的张开和失效行为. 这种方法的一个好处是只需要对裂纹网格加密, 其他地方的网格不需要加密, 但难点在于如何判断潜在开裂的位置. 在简单情况下, 可以根据应力场或位移场来大致判断裂纹的位置, 但在大多数情况下并易确定裂纹的位置和数量. 通过自适应网格加密或结合XFEM方法可以部分解决这个问题.

除裂纹外如何模拟安全壳混凝土内的钢筋与预应力钢筋也是一个难点. 考虑到钢筋的实际结构, 虽然使用梁单元、杆单元等模拟钢筋比较复合实际情况, 但这种方法需要考虑每根钢筋, 建模困难且收敛性差^[68,69]. 目前常用的处理方法是普通钢筋等效为二维的平面膜结构. 预应力钢筋或钢索数量较少, 因此可以单独按梁、杆单元进行处理. 采用这种方法建模较为方便, 且收敛性较好, 但其难点是不易考虑钢筋的偏斜. 在处理钢筋与混凝土的结合时, 最常见的假设是钢筋与混凝土之间不存在滑移, 在进行有限元模拟时通过节点重合或定义多自由度约束的方法即可定义这种情况. 但在混凝土变形较大特别是破裂的地方, 这种假设不再合理. Martin^[70]采用黏性本构关系模拟了钢筋与混凝土之间的接触和滑移. 截至目前, 并未有人同时使用膜单元与黏性单元来分别模拟钢筋及钢筋-混凝土接触. 综合考虑计算量和结果精度, 对反应堆安全壳比较合理的建模方式是采用弹塑性损伤模型描述混凝土的复杂力学行为, 采用等效的二维膜结构模拟普通钢筋, 采用梁结构单独模拟预应力钢索, 假定混凝土与钢筋、钢索之间无滑移^[71].

5.2 核电设备强度评估准则

对核燃料、反应堆安全壳等复杂系统, 由于材料

的力学行为非常复杂, 目前尚未建立在工业中通行的强度和寿命评估准则, 相关的设计和分析多依赖于精细的力学分析和强度计算. 而对反应堆压力容器以及一般的核电设备, 考虑到开展详细应力分析的复杂性, 目前工业中主要采用各种强度规范来校核相关的结构设计. 在核电领域, ASME规范和RCCM规范是最常用的两个规范. 美国ASME锅炉及压力容器规范是由美国机械工程师学会(ASME)的锅炉及压力容器委员会制定的综合性规范, 核设施的设计制造标准仅是其中一部分. RCCM是法国核协会根据本国国情, 针对大型压水堆核电设备设计制造的专用标准, 它将ASME规范中分散在各卷中的有关标准汇集在一起并进行了修订, 因此针对性更强、更方便应用. 这些规范采用的基本思想是一次薄膜应力或最大直接应力不得超过许用应力, 计算应力依据的理论是最大应力理论. 考虑应力评估方法的复杂性、应力集中程度、材料一定程度的不均匀性、焊接接头中存在的缺陷等因素的影响, 标准中公布的许用应力均低于材料的实测强度, 各国标准中规定的安全系数有所不同, 主要依据的是经验、试验证据和理论评估, 同时与其规定的材料标准、计算方法、制造要求和检验要求相适应.

在压力容器设计时, 主要考虑了两种失效理论: 一是过量的弹性变形, 包括基于弹性理论的弹性失稳; 另一个是由于过量的弹性变形和塑性失稳, 即增量跨塌, 设计时通常假定弹性失效. 弹性失效是假定当材料已经达到弹性极限时发生的失效, 超过这一极限将会发生过量变形或断裂破坏. 对于金属材料, 弹性极限是以拉伸强度、屈服强度和断裂强度三项来测定. 测定弹性失效的三个通用理论是最大主应力理论、最大剪应力理论和变形能理论. 各国压力容器标准都应用了上述强度理论用于压力容器的设计, 但具体的计算公式却存在着差异.

6 展望

自1951年12月美国实验增殖堆1号(EBR-1)首次利用核能发电, 核电迄今已走过近70年的历程. 作为一种高效、清洁和低成本的能源, 核能发电量目前在世界范围内约占总发电量的11%. 然而, 由于尚未完全掌握核材料和核结构在辐照、腐蚀、高温以及机械载荷作用下的复杂力学行为特性, 目前仍难以定量地回答涉

及反应堆设计、建造、运行、维护以及退役等阶段的诸多问题. 对压水堆实施全生命周期管理亟需突破以下难题.

(1) 辐照效应的多尺度模型和数值模拟方法. 无论是核燃料还是核结构材料, 辐照效应是导致其力学和热学性能退化的主要因素. 基于计算机仿真模拟的多尺度建模已成为辐照效应研究的重要手段. 尽管多尺度建模已经取得了丰富的研究成果, 然而对核材料体系的多尺度建模仍面临不少挑战和难题: 1) 如何定义不同时间-空间尺度上的辐照损伤参量? 2) 损伤参量在不同时间-空间尺度上如何传递和耦合? 3) 对微观模型, 高能辐照下原子间的长程作用导致计算规模剧增, 如何高效处理 $\sim 10^9$ 量级自由度的材料体系?

(2) 模拟辐照实验技术和材料性能表征技术. 考虑到堆内外中子辐照实验不仅周期长、费用高, 并且各种材料实验堆不断退役, 发展模拟辐照方法(如离子注入法)对研究辐照效应至关重要. 模拟辐照与实际辐照间等效关系的建立和确立是首先需要解决的问题. 对离子辐照, 由于注入区域尺寸小且辐照通量不均匀, 如何对微小辐照区域内非均匀材料的力学性能进行表征也需要深入研究.

此外, 核材料在全寿期辐照剂量范围内的辐照促进应力腐蚀、蠕变、断裂数据仍然非常缺乏. 系统地开展两种和多种因素作用下的模拟核电工作环境下材料性能的测试, 阐明模拟环境与实际堆内环境下材料性能的转换关系, 建立高质量的核材料基础数据库, 也是核材料研发、性能预测和延寿评估面临的重要问题.

(3) 核燃料性能的多物理、多尺度精细模型与预测方法. 目前尚未解决的问题主要包括: 1) 高温和辐照作用下 UO_2 材料微观结构的演化规律; 2) 裂变气体在燃料内的迁移、释放规律以及与燃料变形的耦合; 3) 材料微观结构的演化及裂变气体释放对宏观力学行为及热学行为的影响; 4) 综合考虑高温、腐蚀和辐照等效应的核燃料的损伤和破坏力学模型; 5) 综合考虑多物理、多尺度效应的精细模型及数值求解技术.

(4) 堆内构件存在显著的应力腐蚀、辐照促进应力腐蚀问题, 原位实验技术的发展使得在微观机理上取得一定进展, 但是关于辐照促进应力腐蚀开裂的理论研究明显滞后于实验工作, 目前仍主要依赖于工程模型. 因此, 在核材料腐蚀的定量预测方法和理论模型方面仍需开展大量研究工作.

另一方面, 压力容器作为反应堆全寿期内唯一不可替代的关键构件, 目前工程上主要依赖辐照监督试样的破坏性测试来监测服役期间压力容器钢的脆化转换. 如何更高效、更合理地评估压力容器的性能老化尤其是如何采用无损检测技术进行持续的监测具有重要的价值.

(5) 反应堆构件及安全壳结构的精细化建模方法及并行求解技术. 反应堆堆内构件(如燃料组件、堆芯

吊篮)结构复杂, 整体构件的尺寸和其组成部件(如螺栓、芯块)的尺寸有三个数量级的差异. 类似的, 安全壳整体结构的尺寸和内部钢筋、钢索的尺寸也相差巨大. 此外, 事故下流体和固体结构的耦合作用也非常显著. 对这些复杂结构和复杂问题, 如何快速、合理、高质量地建立精细化的力学分析模型仍有待改进和验证, 对这类非线性大规模问题的并行求解技术也需要深入开发.

参考文献

- 1 Yu J N. Irradiation Effects of Materials (in Chinese). Beijing: Chemical Industry Press, 2007 [郁金南. 材料辐照效应. 北京: 化学工业出版社, 2007]
- 2 Zinkle S J, Was G S. Materials challenges in nuclear energy. *Acta Mater*, 2013, 61: 735–758
- 3 Woo C H, Singh B N. Production bias due to clustering of point defects in irradiation-induced cascades. *Philos Mag A*, 1992, 65: 889–912
- 4 Woo C H, Singh B N, Garner F A. Production bias: A proposed modification of the driving force for void swelling under cascade damage conditions. *J Nucl Mater*, 1992, 191-194: 1224–1228
- 5 Semenov A A, Woo C H. Phase-field modeling of void formation and growth under irradiation. *Acta Mater*, 2012, 60: 6112–6119
- 6 Mechanical Properties of Tungsten after Neutron Irradiation. Fusion Reactor Materials Program. Technical Report. U. S. Department of Energy, 2013
- 7 Phythian W J, English C A. Microstructural evolution in reactor pressure vessel steels. *J Nucl Mater*, 1993, 205: 162–177
- 8 Hoelzer D T, Ebrahimi F. Effect of copper and nickel on the neutron irradiation damage in iron alloys. *MRS Online Proc Lib Archiv*, 1994, 373: 57
- 9 Kočík J, Keilová Ě, Čížek J, et al. TEM and PAS study of neutron irradiated VVER-type RPV steels. *J Nucl Mater*, 2002, 303: 52–64
- 10 Makin M J, Whapham A D, Minter F J. The formation of dislocation loops in copper during neutron irradiation. *Philos Mag*, 1962, 7: 285–299
- 11 Woo C H. Effect of anisotropic diffusion on irradiation deformation. In: Proceedings of 13th Radiation Effect on Materials Symposium. Seattle, 1986
- 12 Yang R, Cheng B, Deshon J, et al. Fuel R & D to improve fuel reliability. *J Nucl Sci Tech*, 2006, 43: 951–959
- 13 Lucuta P G, Matzke H, Hastings I J. A pragmatic approach to modelling thermal conductivity of irradiated UO₂ fuel: Review and recommendations. *J Nucl Mater*, 1996, 232: 166–180
- 14 Hargman D L, Reymann G A. MATPRO-Version 11: A Handbook of Materials Properties For Use in the Analysis of Light Water Reactor Fuel Rod Behavior. Technical Report, Idaho National Engineering Lab., Idaho Falls, 1979
- 15 Helfer T, Michel B, Proix J M, et al. Introducing the open-source mfront code generator: Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform. *Comput Math Appl*, 2015, 70: 994–1023
- 16 Martin D. The elastic constants of polycrystalline UO₂ and (U, Pu) mixed oxides: A review and recommendations. *High Temper-High Pressures*, 1989, 21: 13–24
- 17 Kramman M A, Freeburn H R, eds. Escore-the EPRI Steady-state Core Reload Evaluator Code: General Description. Technical Report. EPRI NP-5100. Electric Power Research Institute, 1987
- 18 Rashid Y R. Mathematical modeling and analysis of fuel rods. *Nucl Eng Des*, 1974, 29: 22–32
- 19 Hillner E. Corrosion of Zirconium-base alloys: An overview. *Zirconium Nucl Indust*, 1977, 633: 211
- 20 Asher R C, Davies D, Kirstein T B A, et al. The effects of radiation on the corrosion of some Zr alloys. *Corrosion Sci*, 1970, 10: 695–707
- 21 Hoppe N E. Engineering model for zircaloy creep and growth. In: Proceedings of the ANS-ENS International Topical Meeting on LWR Fuel Performance. Avignon, 1991. 157–172
- 22 Limbäck M, Andersson T. A model for analysis of the effect of final annealing on the in-and out-of-reactor creep behavior of zircaloy cladding.

- In: Zirconium in the Nuclear Industry: 11th International Symposium. West Conshohocken: ASTM International, 1996
- 23 Desquines J, Busser V, Perales F. Simulating hydride embrittlement of cold-worked stress-relieved zircaloy-4 with gursong-tvergaard-needleman damage model. In: 18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology. Beijing, 2005
- 24 Arsenlis A, Wirth B D, Rhee M. Dislocation density-based constitutive model for the mechanical behaviour of irradiated Cu. *Philos Mag*, 2004, 84: 3617–3635
- 25 Krishna S, De S. A temperature and rate-dependent micromechanical model of molybdenum under neutron irradiation. *Mech Mater*, 2011, 43: 99–110
- 26 Patra A, McDowell D L. Continuum modeling of localized deformation in irradiated bcc materials. *J Nucl Mater*, 2013, 432: 414–427
- 27 Barton N R, Arsenlis A, Marian J. A polycrystal plasticity model of strain localization in irradiated iron. *J Mech Phys Solids*, 2013, 61: 341–351
- 28 Xiao X, Song D, Xue J, et al. A size-dependent tensorial plasticity model for FCC single crystal with irradiation. *Int J Plast*, 2015, 65: 152–167
- 29 Noirot L. MARGARET: A comprehensive code for the description of fission gas behavior. *Nucl Eng Des*, 2011, 241: 2099–2118
- 30 Pastore G, Luzzi L, Di Marcello V, et al. Physics-based modelling of fission gas swelling and release in UO₂ applied to integral fuel rod analysis. *Nucl Eng Des*, 2013, 256: 75–86
- 31 Gaston D R, Permann C J, Peterson J W, et al. Physics-based multiscale coupling for full core nuclear reactor simulation. *Ann Nucl Energy*, 2015, 84: 45–54
- 32 Andersson L, Andersson P, Lundwall J, et al. On the validation and application of fluid-structure interaction analysis of reactor vessel internals at loss of coolants accidents. *Comput Struct*, 2003, 81: 469–476
- 33 Casadei F, Potapov S. Permanent fluid-structure interaction with non-conforming interfaces in fast transient dynamics. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2004, 193: 4157–4194
- 34 Wolf L. Experimental results of coupled fluid-structure interactions during blowdown of the HDR-vessel and comparisons with pre- and post-test predictions. *Nucl Eng Des*, 1982, 70: 269–308
- 35 Brandt T, Lestinen V, Toppila T, et al. Fluid-structure interaction analysis of large-break loss of coolant accident. *Nucl Eng Des*, 2010, 240: 2365–2374
- 36 Faucher V, Crouzet F, Debaud F. Mechanical consequences of LOCA in PWR: Full scale coupled 1D/3D simulations with fluid-structure interaction. *Nucl Eng Des*, 2014, 270: 359–378
- 37 Hermansky P, Krajčovič M. The numerical simulation of the WWR440/V213 reactor pressure vessel internals response to maximum hypothetical large-break loss of coolant accident. *Nucl Eng Des*, 2011, 241: 1177–1183
- 38 Casadei F, Halleux J P, Sala A, et al. Transient fluid-structure interaction algorithms for large industrial applications. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2001, 190: 3081–3110
- 39 Piteau P, Delaune X, Antunes J, et al. Experiments and computations of a loosely supported tube in a rigid bundle subjected to single-phase flow. *J Fluids Struct*, 2012, 28: 56–71
- 40 Hassan M, Hayder M. Modelling of fluidelastic vibrations of heat exchanger tubes with loose supports. *Nucl Eng Des*, 2008, 238: 2507–2520
- 41 Antunes J, Piteau P, Delaune X, et al. A new method for the generation of representative time-domain turbulence excitations. *J Fluids Struct*, 2015, 58: 1–19
- 42 Andresen P L. Emerging issues and fundamental processes in environmental cracking in hot water. *Corrosion*, 2008, 64: 439–464
- 43 Crum J R, Nagashima T. Review of alloy 690 steam generator studies. LaGrange Park: American Nuclear Society, 1997
- 44 Li G F, Li G J, Fang K W, et al. Stress corrosion cracking behavior of dissimilar metal weld A508/52M/316L in high temperature water environment. *Acta Metall Sin*, 2011, 47: 797–803
- 45 Andresen P L, Reid R, Wilson J. SCC mitigation of Ni alloys and weld metals by optimizing dissolved H₂. In: Proceedings of 14th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems—Water Reactors. Virginia Beach: American Nuclear Soc, 2009. 345–372
- 46 Cheng M A, Peng Q J, Han E H, et al. Review of stress corrosion cracking of structural materials in nuclear power plants. *J Chin Soc Corrosion Prot*, 2014, 34: 37–45
- 47 Szklarska-Smialowska S, Cragolino G. Stress corrosion cracking of sensitized type 304 stainless steel in oxygenated pure water at elevated temperatures (review). *Corrosion*, 1980, 36: 653–665
- 48 Hirano H, Aoki N, Kurosawa T. The effect of dissolved oxygen and NO₃⁻ anions on the stress corrosion cracking of type 304 stainless steel in

- water at 290°C. *Corrosion*, 1983, 39: 313–322
- 49 Ljungberg L G, Cubicciotti D, Trolle M. Effects of impurities on the IGSCC of stainless steel in high-temperature water. *Corrosion*, 1988, 44: 66–72
- 50 Li G F, Congleton J. Stress corrosion cracking of a low alloy steel to stainless steel transition weld in PWR primary waters at 292°C. *Corrosion Sci*, 2000, 42: 1005–1021
- 51 Andresen P L, Hickling J, Ahluwalia A, et al. Effects of hydrogen on stress corrosion crack growth rate of nickel alloys in high-temperature water. *Corrosion*, 2008, 64: 707–720
- 52 Rebak R B, Szklarska-Smialowska Z. Influence of stress intensity and loading mode on intergranular stress corrosion cracking of alloy 600 in primary waters of pressurized water reactors. *Corrosion*, 1994, 50: 378–393
- 53 Andresen P L. Effects of temperature on crack growth rate in sensitized type 304 stainless steel and alloy 600. *Corrosion*, 1993, 49: 714–725
- 54 Was G S, Ampornrat P, Gupta G, et al. Corrosion and stress corrosion cracking in supercritical water. *J Nucl Mater*, 2007, 371: 176–201
- 55 Hoang P H, Gangadharan A, Ramalingam S C. Primary water stress corrosion cracking inspection ranking scheme for alloy 600 components. *Nucl Eng Des*, 1998, 181: 209–219
- 56 Vermilyea D A. A theory for the propagation of stress corrosion cracks in metals. *J Electrochem Soc*, 1972, 119: 405–407
- 57 Vaillant P, Moulart P, Boursier J M, et al. Crack growth rates in thick materials of Alloy 600 and weld metals of Alloy 182 in laboratory primary water comparison with field experience. In: Fontevraud 5th International Symposium. Fontevraud, 2002. 107–116
- 58 Andresen P L, Ford F P. Modeling and life prediction of stress corrosion cracking: Predictive capabilities in environmentally assisted cracking. In: Proceeding of the ASME Pressure Vessels and Piping. New York, 1985. 17–38
- 59 Shoji T, Lu Z, Murakami H. Formulating stress corrosion cracking growth rates by combination of crack tip mechanics and crack tip oxidation kinetics. *Corrosion Sci*, 2010, 52: 769–779
- 60 Xue H, Shoji T. Quantitative prediction of eac crack growth rate of sensitized type 304 stainless steel in boiling water reactor environments based on EPFEM. *J Pressure Vessel Technol*, 2007, 129: 460–467
- 61 Lee S W, Heo S, Ha H U, et al. The concept of the innovative power reactor. *Nucl Eng Tech*, 2017, 49: 1431–1441
- 62 AP1000 Overview, Technical Report, Westinghouse Electric Company LLC, 2011
- 63 Mazars J. Application de la Mécanique de L'endommagement au Comportement non Linéaire et à la Rupture du Béton de Structure. Palaiseau: Université Pierre et Marie Curie, 1984
- 64 Mazars J, Pijaudier-Cabot G. Continuum damage theory—Application to concrete. *J Eng Mech*, 1989, 115: 345–365
- 65 Rashid Y R. Ultimate strength analysis of prestressed concrete pressure vessels. *Nucl Eng Des*, 1968, 7: 334–344
- 66 Borst R de, Remmers J J C, Needleman A, et al. Discrete vs. smeared crack models for concrete fracture: Bridging the gap. In: Proceedings of the EUROCC Conference 2003, St. Johann im Pongau, March 17–20, 2003
- 67 Sluys L J, de Borst R, Mühlhaus H B. Wave propagation, localization and dispersion in a gradient-dependent medium. *Int J Solids Struct*, 1993, 30: 1153–1171
- 68 Lorentz E. Ill-posed boundary conditions encountered in 3D and plate finite element simulations. *Finite Elem Anal Des*, 2005, 41: 1105–1117
- 69 Jason L, Ghavamian S, Courtois A. Truss vs. solid modeling of tendons in prestressed concrete structures: Consequences on mechanical capacity of a representative structural volume. *Eng Struct*, 2010, 32: 1779–1790
- 70 Martin D. Approche Multi-échelle du Comportementmécanique des Structures Enbétonarmé-Application aux Enceintes de Confinement des Centralesnucléaires. Dissertation for Doctoral Degree. Paris: Ecole Polytechnique X, 2012
- 71 Zhang C, Chen P, Zhang J, et al. Evaluation of the structural integrity of the CPR1000 PWR containment under steam explosion accidents. *Nucl Eng Des*, 2014, 278: 632–643

Key problems on the mechanical behavior of nuclear materials and structures of pressured water reactors

WANG Biao^{*}, ZHANG ChunYu, MA XianFeng, LAI Kan & WEN HaoHua

Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-Sen University, Zhuhai 519082, China

Nuclear energy is an important option to ensure the national energy safety. The mechanical behavior as well as the degradation of the mechanical behavior of nuclear materials under harsh environment of high temperature, intensive radiation and strong chemical corrosion directly affects the performance of the key components and structures, which finally determines the safety and the economy of nuclear reactors and power plants. However, due to the limited knowledge of the mechanical behavior of nuclear materials and structures under complex working conditions, many critical questions remain to be answered during the whole life cycle of a reactor which spans the stages of design, construction, maintenance and dismantlement of the reactor. To clarify the key problems on the studies of the mechanical behavior of nuclear materials and structures, the present papers firstly introduces the basis principles of radiation effects. Then according to the intensity of radiation and chemical corrosion, state of the art studies on the mechanical behavior of the fuels, the reactor internal structures and the containment structure are respectively reviewed. Typical results on the constitutive models of the fuel materials, the stress corrosion crack models, the numerical modeling strategy for fluid-structure interaction problems as well as the design standards, are summarized and listed. Finally the challenges to further studies are analyzed and summarized. High-fidelity multi-scale modeling of the mechanical behavior of fuels and structural materials is the bottleneck for numerical studies and advanced irradiation techniques are the bottleneck for experimental studies.

pressured water reactor, nuclear materials, nuclear structures, radiation effect, mechanical properties

PACS: 28.41.-i, 61.82.Bg, 62.20.-x, 46.15.-x

doi: [10.1360/SSPMA-2019-0113](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0113)