

基于数据驱动的氚粒子扩散三维仿真系统^①



陈威虎^{1,2}, 杨子辉¹, 夏源³, 霍前超¹, 王海霞¹, 汪建业¹

¹(中国科学院合肥物质科学研究院, 合肥 230031)

²(中国科学技术大学, 合肥 230026)

³(中国舰船研究设计中心, 武汉 430064)

通信作者: 杨子辉, E-mail: zihui.yang@inest.cas.cn

摘要: 为了对氚安全包容系统中氚扩散数据的变化进行直观分析, 实现氚扩散的计算数据在空间中的三维可视化, 本文基于 Unity3D 引擎研发了氚安全包容三维虚拟仿真系统. 本系统基于计算数据驱动粒子系统对氚的输运及泄漏扩散过程进行三维仿真, 以中国聚变工程实验堆 CFETR 的排灰处理系统 (TEP) 作为案例, 模拟了排灰处理系统中氚的输运及渗透扩散过程, 对关键位置的渗透泄漏进行了可视化分析, 验证了氚安全包容系统的安全性, 为氚安全包容系统及氚的渗透泄漏研究提供了参考.

关键词: 粒子系统; 虚拟仿真; 氚扩散; 排灰处理系统

引用格式: 陈威虎, 杨子辉, 夏源, 霍前超, 王海霞, 汪建业. 基于数据驱动的氚粒子扩散三维仿真系统. 计算机系统应用, 2022, 31(1): 118-123. <http://www.c-s-a.org.cn/1003-3254/8267.html>

Three-dimensional Simulation System of Tritium Particle Diffusion Based on Data Drive

CHEN Wei-Hu^{1,2}, YANG Zi-Hui¹, XIA Yuan³, HUO Qian-Chao¹, WANG Hai-Xia¹, WANG Jian-Ye¹

¹(Hefei Institute of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

²(University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

³(China Ship Development and Design Center, Wuhan 430064, China)

Abstract: To intuitively analyze the variation of tritium diffusion data in the tritium safety containment system and realize the three-dimensional visualization of the calculated tritium diffusion data in space, this study develops a three-dimensional virtual simulation system for tritium safety containment based on a Unity3D engine. This system carries out a three-dimensional simulation of the tritium transport, leakage, and diffusion process with a particle system driven by calculated data. The tritium transport, leakage, and diffusion process in the tokamak exhaust processing (TEP) system is simulated, with the TEP system of the China Fusion Engineering Testing Reactor (CFETR) as an example. Visual analysis is carried out on key positions of infiltration and leakage, verifying the security of the tritium safety containment system. This study serves as a reference for future research in tritium safety containment systems and tritium infiltration and leakage.

Key words: particle system; virtual simulation; tritium diffusion; ash disposal system

1 引言

中国聚变工程实验堆 (CFETR) 是中国自主设计和研制并联合国际合作的科学工程, 氚作为聚变系统中不可或缺的燃料, 在自然界中含量极少, 需要通过聚变

核反应实现自持. CFETR 氚工厂的主要包括了氚提取、氚排灰处理系统、氚贮存等子系统. 排灰处理系统 (TEP), 作为聚变反应堆氚燃料循环系统中的 3 个主要的氚回收子系统之一, 用于处理含有杂质的氚气

① 基金项目: 国家重点研发计划政府间国际科技创新合作专项 (2017YFE0300305); 安徽省自然科学基金 (2008085MA23); 中国科学院信息化项目 (XXH13506-104)

收稿时间: 2021-03-25; 修改时间: 2021-04-21; 采用时间: 2021-04-30; csa 在线出版时间: 2021-12-17

体同时用来维持氙燃料的自持,最终将尾气中的氙降至废弃净化单元可以处理的量^[1]。

氙的主要形式有两种,即气态氙和氙水。这两种形态均具有较强的放射性,对人体的辐射危害极大,同时也具有很强的渗透特性和扩散特性,会在空间中快速扩散。

1.1 氙安全包容系统

氙安全包容系统,目的是防止放射性物质氙的渗透和扩散影响工作人员以及公众环境^[2],氙安全包容系统采取3层包容策略。

第1层包容,即氙安全包容的第一道物理屏障,包含了氙运输管道、渗透器、增压泵、真空泵等设备。其中管道用于气体的运输,渗透器是基于Pd-Ag合金膜的渗透,处理排灰气体,达到氢同位素与杂质气体的初步分离,增压泵提供动力,将排灰气体输入渗透器进行处理,真空泵提供动力,使得处理过后的排灰气体输出渗透器,以便于进入下一个流程。

第2层包容,即氙安全包容的第2层物理屏障,包含了手套箱等设备。由于氙的渗透性和扩散性,当其从第1层包容中渗透出来后,将会由设备外的手套箱进行第2层包容。

第3层包容,即氙安全包容的第3层物理屏障,即工艺房间。当氙从前两层包容渗透出后,工艺房间作为第3层包容开始发挥作用。

当前的氙安全包容系统的安全性研究涉及系统设备布局、氙气体的扩散过程及其空间的浓度分布等方面,仅依靠理论分析和数值计算难以达到直观的分析效果,通过引入虚拟仿真的方法可以有效解决大量计算数据难以直观分析的问题。虚拟仿真可以在空间上对设备进行模拟布局,对氙气体在氙安全包容系统中的扩散渗透效果进行三维的可视化,为氙安全包容系统的安全性验证提供参考依据。

1.2 研究现状

当前的氙处理系统处于设计与样机建设阶段,其中南华大学刘贵议等人分析了通风对氙泄漏扩散及浓度分布的影响^[3,4],上海交通大学机械与动力工程学院基于氙扩散的基本模型建立了氙扩散行为的一维模拟程序^[5],南开大学研究了 Li_2TiO_3 晶体中氙在表面的扩散(表面扩散)和从内部到表面的扩散(跳跃扩散)^[6]。国外的兰卡斯特大学工程系使用密度泛函理论计算了氙扩散的激活势垒^[7]。当前的主要研究成果,无论是系统的运作过程或是数据模拟主要是偏向于一维或二维的研究,难以在三维空间中进行氙安全包容系统的验证。

随着虚拟现实仿真技术在各大领域的不断发展,虚拟仿真成为各个领域不可或缺的技术手段。其中Velarde等在核聚变核电站氙循环中应用了一种基于多尺度分析的积分方法,计算了氙在核电站建筑内部及现场环境中的扩散情况,并进行了剂量学分析^[8]。江苏科技大学利用粒子系统实现了舰船火灾消防系统中的火灾模拟,中国科学院合肥物质科学研究院核能安全技术研究所曹欢等基于Unity3D对氙提取过程中的扩散效果进行了设计与仿真^[9],中国科学院合肥物质科学研究院核能安全技术研究所基于数字反应堆和辐射虚拟人技术,开展了核与辐射安全仿真系统研发与应用研究^[10]。

Unity3D引擎中粒子系统(particle system)带有物理引擎和丰富的参数设置,包括生命周期、颜色、大小等等参数^[11,12],可以有效地对氙的扩散过程进行仿真。

在前期的工作基础之上,本文利用计算数据对粒子系统进行驱动,实现氙粒子扩散过程中的动态变化的模拟,并面向排灰处理系统进行可视化分析,对同时刻的氙泄漏数值进行空间上的数值模拟。数据驱动下的粒子系统可以让氙的扩散和泄漏的仿真结果更加真实直观。

1.3 本文研究内容

本文基于CATIA、3DMax建模软件及Unity3D引擎,搭建了聚变堆氙粒子扩散三维仿真系统,构建了氙工厂氙安全多层包容场景,通过计算数据与粒子系统结合的方法,对氙输运过程与扩散结果进行了可视化分析。

将CFETR中的排灰处理系统作为案例,验证了氙安全包容系统的安全性。本系统方便分析人员使用,提高了科研人员的工作效率。

2 系统总体设计

系统的总体设计模块主要包括了粒子系统模块、虚拟漫游模块、事故模拟模块、用户交互模块等。

虚拟漫游可以使用户进行第一人称的漫游,并提供视角的快速切换功能,可以快速聚焦局部位置,便于工作人员的研究与分析;粒子系统通过计算数据进行驱动,对氙输运过程中的泄漏扩散及碰撞进行模拟仿真,实现数据的三维可视化分析;模拟工况模块提供了不同工况下的氙扩散仿真;用户交互界面提供了界面的切换、含量查询以及与其他模块交互等功能。氙粒子扩散三维仿真系统总体模块框图如图1所示。

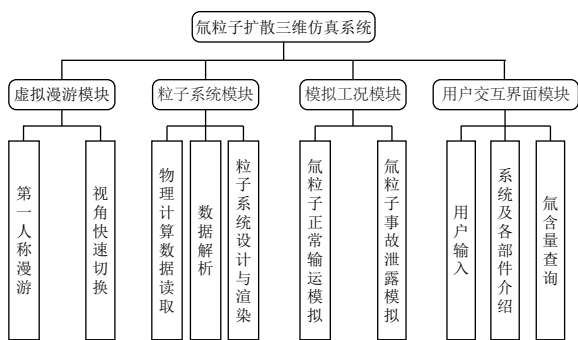


图1 系统结构设计

虚拟漫游模块读取交互模块中的用户输入,实现视角漫游及视角切换;模拟工况模块根据用户输入确定当前粒子系统的运行状态,将不同状态下的氡含量数据从用户的输入中进行读取并存储;粒子系统模块把模拟工况模块中存储的数据读入粒子系统中进行处理,最后驱动相对应的粒子系统参数进行仿真;用户交互模块负责向其他3个模块传递用户的输入,并提供系统的各部分介绍。

3 关键方法

3.1 氡粒子扩散原理

本系统中对于氡扩散的研究基于单相流体理论,基于 Navier-Stokes 方程进行氡输运过程中的模拟,如式 (1) 和式 (2) 所示。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}] + \mathbf{F} \quad (2)$$

其中, ρ 为密度 (kg/m^3), \mathbf{u} 为矢量速度 (m/s), p 为压力 (Pa), $\boldsymbol{\tau}$ 为粘性应力张量 (Pa), \mathbf{F} 为体积力矢量 (N/m^3)。

物理场仿真软件 COMSOL 中对流体的计算包括输送机制、扩散和对流,方程式如 (3) 所示。

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_i + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = R_i \quad (3)$$

其中, c_i 为氡浓度 (mol/m^3), R_i 是氡的反应速率表达式, \mathbf{u} 是质量平均速度矢量, \mathbf{J}_i 是质量通量扩散通量矢量。

质量通量相对于质量平均速度, \mathbf{J}_i ($\text{mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$) 与上述质量平衡方程有关,用于边界条件和通量计算。氡的输运通常包括分子扩散引起的质量输运。在这种情况下,质量通量定义了扩散通量向量,如式 (4) 所示。

$$\mathbf{J}_i = -D \nabla c_i \quad (4)$$

上述公式是有扩散系数的输入场, D 代表了氡粒子扩散系数 (m^2/s)。

本系统中的粒子系统加入碰撞属性,在氡粒子碰撞到手套箱等含有碰撞体的物体时,将为发生碰撞,并且进行反弹,此过程伴随着能量损失和速度变化,可以通过参数进行调节,动力学中的公式如式 (5) 和式 (6):

$$\alpha_1 = \alpha_2 \quad (5)$$

$$|v_2| = k |v_1| \quad (6)$$

其中, α_1 为粒子的入射角, α_2 为粒子反射角, v_1 为粒子碰撞前的速度, v_2 为粒子碰撞后的速度, k 为碰撞系数,大小取值范围为 0~1。

3.2 粒子系统设计

数据驱动的粒子系统设计关键方法路线如图 2。

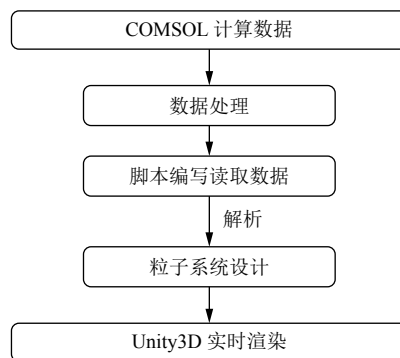


图2 关键技术路线

首先根据氡粒子扩散原理使用多物理场仿真软件 COMSOL 得到氡安全包容系统中手套箱内离散的氡含量数据。

由于数据在时间上是离散的,本文通过线性插值运算的方法对数据进行处理,即在离散数据的基础上补插连续函数,使得这条连续曲线通过全部给定的离散数据点。

通过 C# 编程语言编写读取数据的脚本,将脚本挂载在 Unity3D 中的粒子系统上,系统运行时粒子系统通过此脚本从 txt 文件中读取时间参数及氡含量数据并存放在数组中,最后根据数组中存储的数据对粒子系统的参数在一定范围内进行逐帧修改,变化的参数包括粒子的大小、颜色、生命周期、发射速率等。为了氡粒子的扩散效果更加真实,对粒子仿真的效果进行模拟测试,得到各参数合理的取值范围:粒子的大小取值为 0.8~1,粒子的生命周期设置为 0.6~16.8 s,粒子的发射率为每秒 30~40 个。粒子颜色的 RGB 取值为:

R: 235~150, G: 20~168, B: 20~168, 透明度 alpha 取值为 0.18~0.95. 根据参数的变化范围, 建立了氙浓度数据与粒子系统颜色属性的映射关系, 随着含氙气体的过滤及扩散, 含氙气体中的氙浓度数据由初始的最大值逐渐降低, 粒子的 alpha 取值由 0.95 逐渐减小至 0.18, 最终接近透明, 粒子的颜色 R 的取值随浓度的降低由 235 等梯度降低至 150, G 与 B 的取值由 20 等梯度增加至 168, 由最初的深红色逐渐变淡, 最终变为浅红色.

最终由 Unity3D 进行对粒子系统进行实时渲染, 完成粒子系统对氙扩散的可视化仿真.

针对氙在第一层包容中的运输过程, 对粒子使用盒子型发射器进行模拟, 针对泄漏的粒子使用球形发射器. 系统中氙运输的过程应用粒子系统实现的方法流程如图 3 所示.

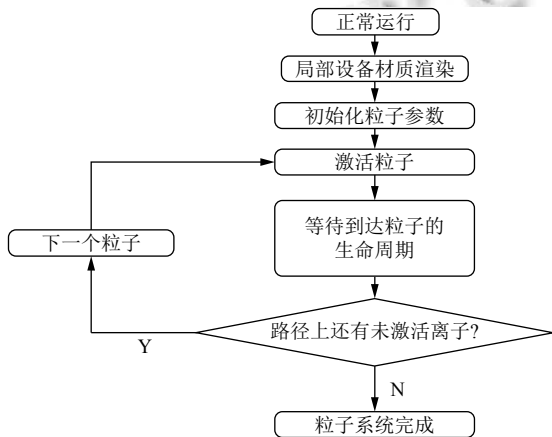


图3 粒子系统模拟氙运输流程

系统开始运行后, Unity3D 对设备材质进行渲染, 粒子系统的参数根据读取的数据进行初始化工作, 粒子系统不断发射新的粒子, 每个粒子逐帧检查自己的生命周期, 到达生命周期后进行销毁, 同时对运输路径上的下一个粒子系统进行激活, 直到所有粒子系统均被激活时, 模拟运输的粒子系统仿真完成.

本系统中氙泄漏扩散的过程应用粒子系统实现的方法流程如图 4 所示.

系统运行过程中, 逐帧将系统运行时间和泄漏粒子系统的延迟激活时间作比较, 当到达泄漏粒子系统的激活时间时, 激活粒子系统发射粒子, 直到所有泄漏位置的粒子系统全部激活完毕后, 完成泄漏粒子系统的仿真. 上述两部分的粒子系统设计由 Unity3D 进行渲染后, 完成粒子系统的整体设计, 实现系统中氙气体的仿真模拟.

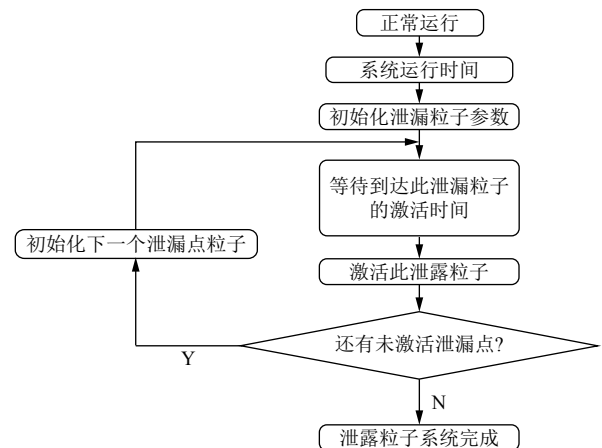


图4 粒子系统模拟氙泄漏扩散流程

4 仿真案例

本系统以 CFETR 中的排灰处理系统 (TEP) 为例进行含氙气体的运输及泄漏扩散仿真, 排灰处理系统的主要功能是处理含有杂质的氙气体, 同时用来维持氙燃料的自持, 最终将尾气中的氙降至废弃净化单元可以处理的量.

4.1 排灰处理系统的设备建模及场景搭建

设备的建模根据 CFETR 排灰处理系统的工程图纸设计, 主要使用了 CATIA、3DMax 进行设备建模, 包括手套箱模型, 管道模型, 配电柜模型, 气体缓冲罐模型等.

根据 CFETR 排灰处理系统的设备布局要求与管道连接准则, 氙工厂的工艺房间设备按照工程项目资料进行设置, 最后对地面与房间的贴图进行细化, 并设置光源使得虚拟环境更加真实.

4.2 排灰处理系统虚拟漫游及用户界面设计

本系统设置第一视角模式进行虚拟漫游. 通过 Unity3D 内置的 Lerp 插值函数使用距离插值方法确保视角的平滑移动.

基于 Unity3D 的图形 UI 界面开发技术, 设置快速切换视角的操作按钮, 实现局部视角和全局视角的实时切换, 辅助场景漫游的操作为用户提供更高效的漫游体验.

本系统给用户提供了多种功能按钮, 包括不同工况运行, 泄漏时刻的氙含量查询, 子部件介绍, 粒子系统仿真的暂停播放等等. 如图 5 为氙正常运输时的场景漫游图.



图5 正常工况下的 TEP 系统三维虚拟场景图

4.3 氙的渗透泄漏扩散仿真

氙的主要物理参数如表 1^[13].

本系统使用计算数据与粒子系统结合的方法进行

扩散模拟与可视化分析, 氙的泄漏扩散仿真结果更贴合实际.

表 1 氙的主要物理参数

物质	密度 (kg/m ³)	绝热指数	摩尔质量 (g/mol)	半衰期 (年)	安全限值 (Bq/m ³)
氙	0.18	1.41	4.024	12.5	2.0×10 ¹⁰

基于氙的扩散原理, 通过 COMSOL 软件仿真计算, 可以得到氙泄漏时手套箱内氙的含量随时间变化的数据, 部分数据如表 2 所示. 数据曲线拟合结果如图 6.

根据上述拟合曲线对粒子系统的参数面板进行曲线的整体设置.

表 2 手套箱内氙含量随时间的变化

时间 (s)	1.7028	42.583	743.567	10355	66915.3	226717	490780	784845	857735	950400
氙含量 (mg)	2.30E-15	8.898E-10	6.86E-5	0.323	5.408	20.082	44.332	71.333	78.026	86.535

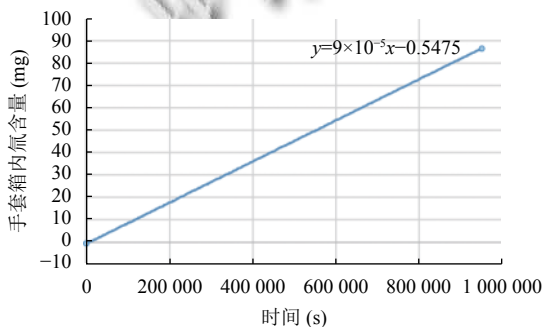


图 6 数据曲线拟合结果

通过 C#脚本编写, 从 txt 文件中读取数据对粒子系统的参数进行逐帧修改并进行仿真, 得到的效果如图 7-图 9 所示.

量不明显; 输运管道与渗透器连接位置的渗透和泄漏较多, 第 1 级净化前的增压泵位置泄漏较明显, 此种泄漏问题多由接口的密封性或材料问题所导致; 手套箱作为第 2 层包容, 其密封边框首先开始发生渗透与泄漏, 同时有少部分气体从工作人员操作位置发生渗透.



图 7 管道 (第 1 层包容) 与渗透器连接处渗透

粒子系统的仿真效果表明, 氙净化与分离系统启用后, 含氙气体依次流经管道、增压泵、渗透器等设备, 其中管道作为第 1 层包容有一定的包容效果, 渗透



图 8 含氙气体充满手套箱 (第 2 层包容)



图 9 含氙气体渗透进入厂房 (第 3 层包容)

图中的可视化数据分析结果表明, 含氙气体从管道 (第 1 层包容) 渗透泄漏到充满手套箱 (第 2 层包

容)大约用时36 s,此时包含渗透器、真空泵在内的设备均被含氚气体覆盖。充满手套箱后,手套箱作为第2层包容开始发挥作用,同时手套箱内部的氚含量持续上升,约50 s后,含氚气体渗透出手套箱,工艺房间(第3层包容)开始出现含氚气体。

上述仿真分析结果总体表明,本系统有效地对氚安全包容系统的包容特性进行了验证,并且通过三维可视化的仿真手段,真实地模拟了排灰处理系统的工作流程、氚的扩散特性、氚输运过程中可能发生大量渗透泄漏的关键位置等。

本系统实现了数据驱动的粒子系统设计,在三维空间上对数据进行了可视化,相比于二维的计算数据,仿真效果更加直观。可以使科研人员更直观地观察到氚安全包容系统的安全特性以及氚含量的空间分布。本系统在空间上三维模拟了氚粒子在氚安全包容系统中的扩散过程,科研人员可以根据氚的扩散情况对排灰处理系统的主要布局进行整体优化设计,包括渗透器的摆放顺序、真空泵及增压泵的布局位置等等;根据可视化仿真的结果,科研人员可以针对氚泄漏严重的位置,如渗透器与管道的接口处、手套箱操作区、手套箱玻璃的密封位置等进行更严格的材料结构设计,可以有效减少氚渗透泄漏的风险,提高氚安全包容系统的安全性。

5 结论与展望

本文通过计算数据驱动粒子系统的方法,结合虚拟漫游以及人机界面的交互技术,以中国聚变工程实验堆CFETR中的排灰处理系统作为案例,对氚输运以及泄漏扩散的过程进行可视化仿真,验证了氚安全包容系统的包容特性,模拟了排灰处理系统中部分高风险位置的氚渗透与泄漏,仿真结果直观,对氚安全包容系统的研究具有重要意义。后续工作考虑加入人物模型,并模拟工作人员在场景中的各种操作。该系统可扩展应用于核电站、舰船等大型设施典型事故中放射性粒子的扩散仿真。

参考文献

- 1 熊亮萍,胡胜,侯京伟,等.等离子体排灰气处理技术研究进展.强激光与粒子束,2015,27(1):016009.[doi:10.11884/HPLPB201527.016009]
- 2 王俊,王晓宇.中国聚变工程实验堆启动氚投料量与氚平衡分析.核聚变与等离子体物理,2020,40(1):34-39.
- 3 刘贵义.TBM氚提取系统事故性氚释放的模拟研究[硕士学位论文].衡阳:南华大学,2017.
- 4 刘贵义,付万发,宋江锋,等.TBM TES手套箱泄漏事故下氚浓度与通风关系研究.核电子学与探测技术,2017,37(2):211-215.[doi:10.3969/j.issn.0258-0934.2017.02.024]
- 5 周小凯,佟立丽.氚在铝合金包壳材料中的扩散行为模拟.强激光与粒子束,2021,30(3):036001.
- 6 Su JY, Zhu JH, Wang WH, et al. Tritium diffusion in a Li_2TiO_3 crystal terminated with the (001) surface from first-principles calculations. Physical Chemistry Chemical Physics, 2020, 22(46): 27206-27213. [doi: 10.1039/D0CP04209A]
- 7 Goswami KN, Murphy ST. Influence of lithium vacancy defects on tritium diffusion in $\beta\text{-Li}_2\text{TiO}_3$. The Journal of Physical Chemistry C, 2020, 124(23): 12286-12294. [doi: 10.1021/acs.jpcc.0c02551]
- 8 Fradera J, Velarde M, Perlado JM, et al. Multiscale integral analysis of tritium leakages in fusion nuclear power plants. Proceedings of the 26th Symposium on Fusion Engineering. Austin: IEEE, 2015. 1-6.
- 9 曹欢,杨子辉,俞盛朋,等.氚扩散虚拟仿真系统原型研发及其应用.计算机系统应用,2019,28(9):118-224.[doi:10.15888/j.cnki.csa.007045]
- 10 吴宜灿,何桃,胡丽琴,等.核与辐射安全仿真系统 SuperMC/RVIS2.3 研发与应用.原子能科学技术,2015,49(S1):7-15.
- 11 陈晓慧,王广军,陶健林,等.基于 Unity3D 的爆炸破片粒子系统的设计与实现.数码设计,2017,6(3):1-3,36.
- 12 贾旭清,田文德,杨越.基于 Unity3D 的化工事故演化场景研究.青岛科技大学学报(自然科学版),2017,38(S1):81-83.
- 13 张红霞.热工基础.2版.北京:机械工业出版社,2015.