

# 一种快堆边界下的裂变气体释放数值模型

廖海龙, 杨广亮, 陈红丽

(中国科学技术大学核科学技术学院, 合肥 230027)

**摘要:** 裂变气体释放(FGR)对燃料元件的热力演化过程有着极其重要的影响,准确地模拟反应堆中裂变气体释放是燃料元件性能分析程序开发的最基本内容之一,也是重要的评价准则。本文围绕快堆边界下的裂变气体释放行为展开详细论述,基于气体原子与气泡行为模型,模拟了晶内气体原子的产生、自由扩散、俘获—再溶解等行为,以及晶内气泡的形成、生长、融合、移动等行为。模拟了晶界气泡的生长、连接、通道形成与气体释放等过程。通过数值方程组离散和迭代计算,建立了一种快堆边界下的裂变气体释放数值模型。经过与理论及实验数据对比,结果显示该模型能准确预测燃料元件的裂变气体释放份额与气体肿胀量,能较好地模拟晶内气泡浓度与尺寸。表明该模型可以用于快堆燃料元件性能分析。

**关键词:** 燃料元件; 快堆; 裂变气体释放; 行为分析; 数值模拟

中图分类号: TL364 文献标识码: A DOI: 10.19907/j.0490-6756.2021.054002

## A numerical fission gas release model in fast reactors

LIAO Hai-Long, YANG Guang-Liang, CHEN Hong-Li

(School of Nuclear Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

**Abstract:** Fission gas release (FGR) has an extremely important influence on the thermo-mechanical behavior of a fuel element. Accurate simulation of FGR in reactors is one of the most basic contents in the development of fuel element performance analysis program, and it is also an important evaluation criterion. In this paper, we discuss the FGR behaviors in fast reactors in detail. The FGR model is based on the equations modeling the behavior of gas atoms and bubbles. The behaviors such as the generation, free diffusion, capture and re-dissolution of gas atoms in the grain are modeled in detail, and the nucleation, growth, coalescence, and migration of bubbles in the grain are simulated. Moreover, the growth, connection, channel formation, and gas release of intergranular bubbles are modeled. We develop a model for FGR calculation, using a method of numerical discrete and iteration calculation. The calculated results are compared with those of experiments and physical theories, which shows very good agreement. Therefore, the model can predict the gas release and swelling in the fuel and the concentration and size of intragranular bubbles, indicating that this model is applicable in a fuel element analysis code.

**Keywords:** Fuel element; Fast reactor; Fission gas release; Behavior analysis; Numerical simulation

收稿日期: 2020-12-08

基金项目: 铅铋快堆燃料棒事故典型模型研究项目(HT-QBJS-05-FW-JT-202001WX03)

作者简介: 廖海龙(1996—), 男, 浙江衢州人, 硕士研究生, 研究领域为燃料元件性能分析。E-mail: lhlsmd@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 陈红丽。E-mail: hlchen1@ustc.edu.cn

# 1 引言

开发燃料元件性能分析程序以模拟燃料元件的辐照-热-力行为,对预测真实反应堆行为及安全设计都有着重要的作用。国内外对水堆边界下的燃料元件性能分析程序已经有了几十年的开发经验,具有比较成熟的技术手段。如美国的 FRATRAN<sup>[1]</sup>系列、欧洲的 TRANSURANUS<sup>[2]</sup>各代版本、日本的 FEMAXI<sup>[3]</sup>系列、中国西安交通大学的 FROBA<sup>[4]</sup>等;但是针对快堆边界下的燃料元件性能分析程序还在发展中,如美国的 LIFE<sup>[5]</sup>系列、德国的 GERMINAL<sup>[6]</sup>、中国原子能科学研究院的 LIFEANLS<sup>[7]</sup>等。由于理论发展受限及实验数据匮乏等原因,它们对快堆内的行为分析都不如水堆成熟,所采取的模型以及算法也需要进一步完善。

裂变气体对反应堆整体的耦合分析起着至关重要的作用。首先,裂变气体降低了燃料芯块与包壳间的热导率,而这会导致芯块温度的提升。同时更高的温度又会引起更多的气体释放,这种正反馈机制给安全设计带来挑战。其次,裂变气体会导致燃料芯块气态肿胀量的增加,而这会加剧芯块-包壳的力学接触效应,从而导致包壳的损伤,进而影响燃料元件寿命。最后,这些带有放射性的气体直接降低了反应堆的安全边界。

由于快堆处在高温、高中子通量的严酷环境当中,相比传统水堆的裂变气体行为有差异,因而开发快堆边界下的裂变气体数值模型具有切实的意义。

本文在调研国内外燃料元件性能分析程序的基础上,结合快堆特有的边界条件,考虑了裂变气体的各种行为,并综合了数值模型的模拟精度,进行了算法优化。总体思路为:对稳态情况下的晶内自由气体原子扩散行为采用等效辐照系数方法<sup>[8]</sup>求得级数解,并与晶内气泡的生长行为结合起来,通过 Newton-Raphson 迭代的方法求解晶内气泡的尺寸与浓度,从而得出裂变气体扩散至晶界的份额;对扩散至晶界的气体进行模拟,考虑晶界气泡的生长、融合过程,模拟气体释放通道建立及气体释放的过程;对瞬态边界下的 FGR 行为也进行了相关的数值模拟。

# 2 理论模型

## 2.1 稳态晶内气体模型

晶内气体<sup>[9-10]</sup>的模拟主要分为两部分,一是对自由气体原子扩散的模拟,一是对晶内气泡形成和

生长过程的模拟。

气体扩散模型:

$$\frac{\partial c_g}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_g r^2 \frac{\partial c_g}{\partial r} \right) + K_g - \frac{\partial c_{gb}}{\partial t} \quad (1)$$

其中,  $c_g$  表示自由气体原子浓度,  $D_g$  为气体原子扩散系数,  $K_g$  是气体产生速率,  $c_{gb}$  为气泡内气体原子浓度。晶内气泡俘获气体原子而生长,同时也受裂变碎片撞击而损毁,稳态下处于一个“俘获-再溶解”的动态平衡状态。

气泡行为模型:

$$\frac{dc_b}{dt} = K c_t - b c_b \quad (2)$$

$$\frac{\partial c_{gb}}{\partial t} = k_b^2 D_g c_g + K c_t - b c_{gb} \quad (3)$$

$$c_t = c_g + c_{gb} \quad (4)$$

其中,  $r_b$  是晶内气泡半径,  $c_b$  是晶内气泡浓度,  $k_b^2 = 4\pi r_b c_b$ ,  $c_t$  表示晶内气泡总浓度,  $K c_t$  是气泡生成速率,  $b$  为再溶解系数,  $b = 2\pi R^2 l F$ ,  $R$  为裂变径迹半径,  $l$  为裂变径迹长度,  $F$  为裂变速率。利用准静态平衡假设,有  $\frac{\partial c_g}{\partial t} = 0$ , 由式(1)和(2)可得到:

$$\frac{\partial c_t}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( D_{eff} r^2 \frac{\partial c_t}{\partial r} \right) + K_g \quad (5)$$

其中,

$$D_{eff} = \frac{b - k}{4\pi D_g c_b c_g r_b + b} D_g \quad (6)$$

在晶粒介观尺度下,忽略  $D_{eff}$  在单个晶粒中随位置的变化,故而在以每个晶粒为计算的单元里,有  $D_{eff} = D_{eff}(t)$ , 式(5)的级数解为:

$$c(r, t) = \frac{K_g}{6 D_{eff}} (a^2 - r^2) + \frac{2 K_g a^3}{\pi^3 r D_{eff}} \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^3} \sin \left( \frac{n\pi r}{a} \right) \exp \left( -\frac{n^2 \pi^2 D_{eff} t}{a^2} \right) \quad (7)$$

从式(6)可以看出,  $D_{eff}(t)$  受气泡尺寸  $r_b$  与浓度  $c_b$  变化的影响,但是目前并没有快堆边界下的经验模型。考虑到稳态条件下晶内气泡内外压强处于一个平衡状态<sup>[11]</sup>, 气泡内压由范德瓦尔斯状态方程给出:

$$P_g(V - n_g \cdot \omega) = n_g k T \quad (8)$$

而气泡外压由表面张力叠加静水压给出,并与内压相平衡:

$$P_g = -\sigma + \frac{2\gamma}{r_b} \quad (9)$$

其中,  $P_g$  为气泡内压,  $\sigma$  是外部静水压,  $\frac{2\gamma}{r_b}$  为气泡表面张力。

$$Ar_b^4 + Br_b^3 + Cr_b^2 + Dr_b + E = 0 \quad (10)$$

采用 Newton-Raphson 迭代的方法, 可快速得到准确的  $r_b, c_b$ , 之后再得出每时间步的  $D_{\text{eff}}$ , 最后根据式(7)求得扩散至晶界的气体浓度, 整体的迭代流程如图 1 所示。

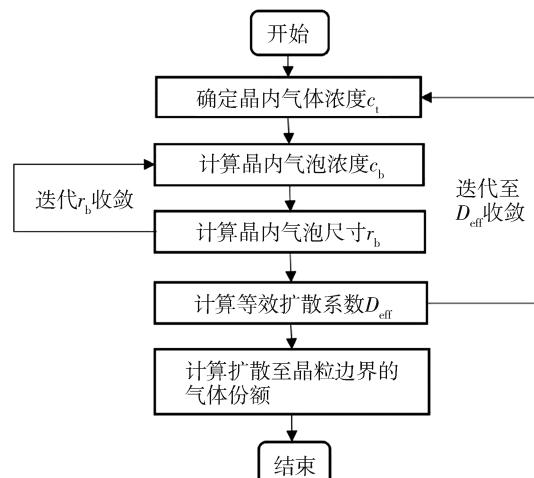


图 1 晶内气体行为模拟流程图

Fig. 1 Flow chart of intragranular gas behavior simulation

## 2.2 稳态晶界气体模型

裂变气体扩散至晶界后, 会滞留在晶界气泡中<sup>[12]</sup>, 引起晶界气体肿胀。随着时间的推移, 晶界气泡逐渐生长, 晶面气泡相互融合, 最终与晶棱气泡相连接; 晶棱气泡同时生长, 逐步形成气体释放通道。

这些晶界气泡并不呈球形, 晶面气泡呈透镜状, 晶棱气泡呈雪茄烟状<sup>[13]</sup>。晶面及晶棱的几何尺寸为:

$$\begin{aligned} K_e &= \frac{1}{r_e} - 11 \frac{S_e}{a_r} \\ S_e &= 0.510 \left( \frac{r_e}{a} \right)^2 - 0.161 \left( \frac{r_e}{a} \right)^3 \\ S_f &= 1.180 \left( \frac{e}{s} \right)^2 \left( \frac{r_f}{a \sin \theta} \right)^3 \end{aligned} \quad (11)$$

其中,  $a_r$  为晶粒半径,  $K_e$  是晶棱气泡的曲率,  $S_f, S_e$  分别为晶面和晶棱肿胀。

晶界气泡吸收气体原子导致气泡化学势改变, 气泡在非平衡化学势的驱动下吸收空穴而生长。

$$\begin{aligned} \text{化学势: } \mu_f &= \Omega \left( \frac{2\gamma}{d \sin \theta} - p_f + \sigma \right) \\ u_e &= \Omega (K_e \gamma - p_e + \sigma) \end{aligned} \quad (12)$$

晶界气泡生长模型<sup>[14]</sup>:

$$\frac{dn_f}{dt} = (1-F)(1-X) \frac{dn_b}{dt} - \frac{(n_f - n_{fl})}{(1-F)} \frac{dF}{dt} + \frac{n_f dA_f}{A_f dt} \quad (13)$$

$$\frac{dn_e}{dt} = (1-E) \left( [F(1-X) + X] \frac{dn_b}{dt} + \frac{n_f - n_{el}}{1-F} \frac{dF}{dt} - \frac{n_e - n_{el}}{A_f} \frac{dE}{dt} \right) \quad (14)$$

其中,  $n_f, n_e$  分别是晶面与晶棱气泡体积浓度,  $n_b$  是扩散至晶界的气体浓度,  $n_{fl}$  和  $n_{el}$  分别是完全联通后的体积浓度,  $F$  是所有融合的晶面气泡份额,  $E$  是晶棱气泡与气腔的联通份额,  $X$  是扩散至晶棱气泡中的气体份额,  $A_f$  是每个晶粒可产生晶面气泡区域的面积。

随着晶面气泡的生长, 晶面气泡相互融合, 逐渐与晶棱气泡连接, 晶棱气泡同时生长, 促使气体释放通道的形成, 裂变气体通过通道释放至空腔。

以每个晶粒为计算单元, 对内迭代采用显示算法, 外迭代采用隐式算法, 整体的晶界气体行为迭代过程如流程图 2 所示。

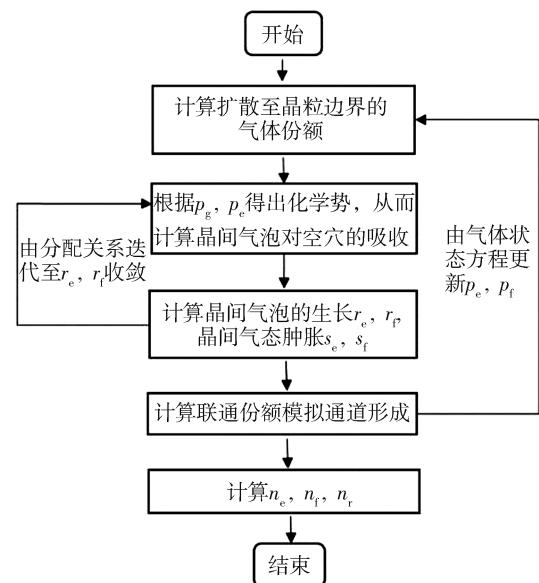


图 2 晶界气体行为模拟流程图

Fig. 2 Flow chart of intragranular gas behavior simulation

## 2.3 高温下气体模型

在高温区( $>1800$  K), FGR 份额非常高(接近于 100%), 而这一区域是快堆燃料芯块重结构晶区。该区域内, 除了在裂变径迹处产生小的气泡之外, 还会在位错处不均匀地产生气泡<sup>[15]</sup>, 这些在位错处产生的气泡吸收气体原子生长, 达到临界的尺寸之后, 在温度梯度的作用下向晶界移动<sup>[16]</sup>。

气泡的移动速率为:

$$v_b = \frac{2\beta\delta_s D_s Q_s \nabla T}{40 \times 10^{-9} R T^2} \quad (15)$$

由大气泡移动而额外释放至晶界的气体速率:

$$\frac{dG}{dt} = 4\pi D'_g R_c c_t c_b f(v_b) \quad (16)$$

式中,  $b$  为再溶解系数,  $a$  是晶粒半径,  $\delta_s$  为扩散层厚度,  $D_s$  是表面扩散系数,  $Q_s$  为表面扩散传输热量,  $\nabla T$  为温度梯度,  $R$  为理想气体常数,  $c_b$  表示位错气泡产生的特征浓度, 取  $10^{18}/\text{m}^3$ ,  $\beta$  取 1.5.

## 2.4 瞬态气体模型

瞬态工况下, 晶内气泡不断俘获气体原子而生长, 或与其他气泡融合<sup>[17]</sup>而长大.

瞬态气泡生长模型:

$$\frac{dr_b}{dt} = \frac{D_u p^{\text{ex}} \Omega}{r_b k T \left[ 1 + \frac{a (\pi r_b c_b)^{0.5}}{3} \right]} - \frac{r_b \frac{dc_b}{dt}}{3 c_b} - \frac{\nu \Omega \frac{dc_b}{dt}}{4 \pi r_b^2 c_b} \quad (17)$$

其中,  $D_u$  是阳离子自扩散系数,  $p^{\text{ex}}$  是气泡内外压差,  $\Omega$  是原子体积,  $\nu$  是常数.

这些生长之后的气泡在温度梯度的作用下向晶界移动, 移动速率为:

$$v_b = \frac{2\beta \delta_s D_s Q_s \nabla T}{r_b R T^2} \quad (18)$$

最终这些气泡携带气体原子扩散至边界, 由此得出裂变气体的释放份额:

$$f(t) = 1 - h^2(t) \frac{3a - h(t)}{2a^3} \quad (19)$$

其中,  $\frac{dh(t)}{dt} = -v_b$

## 3 模型验证

KMC-FUEL<sup>[18]</sup>是中国科学技术大学自主研发的一款快堆燃料元件性能分析程序. 将上述 FGR 数值模型整合到 KMC-FUEL 当中去, 并将 KMC\_FUEL 的计算值与实验值及其他模型的计算结果进行对比.

### 3.1 稳态模型验证

采用 Baker<sup>[11]</sup>的观测结果及 OGRES<sup>[11,13,15]</sup>的计算结果作为验证. Baker 利用透射式扫描电子显微镜直接观测辐照后的燃料切片, 其结果被广泛应用于 FGR 验证. OGRES 模型是欧洲提出的快堆裂变气体行为模型, 在国际上具有相对成熟的验证与应用经验.

稳态时的各项参数如表 1 所示, 算例中的温度、辐照等条件均为典型的快堆边界条件. 稳态时对晶粒尺寸的模拟采用分段线性的手段<sup>[14]</sup>.

表 1 稳态算例参数表

Tab. 1 Parameters and physical properties used in the steady state calculations

| 参数      | 数值   |
|---------|--|
| 范德瓦尔斯常数 | $\beta = 8.5 \times 10^{-29} \text{ m}^3$  |
| 额定功率    | $R = 3 \times 10^5 \text{ W/kg}$   |
| 裂变率     | $F = 3.28 \times 10^{14} R \text{ fission/m}^3$  |
| 气体扩散系数  | $D_g = D_i + D_t$<br>$D_i = 3.0 \times 10^{-25} R \text{ m}^2/\text{s}$<br>$D_t = 7 \times 10^{-7} \exp\left(-4.528 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ m}^2/\text{s}$ |
| 气体生成率   | $K_g = 0.25 F \text{ atoms/m}^3 \cdot \text{s}$  |
| 空位团数目   | $N = 10^{25} \text{ m}^{-3}$   |
| 俘获系数    | $\alpha = 4 \times 10^{-9} \text{ m}$  |
| 裂变径迹长度  | 6 $\mu\text{m}$  |
| 裂变径迹半径  | 6 nm   |

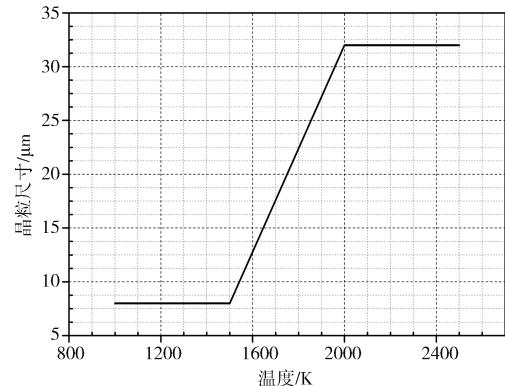


图 3 晶粒尺寸随温度条件的变化图  
Fig. 3 Grain size as a function of temperature

3.1.1 稳态晶内模型验证 稳态晶内模型的验证包括了晶内气泡浓度以及气泡尺寸的验证. 图 4~图 6 是不同燃耗和温度条件下晶内气泡浓度的计算值与 OGRES 模型计算结果的比较.

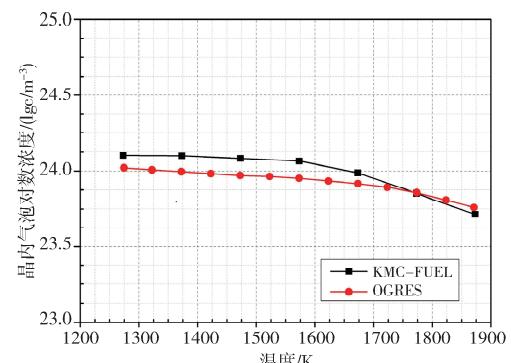


图 4 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶内气泡浓度的计算值随温度变化图, 燃耗达 1. at%  
Fig. 4 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intragranular bubble concentration as a function of temperature

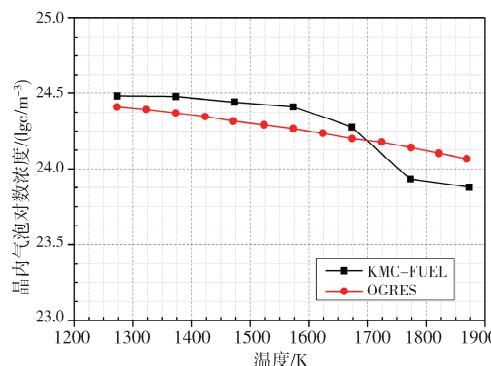


图 5 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶内气泡浓度的计算值随温度变化图, 燃耗达 3 at%

Fig. 5 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intragranular bubble concentration as a function of temperature

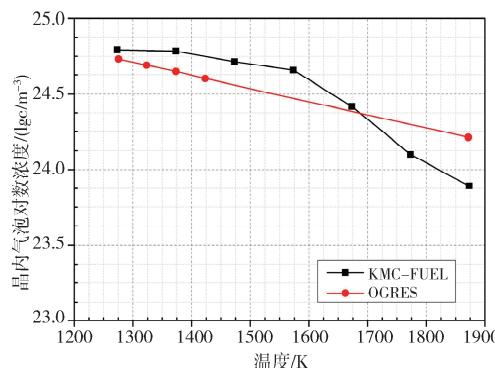


图 6 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶内气泡浓度的计算值随温度变化图, 燃耗达 10 at%

Fig. 6 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intragranular bubble concentration as a function of temperature

从图 4~图 6 可以看出, 随着温度的升高, 晶内气泡浓度呈下降趋势。在各温度条件及不同燃耗状态下, KMC-FUEL 和 OGRES 对晶内气泡浓度的计算结果趋势一致, 数据符合得较好。

图 7 是对晶内气泡尺寸的计算结果与 Baker 的电子显微镜观测值的比较。从图 7 可以看出, 晶内气泡尺寸的计算结果与实验测得结果在趋势上保持一致, 在快堆燃料芯块运行温度下的计算值与实验值符合得较好。

但是在低温区域, 计算值低于实验值, 这是由于对低温区的晶粒尺寸的模拟采用了分段线性手段, 因而无法详细地描述晶粒在各个温区的特征尺寸。对晶粒尺寸更为精细的模拟需要通过重结构晶区的晶粒生长模型来进一步研究。

**3.1.2 稳态晶界模型验证** 稳态下晶界模型的验证是通过晶界肿胀量来实现的, 燃料晶界肿胀行为直接反映了气体在晶界的滞留量。由于目前尚未有直接对晶界肿胀量的实验值, 故而选择将晶面、晶

棱肿胀量的计算结果与 OGRES 模拟结果比较。

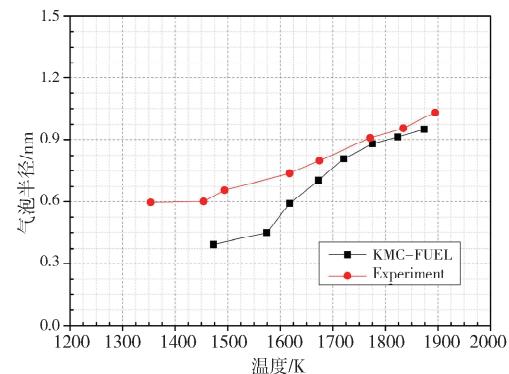


图 7 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶内气泡尺寸计算值随温度变化图, 燃耗达 1 at%

Fig. 7 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intragranular bubble size as a function of temperature

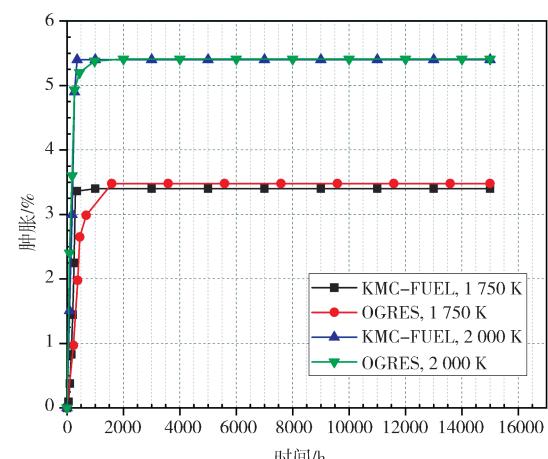


图 8 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶面肿胀量的计算值随时间变化图

Fig. 8 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intergranular face swelling as a function of time

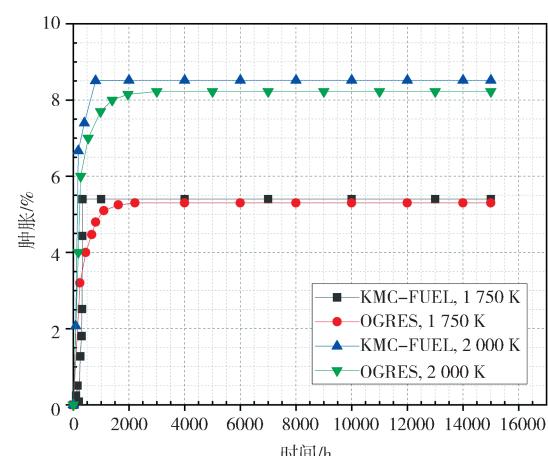


图 9 KMC-FUEL 和 OGRES 对晶棱肿胀量的计算值随时间变化图

Fig. 9 Comparation of KMC-FUEL and OGRES results of intergranular edge swelling as a function of time

从图 8 和图 9 中可以看出, KMC-FUEL 和 OGRES 的计算结果在趋势及最终数值上保持一致。晶面与晶棱肿胀量都在辐照前期快速增长, 这反映了晶面、晶棱气泡的生长过程; 之后肿胀量达到一个稳定值, 表明此时晶界气泡已完全联通, 气体释放通道形成。扩散至晶界的气体不再滞留, 气体释放至空腔。

将固体肿胀量的影响考虑进来有:

$$\frac{dS_{cs}}{dt} = 5.55 \times 10^{-15} R - 2 \times 10^{-4} \exp\left(-\frac{12280}{T}\right) S_{cs}.$$

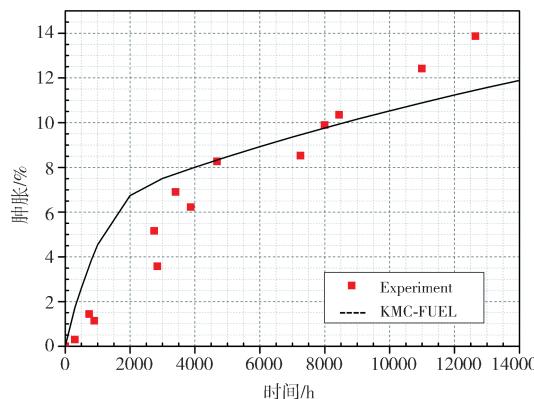


图 10 KMC-FUEL 对总肿胀量的计算结果随时间变化与实验值的比较图, 温度为 1 350 K

Fig. 10 Comparation of KMC-FUEL and experiment results of total swelling as a function of time at 1 350 K

图 10 是考虑了固态肿胀之后整体肿胀量的计算结果与实验值<sup>[14]</sup>的比较。

从图 10 可以看出, 在考虑了固态肿胀量之后, KMC-FUEL 对整体肿胀量的计算结果和实验值基本符合。

3.1.3 稳态整体 FGR 模型验证 图 11 和图 12 分别是 1 750 K 和 1 500 K 条件下对 FGR 的计算结果与 FEAST 模拟值<sup>[14]</sup>, OGRES 模拟值以及实验值<sup>[14]</sup>的比较。

从图 11 和图 12 中可以看出, 在整个稳态运行过程中, KMC-FUEL 对 FGR 的计算结果与实验结果以及 FEAST、OGRES 模拟值在趋势上完全一致, 并且在具体数值上与实验值也相差不大。

3.1.4 高温 FGR 模型验证 表 2 是对高温区 FGR 的模拟结果与 OGRES 模型计算值的比较, 包括了涵盖高温气泡移动模型的 KMC-FUEL 计算值与不含高温模型的 KMC-FUEL 计算值。

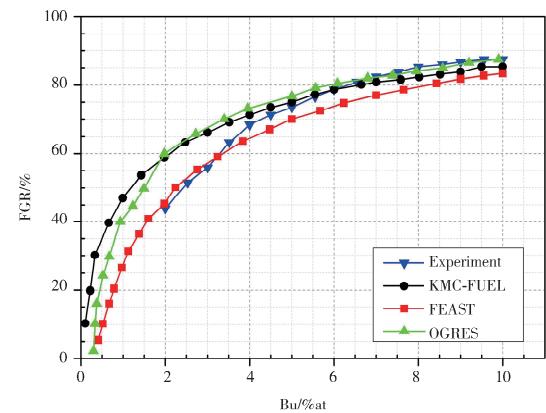


图 11 KMC-FUEL 对 FGR 的计算结果与实验结果随燃耗变化比较图, 温度为 1750 K

Fig. 11 Comparation of KMC-FUEL and experiment results of FGR as a function of burnup at 1 750 K

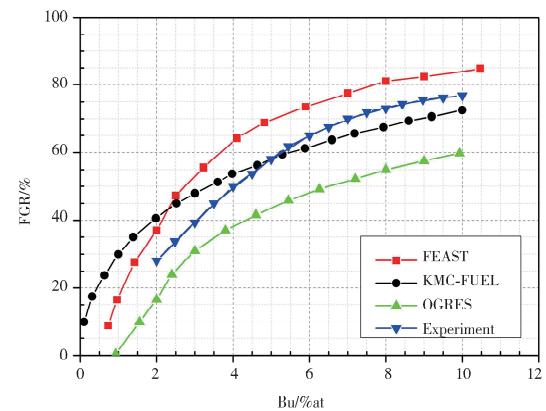


图 12 KMC-FUEL 对 FGR 的计算值与实验结果随燃耗变化图, 温度为 1 500 K

Fig. 12 Comparation of KMC-FUEL and experiment results of FGR as a function of burnup at 1 500 K

表 2 高温下 FGR 计算结果(2.8 at%)

Tab. 2 Calculated results of FGR at high temperature irradiated to 2.8 at% burnup

| 温度/K     | 无高温模型的 KMC-FUEL 模拟值/% | 有高温模型的 KMC-FUEL 模拟值/% | OGRES 模拟值/% |
|----------|-----------------------|-----------------------|-------------|
| 2 088.15 | 51                    | 79.1                  | 75          |
| 2 203.15 | 53                    | 90.6                  | 92          |
| 2 253.15 | 54                    | 93.4                  | 93          |

从表 2 中可以看出, 在高温条件下, OGRES 模型与 KMC-FUEL 对 FGR 的模拟值都很大, 而这与重结构晶区气体大量释放的实验观测现象相吻合<sup>[19]</sup>。

### 3.2 瞬态模型验证

本文将瞬态运行结果与 FGR 系列的实验结果及欧洲 NEFIG<sup>[20]</sup>模型的模拟值相比较。FGR 系列实验是美国针对快堆辐照条件下的裂变气体行

为所开展的一系列实验, 已被国际上的各燃料性能分析程序的 FGR 模块选作验证依据。NEFIG 是欧洲发展的事故条件下裂变气体行为模型, 并且已经应用于快堆分析程序。瞬态情况下的输入参数如表 3 所示。

表 3 瞬态算例参数表

Tab. 3 Parameters and physical properties used in the transient calculation

| 参数       | 数值   |
|----------|--|
| 初始气泡浓度   | $2 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$  |
| 原子体积     | $4.09 \times 10^{-29} \text{ m}^3$   |
| 阳离子自扩散系数 | $2 \times 10^{-4} \exp\left(-5.565 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$   |
| 气体原子扩散系数 | $3.9 \times 10^{-4} \exp\left(-4.528 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ |
| 表面扩散系数   | $2 \exp\left(-4.528 \times \frac{10^4}{T}\right) \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$                  |
| 扩散层厚度    | 0.34 nm  |
| 表面扩散传输热  | 0.42 MJ/mole   |
| 融合参数     | $2\pi$   |
| 表面能      | 1.0 J·m <sup>-2</sup>  |

其中, FGR-9 的温度边界条件如图 13 所示。KMC-FUEL 瞬态下 FGR 计算结果与实验结果随时间变化见图 14。

FGR-15 算例的温度边界条件如图 15 所示, 计算结果见图 16。

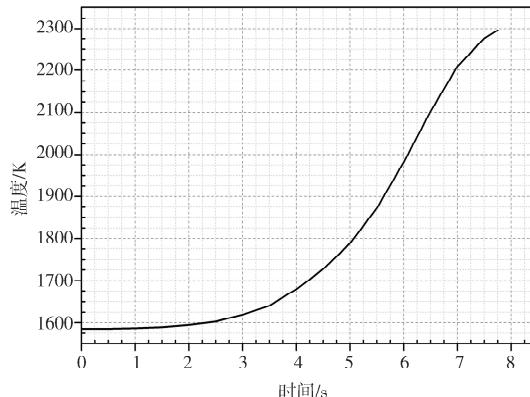


图 13 瞬态算例 FGR-9 的温度边界条件

Fig. 13 Temperature conditions of transient case FGR-9

从图 15 和图 16 中可以看出, 瞬态条件下, 随着温度条件的快速变化, 裂变气体快速释放, 且略微落后于温度的变化。同时, KMC-FUEL 对瞬态情况下 FGR 的计算结果与实验结果在整体变化趋势上保持一致, 并在最终的气体释放量计算上也相匹配。但是, 在瞬态过程中, KMC-FUEL 与 NEFIG 模型的计算值皆落后于实验结果。考虑到瞬态初

始时, 晶界气体滞留量约 5%~10%, 若将这部分滞留气体的释放进程考虑进来, 则与计算的结果相匹配。

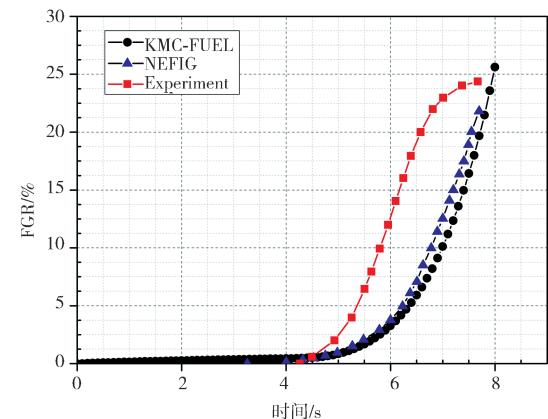


图 14 KMC-FUEL 瞬态下 FGR 计算结果与实验结果随时间变化比较图

Fig. 14 Comparation of KMC-FUEL and experiment results of FGR in transient as a function of time

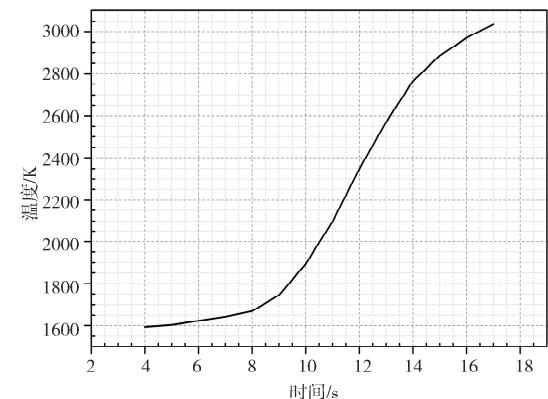


图 15 瞬态算例 FGR-15 温度边界条件

Fig. 15 Temperature conditions of transient case FGR-15

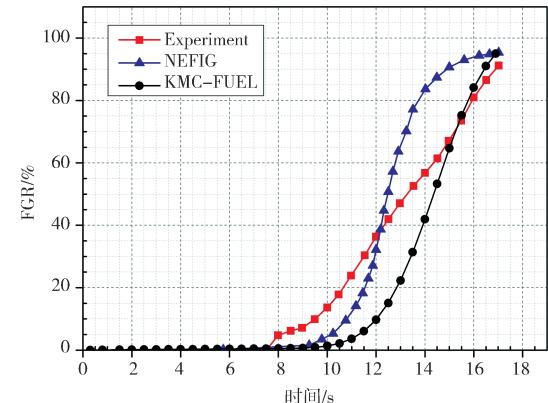


图 16 KMC-FUEL 瞬态下 FGR 的计算结果与实验结果随时间变化比较图

Fig. 16 Comparation of KMC-FUEL and experiment results of FGR in transient as a function of time

## 4 结 论

本文就快堆边界下的 FGR 行为进行了数值模拟并开展了相关验证工作。该数值模型主要分为：稳态晶内气体行为模型，稳态晶界气体行为模型，高温 FGR 模型以及瞬态 FGR 模型。该数值模型的验证包含了晶内气泡浓度与尺寸、晶界各肿胀量、稳态整体 FGR、高温 FGR、瞬态 FGR 等多方面的验证。具体结论如下。

快堆边界下：晶内气泡浓度更高，气泡尺寸更小。在辐照过程中，随着燃耗增加， $D_{\text{eff}}$  变化很大，可达  $10^{-2}$  量级，而  $D_{\text{eff}}$  与晶内气泡半径、浓度相关。晶界气体肿胀量是气态肿胀的主要贡献部分，晶棱肿胀与晶界肿胀量相当。重结构晶区气体大量释放，气体主要滞留在低温区。事故瞬态下的 FGR 机制主要是晶内气泡在温度梯度作用下移动至晶界。该 FGR 数值模型可应用于快堆燃料元件性能分析程序的整体耦合计算。

## 参考文献：

- [1] Yadav A K, Shin C H, Lee C, *et al.* Experimental investigations on out-of-pile single rod test using fuel simulator and assessment of FRAPTRAN 2.0 ballooning model [J]. Ann Nucl Energy, 2019, 124: 234.
- [2] Suikkanen H, Rintala V, Schubert A, *et al.* Development of coupled neutronics and fuel performance analysis capabilities between Serpent and TRAN-SURANUS [J]. Nucl Eng Des, 2020, 359: 110450.
- [3] Okawa T, Tatewaki I, Ishizu T, *et al.* Fuel behavior analysis code FEMAXI-FBR development and validation for core disruptive accident [J]. Prog Nucl Energy, 2015, 82: 80.
- [4] Liao H, Wu Z, Liu L, *et al.* Modification and update of FROBA-ROD code and its applications in fuel rod behavior analysis for PWRs [J]. Ann Nucl Energy, 2019, 133: 900.
- [5] Unal C, Williams B J, Yacout A, *et al.* Application of advanced validation concepts to oxide fuel performance codes: LIFE-4 fast-reactor and FRAPCON thermal-reactor fuel performance codes [J]. Nucl Eng Des, 2013, 263: 102.
- [6] Lainet M, Michel B, Dumas J C, *et al.* GERMI-NAL, a fuel performance code of the PLEIADES platform to simulate the in-pile behaviour of mixed oxide fuel pins for sodium-cooled fast reactors [J]. J Nucl Mater, 2018, 516: 30.
- [7] 谢光善, 张汝娴. 快中子堆燃料元件 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2007.
- [8] Lassmann K, Benk H. Numerical algorithms for intragranular fission gas release [J]. J Nucl Mater, 2000, 280: 127.
- [9] Georgenthum V, Moal A, Marchand O. SCANAIR: a transient fuel performance code: Part one: General modelling description [J]. Nucl Eng Des, 2014, 280: 150.
- [10] Georgenthum V, Moal A, Marchand O. SCANAIR a transient fuel performance code: Part two: Assessment of modelling capabilities [J]. Nucl Eng Des, 2014, 280: 172.
- [11] Wood M H, Matthews J R. A simple operational gas release and swelling model: I. Intragranular gas [J]. J Nucl Mater, 1980, 91: 35.
- [12] Pizzocri D, Barani T, Luzzi L. SCANTIX: a new open source multi-scale code for fission gas behaviour modelling designed for nuclear fuel performance codes [J]. J Nucl Mater, 2020, 532: 152042.
- [13] Matthews J R, Wood M H. A simple operational gas release and swelling model: II. Grain boundary gas [J]. J Nucl Mater, 1980, 91: 241.
- [14] Karahan A, Buongiorno J. Modeling of thermo-mechanical and irradiation behavior of metallic and oxide fuels for sodium fast reactors [J]. J Nucl Mater, 2010, 396: 272.
- [15] Wood M H, Matthews J R. A model of fission gas release at high temperatures [J]. J Nucl Mater, 1981, 102: 223.
- [16] Verma L, Noirot L, Maugis P. Modelling intra-granular bubble movement and fission gas release during post-irradiation annealing of  $\text{UO}_2$  using a meso-scale and spatialized approach [J]. J Nucl Mater, 2020, 528: 151874.
- [17] Barani T, Pastore G, Magni A, *et al.* Modeling intra-granular fission gas bubble evolution and coarsening in uranium dioxide during in-pile transients [J]. J Nucl Mater, 2020, 538: 152195.
- [18] 齐飞鹏. 液态金属冷却快堆燃料元件的性能分析程序开发及应用 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2018.

- [19] Rest J, Cooper M W D, Spino J, *et al.* Fission gas release from UO<sub>2</sub> nuclear fuel: A review [J]. *J Nucl Mater*, 2018, 513: 310.
- [20] Matthews J R, Wood M H. Modelling the transient behaviour of fission gas [J]. *J Nucl Mater*, 1979, 84: 125.

引用本文格式:

中 文: 廖海龙, 杨广亮, 陈红丽. 一种快堆边界下的裂变气体释放数值模型[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 054002.

英 文: Liao H L, Yang G L, Chen H L. A numerical fission gas release model in fast reactors [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2021, 58: 054002.