

燃料棒性能分析软件JASMINE中裂变气体释放模型的评估

朱亚楠, 卫小艳, 张 明

中广核研究院有限公司, 广东 深圳

收稿日期: 2023年3月9日; 录用日期: 2023年3月30日; 发布日期: 2023年4月27日

摘 要

裂变气体释放是燃料棒堆内安全运行必须考虑的关键行为。为了准确预测燃料棒中裂变气体释放行为, 基于燃料棒性能分析软件JASMINE, 集成了经典的Forsberg-Masih模型, 并开发了两阶段裂变气体释放模型JASGAS, 考虑晶界气泡重溶效应的影响, 释放前后阶段的晶粒内部和晶界气体浓度变化。利用核燃料试验项目测量数据对模型进行评估, 验证了模型的有效性。结果表明: 在稳态工况下, JASGAS裂变气体释放模型预测较为准确, 偏差较小; 瞬态工况下, 预测稍有偏低。

关键词

裂变气体释放, 燃料棒, JASMINE

Assessment of Fission Gas Release Model in Fuel Rod Performance Analysis Code JASMINE

Yanan Zhu, Xiaoyan Wei, Ming Zhang

China Nuclear Power Technology Research Institute, Shenzhen Guangdong

Received: Mar. 9th, 2023; accepted: Mar. 30th, 2023; published: Apr. 27th, 2023

Abstract

The fission gas release (FGR) is a crucial phenomenon, necessarily taken into account in the in-pile operation of the fuel rod. In order to predict accurately the fission gas release behavior of the fuel rod, based on the fuel rod performance analysis code JASMINE, incorporated the Forsberg-Masih

model, and a two-stage FGR model, named JASGAS, was developed. The JASGAS model considers the grain boundary resolution effect, and the gas concentration variations inside the grain and at the grain boundary before and after the release. Some experimental data from fuel rod test project was used to evaluate the FGR models. The comparison results show that the JASGAS model predicts well under the steady-state conditions, and slightly under-predict under the transient conditions.

Keywords

Fission Gas Release, Fuel Rod, JASMINE

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

裂变气体行为模拟是燃料棒热力分析过程中的重要组成部分[1]。释放到燃料棒自由体积中的裂变气体，将增大燃料棒的内压，并降低芯块-包壳间隙的气体热导率，引起芯块温度升高，从而增大裂变气体释放，进一步加剧燃料棒性能的恶化，形成正反馈效应。因此，裂变气体释放对燃料棒的安全运行影响非常重大。

裂变气体的释放机理主要包括非热释放与热释放。非热释放是基于反冲和击出机制，对气体释放总量贡献不大，不超过1% [2]。热释放包含两个过程：气体原子首先从晶粒内部向晶界处扩散，或在晶内气泡中沉淀。由于重溶效应影响，部分气体原子可能会被裂变碎片从晶界带回到晶内，降低气体扩散；随着气体在晶界聚集、形成气泡，气泡聚合长大；当气泡相互连接时，形成通道，发生释放。

Booth [3]在1957年第一次提出裂变气体的扩散模型，将 UO_2 晶粒假设为球型，认为气体扩散至晶界就立即释放。Speight考虑了晶界气泡的气体重溶、晶内气体被气泡捕获等现象，提出了等效扩散模型[4]。Forsberg和Massih [5] (以下简称为FORMASS模型)将释放过程分为两个阶段：晶粒内气体先扩散至晶界，在晶界上并累积，直至气体浓度超过一定阈值时发生释放。Pastore等[6]提出了机理性模型，将气体释放和肿胀耦合计算，分别对晶粒内部和晶界的气体行为进行模拟，考虑了晶界气泡的演化过程(如长大、聚合、连通等)。由于该模型复杂，考虑的物理现象较多，目前还处于研究阶段。崔羿等[7]考虑晶界气体重溶、晶界气泡生长和联合、气体原子在晶界的扩散，建立了对气体释放和肿胀进行求解的控制方程，并结合有限元方法求解，应用于多尺度燃料元件的辐射-热-力耦合行为分析中。

虽然国内外学者提出了多种模型，但FORMASS模型作为经典、成熟的模型，仍具有广泛的应用经验，如美国西北太平洋国家实验室开发的FRAPCON [8]、爱达荷国家实验室开发的BISON [9]、电力行业协会开发的FALCON [10]等。但一旦达到饱和浓度后，晶界和重溶的气体浓度将全部释放[8]，并未考虑晶界气体原子向晶内的重溶。

在燃料棒性能分析软件JASMINE中，基于Forsberg-Massih算法，考虑晶界重溶效应的影响，建立了两阶段裂变气体释放模型(称为JASGAS模型)，并集成FORMASS模型，同时采用试验数据对这两种模型进行评估。

2. 计算软件

JASMINE是中广核研究院有限公司开发的燃料棒性能分析软件，主要用于分析I、II类工况下燃料

棒的堆内行为。在分析过程中,采用时间离散化和空间离散化相结合的方法。时间离散化是将整体分析时间划分为较细的时间段,认为每个时间段内辐照条件恒定。空间离散化采用准二维空间模型,即在燃料棒的轴向上分段,对每一轴向段进行径向分析,不考虑方位角效应的影响。

软件考虑了燃料棒在反应堆运行过程中的热学、力学、裂变气体释放以及包壳腐蚀吸氢等行为,可分析燃料棒在堆内运行过程中如下性能参数:温度分布,芯块密实、肿胀、重定位应变,包壳应力、应变,包壳腐蚀层厚度、吸氢量,燃料棒内压等。

3. 模型介绍

3.1. FORMASS 模型

在 Booth 模型的基础上,考虑了边界时变条件下的等效球形模型的扩散方程:

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = D(t) \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] c(r,t) + P(t) \quad (1)$$

式中, c 为晶粒内气体浓度, r 为芯块径向位置, t 为时间, D 为扩散系数, P 为裂变气体生成率。

边界条件为:

$$\begin{cases} c(a,t) = b(t)\lambda N(t)/2D(t) \\ c(r,0) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

式中, a 为晶粒半径, N 为晶界气体的面积浓度, b 为重溶概率, λ 为晶界重溶层厚度。

计算推导过程可详见参考文献[5]。

3.2. JASGAS 模型

假设裂变气体生成率在晶粒内一致,且裂变气体扩散系数、裂变气体生成率和晶粒半径均随着时间变化。

采用 Turnbull-Speight 非完美边界条件[4][11],即考虑晶界气体的重溶现象,以及初始条件:

$$\begin{cases} c(a,t) = \alpha(t)c_{gb}(t) \\ c(r,0) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

式中, c_{gb} 为晶界气体浓度, α 为晶界重溶系数,计算公式[11]为:

$$\alpha(t) = b(t)\lambda a/6D(t) \quad (4)$$

对式(1)进行变量替换,令

$$\begin{aligned} x &= r/a \\ \tau &= \int_0^t D(t)/a^2 dt \end{aligned} \quad (5)$$

则有

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(x,\tau)}{\partial \tau} &= \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial}{\partial x} \right] c(x,\tau) + p(\tau) \\ p(\tau) &= P(\tau)/(D(\tau)/a^2) \end{aligned} \quad (6)$$

滞留在晶粒内的气体浓度为:

$$c_{ret}(\tau) = \frac{4\pi \int_0^a c(r, \tau) r^2 dr}{4\pi a^3 / 3} = \alpha(\tau) c_{gb}(\tau) + c_0(\tau) \quad (7)$$

式中, c_0 为晶内气体浓度, τ 为无量纲时间。

通过拉普拉斯变换, 晶粒内的气体浓度为:

$$\begin{aligned} c_0(\tau) &= \int_0^\tau R(\tau - \tau') q(\tau') d\tau' \\ R(\tau) &= \sum_{n=1}^4 A_n \cdot e^{-B_n \tau} \\ q(\tau) &= p(\tau) - \frac{\partial}{\partial \tau} (\alpha(\tau) c_{gb}(\tau)) \end{aligned} \quad (8)$$

式中, R 为响应函数, A_n 和 B_n 是 4 阶矩阵值[12], q 是修正的气体生成浓度。

进一步地有,

$$\begin{aligned} c_0(\tau) &= \sum_n \int_0^\tau A_n e^{-B_n(\tau - \tau')} q(\tau') d\tau' = \sum_n g_n(\tau) \\ g_n(\tau) &= A_n \int_0^\tau e^{-B_n(\tau - \tau')} q(\tau') d\tau' \end{aligned} \quad (9)$$

在 τ_2 时刻, 有

$$g_n(\tau_2) = A_n q \frac{1 - e^{-B_n \delta \tau}}{B_n} + e^{-B_n \delta \tau} g_n(\tau_1) \quad (10)$$

式中, τ_1 为前一时刻, τ_2 为当前时刻, $\delta \tau$ 为时间步长。

将式(10)代入 c_0 的计算公式(9)中, 可得 τ_2 时刻的晶内气体浓度:

$$\begin{aligned} c_0(\tau_2) &= \sum_n g_n(\tau_2) = qJ(\delta \tau) + S(\delta \tau) \\ J(\delta \tau) &= \sum_n A_n \frac{1 - e^{-B_n \delta \tau}}{B_n} \\ S(\delta \tau) &= \sum_n e^{-B_n \delta \tau} g_n(\tau_1) \end{aligned} \quad (11)$$

3.2.1. 释放前阶段

在气体释放前, 考虑晶界气体重溶现象, 质量守恒方程为:

$$(1/2 + \alpha(\tau)) c_{gb}(\tau) + c_0(\tau) = c_{tot}(\tau) \quad (12)$$

式中, c_{tot} 为气体总生成浓度。在 τ_2 时刻, 气体总浓度为:

$$c_{tot}(\tau_2) = \int_0^{\tau_2} p(\tau') d\tau' = p \cdot \delta \tau + [(1/2 + \alpha_p) c_{gb}(\tau_1) + c_0(\tau_1)] \quad (13)$$

式中, 下标 p 表示前一时刻的值。

则在时间步 $[\tau_1, \tau_2]$ 内, 结合式(11)、(12)、(13), 得到晶界气体浓度增量:

$$\begin{aligned} \Delta c_{gb} &= [\delta \tau (p(\delta \tau - J(\delta \tau)) + (c_0(\tau_1) - S(\delta \tau))) + (\alpha_p - \alpha) c_{gb}(\tau_1) (\delta \tau - J(\delta \tau))] / m \\ m &= (J(\delta \tau) + (1 + 2\alpha)(\delta \tau - J(\delta \tau))) / 2 \end{aligned} \quad (14)$$

3.2.2. 释放后阶段

当晶界气体浓度大于饱和浓度时，晶界气泡相连并形成气体释放通道，此时的晶界裂变气体浓度为：

$$\begin{aligned} c_{gb} &= g_{fiss} c_{sat} \\ c_{sat} &= 2f_c \frac{f(\theta) r}{\sin^2 \theta a} \frac{2\gamma/r + P_{ext}}{N_A k_B T} \end{aligned} \quad (15)$$

式中， c_{sat} 为晶界气体饱和浓度[13]； f_c 为常数值； $f(\theta) = 1 - 3/2 \cos \theta + 1/2 \cos^3 \theta$ ， θ 是气泡覆盖晶界角度； γ 为气泡表面能； r 为气泡半径； a 为晶粒半径； P_{ext} 为静水压力； N_A 为阿伏伽德罗常数； k_B 为波尔兹曼常数； T 为气体温度； g_{fiss} 为裂变气体量与总气体量的比值。

由于此时晶界气体发生释放，则根据质量守恒方程，有：

$$c_{rel}(\tau) + \alpha c_{gb}(\tau) + c_0(\tau) = c_{tot}(\tau) \quad (16)$$

式中， c_{rel} 为气体释放浓度。

则在时间步 $[\tau_1, \tau_2]$ 内，气体释放浓度的增量为：

$$\Delta c_{rel} = p(\delta\tau - J(\delta\tau)) + c_{0,p} - S(\delta\tau) + (\alpha_p c_{gb,p} - \alpha c_{gb}) \quad (17)$$

在 τ_2 时刻，裂变气体热释放份额 fgr_{th} 为气体释放浓度与生成浓度的比值，计算公式如下：

$$fgr_{th} = (c_{rel}(\tau_1) + \Delta c_{rel}) / c_{tot}(\tau_2) \quad (18)$$

4. 模型评估

为了评估裂变气体释放模型的准确性，采用试验中裂变气体释放测量值与 JASMINE 软件计算的两种模型的预测值进行对比。所选试验棒的类型均为 UO₂ 燃料棒，共计 65 根棒，包括稳态工况和瞬态工况。

4.1. 评估矩阵

试验数据主要来自于核燃料棒的试验项目，包括：HBEP、BR-3、DR-2、Risoe3、US-PWR 16×16、Super-ramp 等项目，通过在热室中开展穿孔试验获得，或者根据内压传感器测量的内压值评估得到。其中，稳态工况的试验棒有 35 根，瞬态工况的有 30 根。包壳材料主要为 Zr-2、Zr-4 和 M5。表 1 给出了评估矩阵的总体情况。

Table 1. Overview of the assessment matrix

表 1. 矩阵总体情况

试验项目	燃料棒个数	包壳类型	燃料棒燃耗	工况类型
HBEP	4	Zr-4	25-44	稳态、瞬态
BR-3	6	Zr-4	48.6-61.5	稳态
DR-2	3	Zr-2	27-35	稳态
R2	3	Zr-4、M5	60.7-62.8	稳态、瞬态
Oconee	1	Zr-4	50	稳态
Risoe3	13	Zr-4、Zr-2	40.4-41.7	稳态、瞬态
US-PWR 16×16	13	Zr-4	31.2-58.1	稳态
Super-ramp	14	Zr-4	29.1-45.2	稳态
Halden	3	Zr-2	43.5-70	稳态、瞬态
DYB	5	M5	14.1-45.3	稳态

燃料棒的平均功率随平均燃耗的变化见图 1，图中表明裂变气体释放模型的评估算例覆盖了较为广泛的试验数据范围。燃料棒平均燃耗最大达到 $70 \text{ MWd}\cdot\text{kgU}^{-1}$ ，平均线功率密度最大达到 $52.5 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-1}$ 。

4.2. 评估结果

根据计算结果统计，对于稳态工况，采用 JASGAS 模型计算的裂变气体释放份额的预测值与测量值之差 P-M 的平均值(P 为预测值，M 为测量值)为 0.66%，标准差为 1.68%；采用 FORMASS 模型计算的 P-M 均值为-0.2%，标准差为 4.94%。对于瞬态工况，JASGAS 模型的 P-M 均值为-5.69%，标准差为 7.68%；FORMASS 模型的 P-M 均值为-7.7%，标准差为 9.44%。

图 2 给出了稳态工况下裂变气体释放份额的预测值与测量值对比图。由图中结果可知，在稳态工况下，JASGAS 模型的预测值与试验测量值吻合较好，数据点均匀分布在 $P = M$ 直线两侧，偏差较小，预测较为准确；FORMASS 模型预测比测量值略低，个别数据点偏差较大。

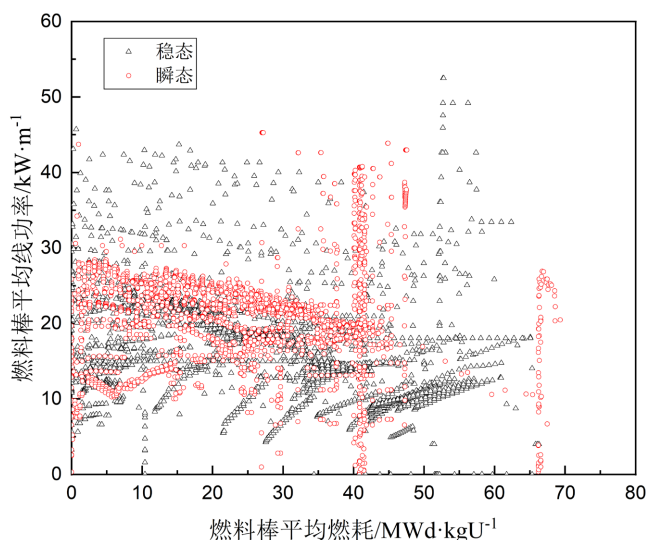


Figure 1. Diagram of the rod average heat rate versus rod average burnup
图 1. 燃料棒平均线功率随平均燃耗变化图

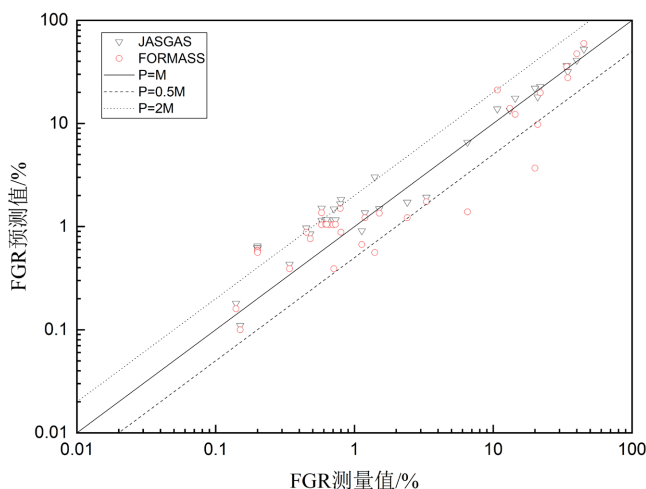


Figure 2. Comparison of predicted FGR and measured FGR under steady-state condition
图 2. 稳态工况裂变气体释放份额预测值与测量值的对比图

图 3 给出了瞬态工况下裂变气体释放份额的预测值与测量值对比图。由图中结果可知，在瞬态工况下，两种模型的预测稍有低估。但相比于 FORMASS 模型，JASGAS 模型预测值更接近于实测值，大多数点位于 $P = 2M$ 和 $P = 0.5M$ 两条直线之间。主要是由于瞬态工况中，JASGAS 模型达到饱和浓度时间较为靠前，释放的能力较强，释放量也越大。

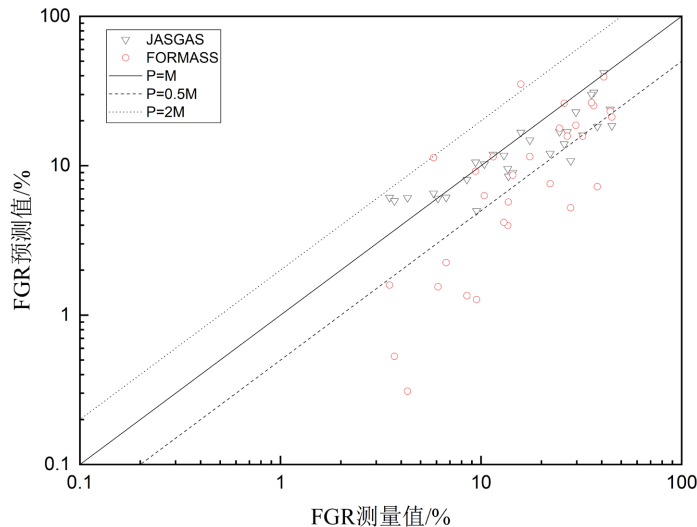


Figure 3. Comparison of predicted FGR and measured FGR under transient condition
图 3. 瞬态工况裂变气体释放份额预测值与测量值的对比图

图 4 给出了 Risoe3 项目中试验棒 AN3 的裂变气体释放份额随时间变化图。AN3 棒主要用于研究瞬态工况下的裂变气体释放行为，由丹麦国家实验室开展。总之，上述两种裂变气体释放模型在稳态工况下表现类似，瞬态工况下 JASGAS 模型预测良好，主要由于两种模型存在一定差异，由图 4 可知，JASGAS 模型的释放起始点与测量值较为接近，且预测比 FORMASS 模型偏高，而 FORMASS 模型释放有所延迟。

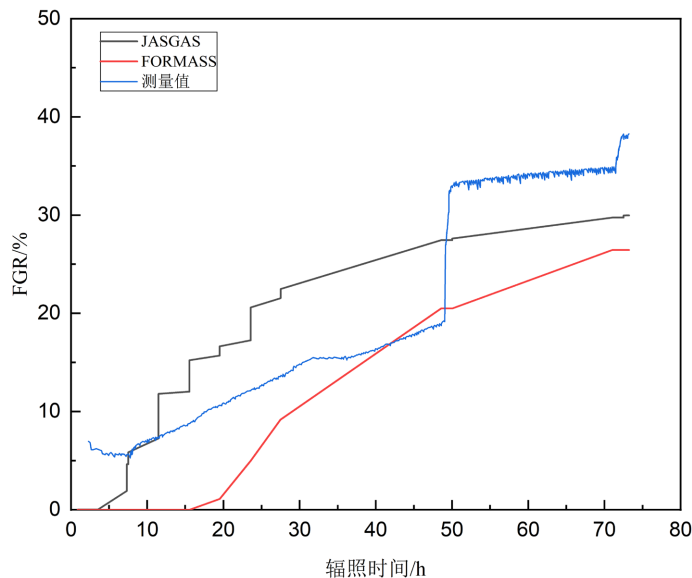


Figure 4. Comparison of predicted FGR and measured FGR with irradiation time of AN3 rod
图 4. AN3 棒裂变气体释放份额预测值与测量值随辐照时间变化的对比图

5. 结论

本文基于燃料棒性能分析软件 JASMINE, 集成了 Forsberg-Massih 模型, 并开发了两阶段裂变气体释放模型 JASGAS。利用试验测量数据对两种模型进行了评估。得出主要结论如下:

对于稳态工况, 两种模型预测较为接近, 但 JASGAS 模型与试验结果吻合较好, 预测更为准确, 可用于燃料棒性能分析中。对于瞬态工况, 两种模型预测有所偏低, 但 JASGAS 模型预测结果稍好。后续需进一步结合试验数据, 优化瞬态释放模型。本文的工作为后续开发自主裂变气体释放模型奠定了基础。

参考文献

- [1] Olander, D.R. (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements. Technical Information Center-Energy Research and Development Administration, University of California, Berkeley. <https://doi.org/10.2172/7343826>
- [2] Losonen, P. (2000) On the Behavior of Intragranular Fission Gas in UO₂ Fuel. *Journal of Nuclear Materials*, **280**, 56-72. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(00\)00028-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00028-3)
- [3] Booth, A.H. (1957) A Method of Calculating Fission Gas Diffusion from UO₂ Fuel and Its Application to the X-2-f Loop Test. Rapport Atomic Energy of Canada Limited CRDC-712.
- [4] Speight, M.V. (1969) A Calculation on the Migration of Fission Gas in Material Exhibiting Precipitation and Re-Solution of Gas Atoms under Irradiation. *Nuclear Science and Engineering*, **37**, 180-185. <https://doi.org/10.13182/NSE69-A20676>
- [5] Forsberg, K. and Massih, A.R. (1985) Diffusion Theory of Fission Gas Migration in Irradiated Nuclear Fuel UO₂. *Journal of Nuclear Materials*, **135**, 140-148. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(85\)90071-6](https://doi.org/10.1016/0022-3115(85)90071-6)
- [6] Pastore, G., Luzzi, L., Di Marcello, V. and Van Uffelen, P. (2013) Physics-Based Modelling of Fission Gas Swelling and Release in UO₂ Applied to Integral Fuel Rod Analysis. *Nuclear Engineering and Design*, **256**, 75-86. <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2012.12.002>
- [7] 崔羿, 丁淑蓉, 赵云妹, 等. 考虑晶界扩散和晶界联合的 UO₂ 燃料裂变气体模型[J]. 核动力工程, 2012(S2): 9-12+42.
- [8] Geelhood, K.J., Luscher, W.G., Beyer, C.E., et al. (2015) FRAPCON-4.0: A Computer Code for the Calculation of Steady-State Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup. Pacific Northwest National Laboratory, United States.
- [9] Hales, J.D., Williamson, R.L., Novascone, S.R., et al. (2016) BISON Theory Manual, the Equations Behind Nuclear Fuel Analysis. Idaho National Laboratory, United States. <https://doi.org/10.2172/1374503>
- [10] Rashid, Y., Dunham, R. and Montgomery, R. (2004) Fuel Analysis and Licensing Code: FALCON MOD01: Volume 1: Theoretical and Numerical Bases. EPRI, Palo Alto.
- [11] Turnbull, J.A. (1974) The Effect of Grain Size on the Swelling and Gas Release Properties of UO₂ During Irradiation. *Journal of Nuclear Materials*, **50**, 62-68. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(74\)90061-0](https://doi.org/10.1016/0022-3115(74)90061-0)
- [12] Hermansson, P. and Massih, A.R. (2002) An Effective Method for Calculation of Diffusive Flow in Spherical Grain. *Journal of Nuclear Materials*, **304**, 204-211. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00873-5](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00873-5)
- [13] Dowling, D.M., White, R.J. and Tucker, M.O. (1982) The Effect of Irradiation-Induced Re-Solution on Fission Gas Release. *Journal of Nuclear Material*, **110**, 37-46. [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(82\)90405-6](https://doi.org/10.1016/0022-3115(82)90405-6)