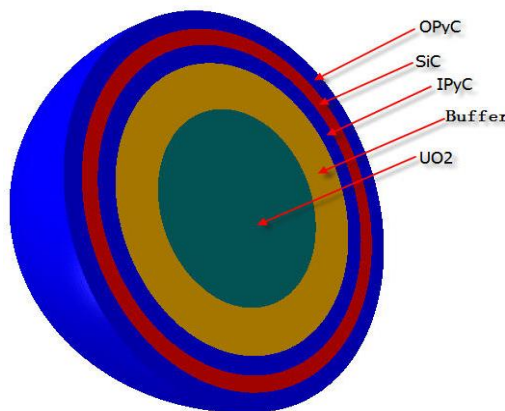
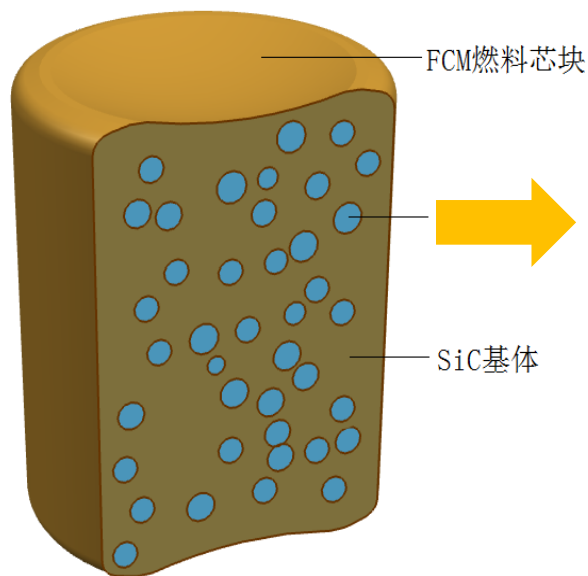


用于TRISO燃料颗粒性能 多物理场耦合分析的 COMSOL模型

李伟

1 背景简介

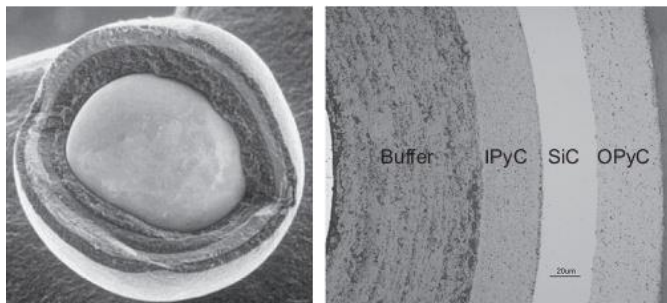
在役高温气冷堆燃料元件的核心部件，同时也是用于轻水堆的全陶瓷微密封（FCM）耐事故燃料（ATF）元件的关键组成部分。



TRISO 燃料颗粒

结构：

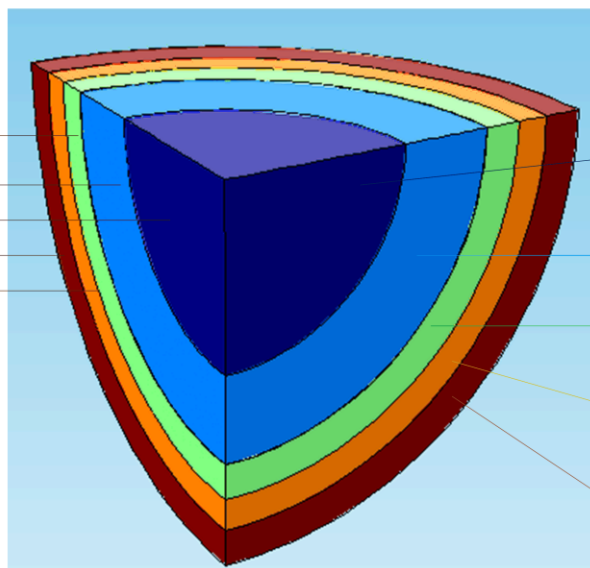
- 燃料核芯
UO₂
- 疏松热解碳层
Buffer层
- 致密热解碳层
IPyC层
OPyC层
- 碳化硅层
SiC层



TRistructure **I**SOtropic
Dense **I**nner **P**yrolytic **C**arbon
Dense **O**uter **P**yrolytic **C**arbon
Porous graphite **b**uffer layer

1 背景简介

球面
 $T=1500^{\circ}\text{C}$
裂变产物浓度 $C=0 \text{ mol/m}^3$



• 各层结构功能：

裂变活性区

吸收裂变碎片，减轻辐照损伤，包容核芯肿胀，容纳裂变气体。

降低SiC层所受拉应力，减轻SiC层侵蚀，阻止裂变产物往外迁移。

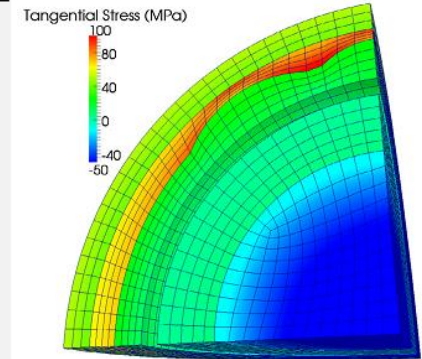
主要承压边界，阻止气、固态裂变产物防止向外部释放和扩散。

与IPyC层类似，还防止在燃料颗粒的生产、装卸和转运等过程中SiC层遭受损坏。

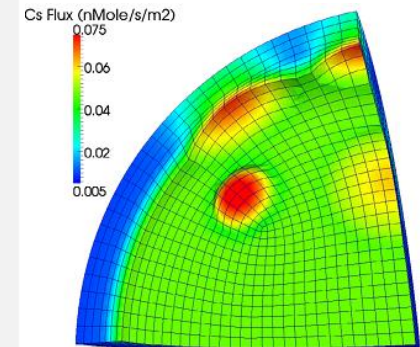
1 背景简介

COMSOL 有限元、多物理场耦合——热/力/扩散

| Code | PARFUME | PASTA | ATLAS | STRESS3 | TIMCOAT | GA/KFA | JAERI |
|---|--|---|--|--|--|--|-------------------------|
| Developer | INL (US) | TU Delft (NL) | CEA (FR) | BNFL/NS (UK) | MIT (US) | GA/KFA (US)/(DE) | JAERI (JP) |
| References | [9,18,45–47] | [44,48,49] | [9,17] | [9,17,50] | [16] | [17,52] | [17,51] |
| Mission | NPR/AGR, NGNP | PUMA (EU) | FBR MOX | None specified | HTRs | Multiple | HTTR |
| Assumed geometry | Pebble bed, prismatic | None | None? | None | Pebble bed, prismatic | None | None |
| Pressure calculation | R-K EOS | R-K EOS | R-K EOS | Unknown | IGL | R-K EOS | IGL |
| CO production method | HSC-based yield | Custom (Nabielek?) | unknown | Martin | Karsten (KFA) | None, LEU, HEU | Proksch |
| Heat transfer calculation | 1D finite difference with buffer/IPyC gap | THERMIX calculation with buffer/IPyC gap | Finite element | Unknown | Full-core then particle | Single irr. temp. used | Single irr. temp. used? |
| Phenomena modeled | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep, thermal expansion, SFP swelling, FP diffusion | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep, Thermal expansion | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep, SFP swelling, GFP swelling | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep, SFP swelling, SiC elasticity | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep | Pressure, PyC IIDC, PyC irr. creep, SFP swelling | Pressure, PyC IIDC |
| Failure mechanisms modeled | PV, IPyC cracking, debonding, asphericity, SiC thinning, SiC thermal decomposition, kernel migration | PV, IPyC cracking | PV, IPyC cracking, debonding, asphericity | PV, IPyC cracking, debonding | PV, IPyC cracking via fracture mechanics | PV | PV |
| PyC shrinkage correlation | Custom | FZJ | Unknown | Custom | Unknown | Unclear | Unknown |
| PyC irr. creep coefficient (MPa n m ⁻²) ⁻¹ | $c = 5 \times 10^{-29}$ $v = 0.5$ or $c = 4 \times 10^{-29}$ $v = 0.4$ | 3.0×10^{-29} | Unknown | 4.9×10^{-29} | CEGA function | 2.0×10^{-29} | Unknown |
| Fission gas release model (s) | Recoil + booth | Modified booth (cyclic situation) | Unknown | Unknown | UT/KFA (booth-based?) | Booth | Booth (single species) |
| Displacement calculations? | Yes | Yes | Yes | Yes | Yes | No | No |



BISON



J.D. Hales et al., Journal of Nuclear Materials 443 (2013) 531–543

J.J. Powers, B.D. Wirth Journal of Nuclear Materials 405 (2010) 74–82

2 材料性能和行为模型

- 控制方程组

能量守恒
$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + E_f \dot{F}$$

动量守恒
$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f} = 0$$

质量守恒
$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot \nabla \left[\sum_m D_{0,m} \exp\left(\frac{-Q_m}{RT}\right) \right] C_i - \lambda_i C_i + S_i$$

采用 COMSOL 多物理场耦合计算平台，
基于有限元方法求解以上控制方程组！

2 材料性能和行为模型

TRISO燃料颗粒的材料物性和行为模型随燃耗、温度、快中子通量等参数的变化具有明显的非线性特点，造成复杂的多物理场非线性耦合问题。

- UO_2 核芯肿胀，密实，热膨胀

$$\dot{V}_{solid} = 5.577 \times 10^{-5} \rho_{UO_2} \frac{dBu}{dt} \quad \dot{V}_{gas} = 1.96 \times 10^{-31} \exp[-0.162(2800 - T)](2800 - T)^{11.73} \exp(-0.0178 \rho_{UO_2} Bu)$$

$$\Delta V_{den} = \Delta \rho_0 \left[\exp\left(\frac{Bu \ln(0.01)}{Bu_D C_D}\right) - 1 \right] * \rho_{UO_2} \frac{dBu}{dt}$$

- PyC层蠕变，辐照变形，热膨胀

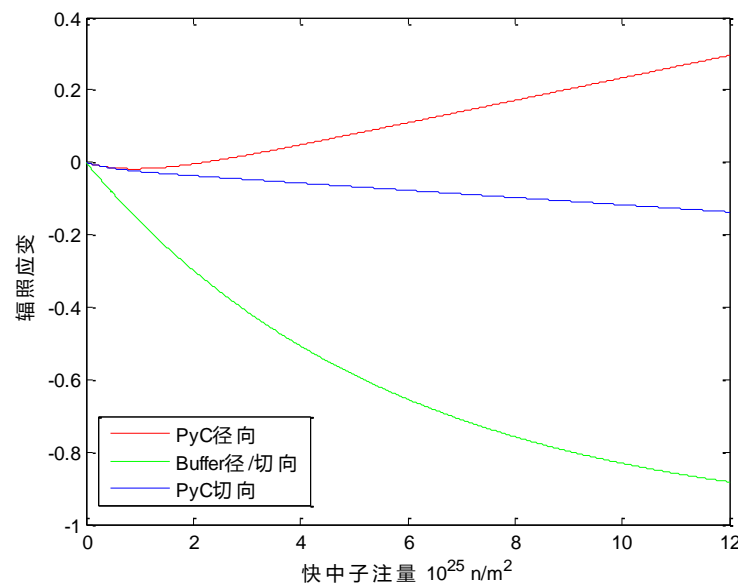
IPyC和OPyC $\dot{\epsilon}_\theta = -0.036 \exp(-2.1\Phi) - 0.01$
 $\dot{\epsilon}_r = -0.077 \exp(-\Phi) + 0.031$

Buffer $\dot{\epsilon}_r = \dot{\epsilon}_\theta = -0.176 \exp(-0.175\Phi)$

$$\dot{\epsilon}_{cr,r} = K_{pyc} [\sigma_r - \nu_c (\sigma_\theta + \sigma_\phi)] \dot{\Phi}$$

- SiC层蠕变，热膨胀

$$\dot{\epsilon}_{cr} = K_{sic} \sigma_e \dot{\Phi}$$



2 材料性能和行为模型

• 裂变气体释放和CO气体产生模型

Booth模型

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C + P_{fg}$$

从晶粒内部向晶界的扩散

$$C_{gbsat} = \frac{4.2746 \times 10^{22}}{TR_g}$$

R_{gb} 为晶粒半径
晶界裂变气体原子饱和浓度值

$$S_{gb} = -\frac{4\pi R_g^2}{\frac{4}{3}\pi R_g^3} D \frac{\partial C}{\partial r} \bigg|_{r=R_g} = -\frac{3}{R_g} D \frac{\partial C}{\partial r} \bigg|_{r=R_g}$$

晶界上的裂变气体原子等效体积源项

超过饱和浓度，
释放裂变气体

Proksch模型

$$\frac{O}{F} = \frac{t^2}{(1.211 \times 10^{10}) 10^{\frac{8500}{T}}}$$

O/F为发生一次裂变所释放的平均氧原子数

• 气隙热导，内压模型，失效概率

(1) 气隙导热系数由两部分组成：气体热导和热辐射

$$h_{gas} = \frac{k_{gas}}{1.5(r_b + r_i) + d_{gap} + g_b + g_i}$$

$$h_r = \frac{\sigma(T_b^2 + T_i^2)(T_b + T_i)}{1 + 1/\epsilon_b + 1/\epsilon_i - 1}$$

(2) 假设能够容纳气体的自由容积包括Buffer层和气隙，采用理想气体状态方程计算燃料颗粒内压。

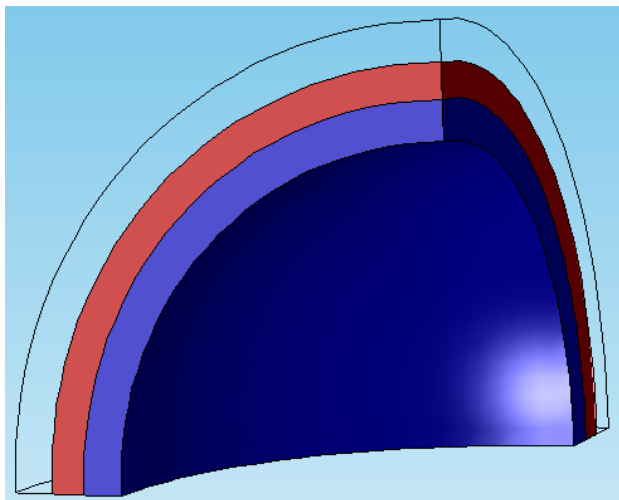
$$P = \frac{n_g R}{\frac{V_b}{T_b} + \frac{V_g}{T_g}}$$

(3) Weibull参数理论计算压力壳式失效破损的概率 $\psi = 1 - \exp(-\ln(2)(\sigma_t / \sigma_0)^w)$

3 模型验证及应用

- IAEA CRP6-case 4a

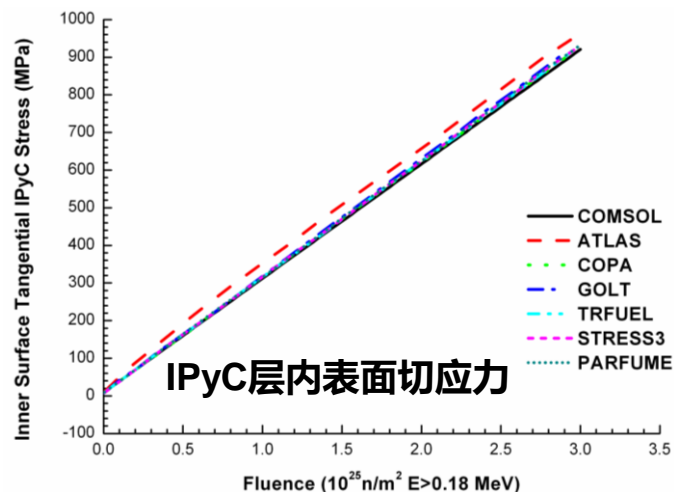
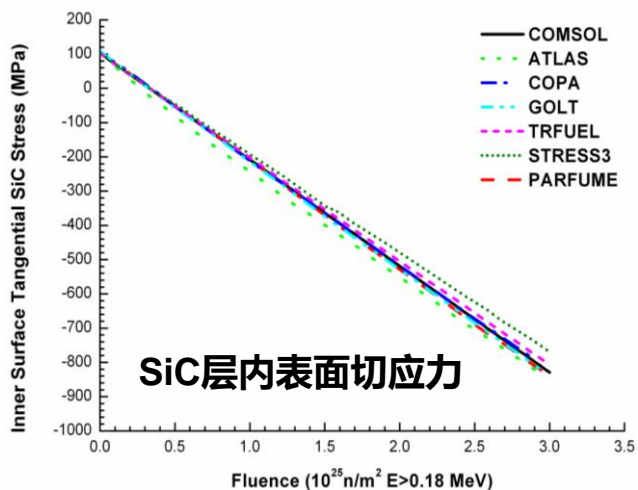
只包含IPyC和SiC层



温度恒定为1273 K，忽略热膨胀和辐照蠕变，仅考虑IPyC层的各向同性辐照变形。对比验证的指标为IPyC和SiC层内表面切应力随快中子注量的变化规律（快中子注量 $\leq 3 \times 10^{25} \text{ n/m}^2$ ）。

初始条件：IPyC层内表面半径为350 μm ，厚度为40 μm ；SiC层内表面半径为390 μm ，厚度为35 μm 。

边界条件：IPyC层内表面承受恒定内压25 MPa，SiC层外表面承压0.1 MPa。



3 模型验证及应用

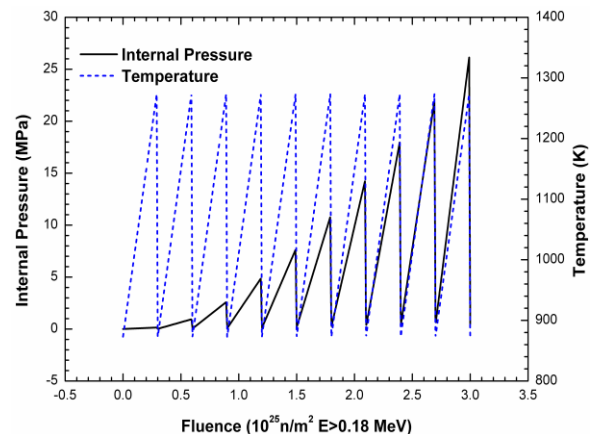
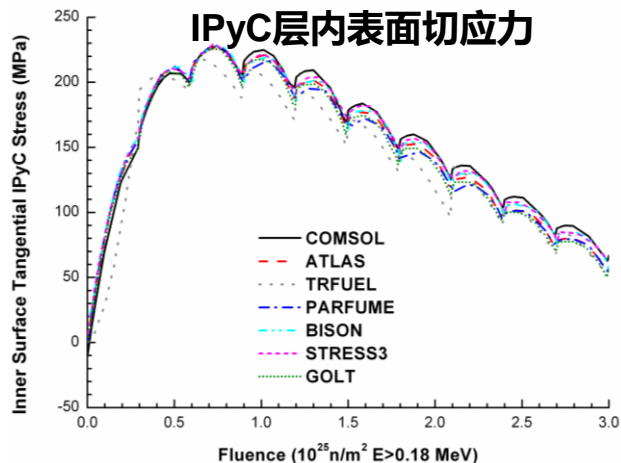
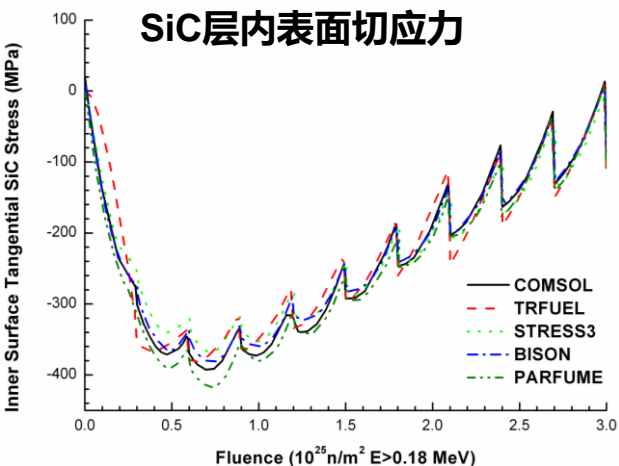
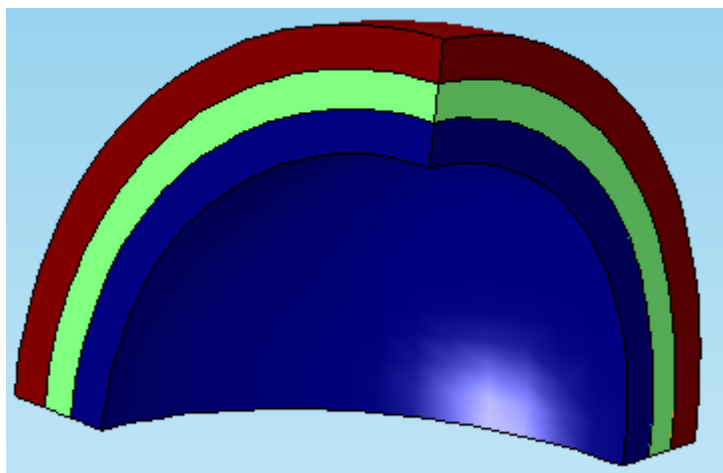
- IAEA CRP6-case 8

包含IPyC，OPyC和SiC层

考虑热膨胀，辐照蠕变，辐照变形。对比验证的指标为IPyC和SiC层内表面切应力随快中子注量的变化规律（快中子注量 $\leq 3 \times 10^{25} \text{ n/m}^2$ ）。

初始条件：IPyC层内表面半径为350 μm ，厚度为40 μm ；
SiC层内表面半径为390 μm ，厚度为35 μm 。

边界条件：IPyC层内表面承受内压和温度变化如下图，SiC层外表面承压0.1 MPa。



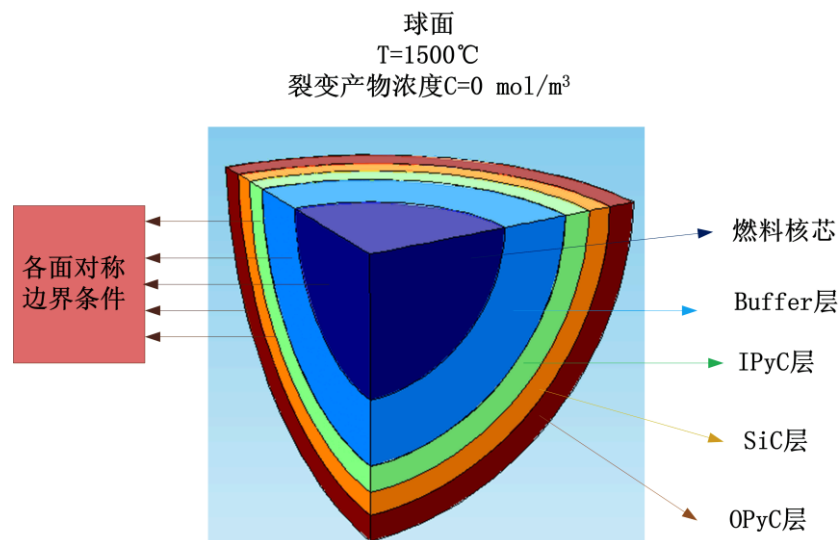
3 模型验证及应用

• TRISO颗粒 高温气冷堆运行参数

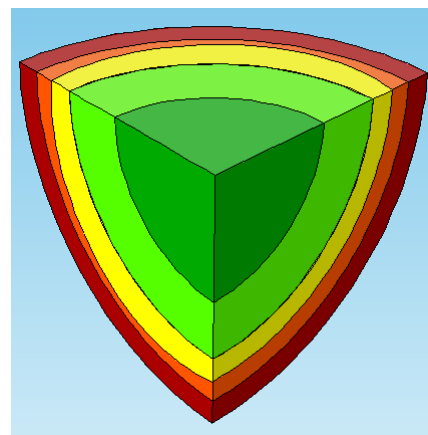
| 参数名称 | 值 |
|----------------------|--|
| 燃料颗粒的热功率 | 50 mW |
| 辐照时间 | 2.5 年 (7.6×10^7 s) |
| 快中子注量率 | 5×10^{17} n/(m ² ·s) |
| 最高燃耗 | 12% FIMA |
| UO ₂ 核芯直径 | 425 μm |
| Buffer层厚度 | 100 μm |
| IPyC层厚度 | 40 μm |
| SiC层厚度 | 35 μm |
| OPyC层厚度 | 40 μm |

Case1 : 燃料颗粒外表面温度恒定1500 K ;

Case2 : 燃料颗粒外表面温度在辐照末期跃升为1700 K
不均一的SiC厚度 ;

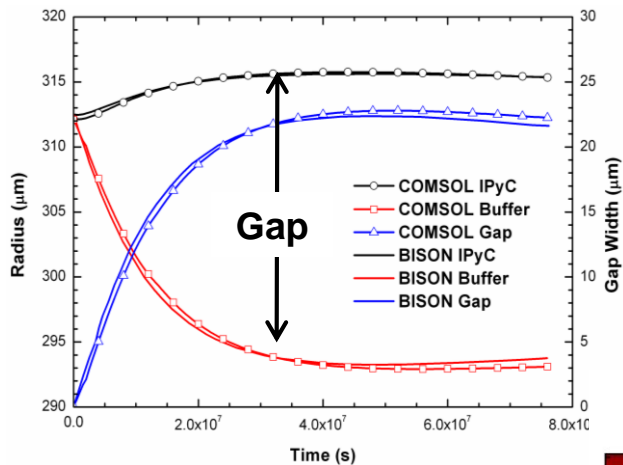


不均一的SiC层厚度

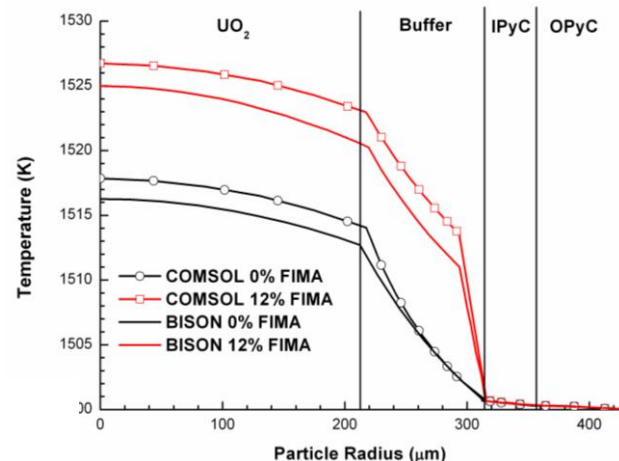


3 模型验证及应用

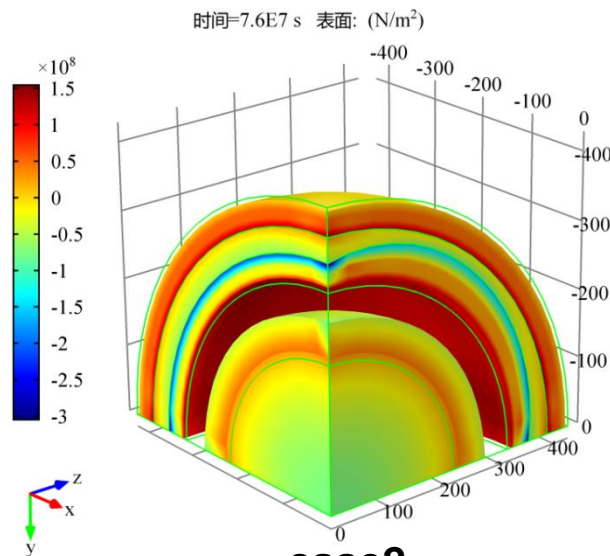
- TRISO颗粒 高温气冷堆运行参数



半径变化



温度分布

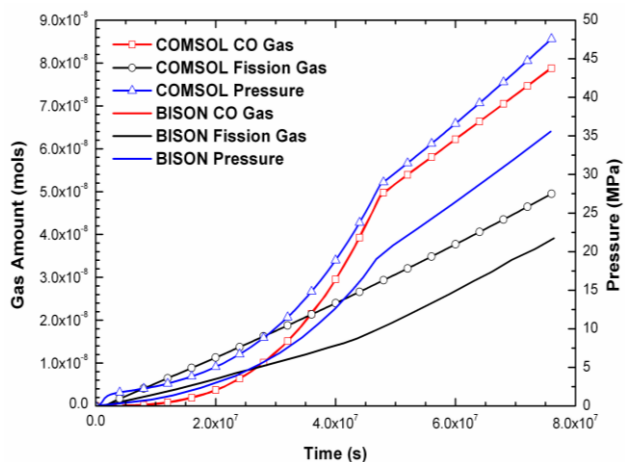


case2

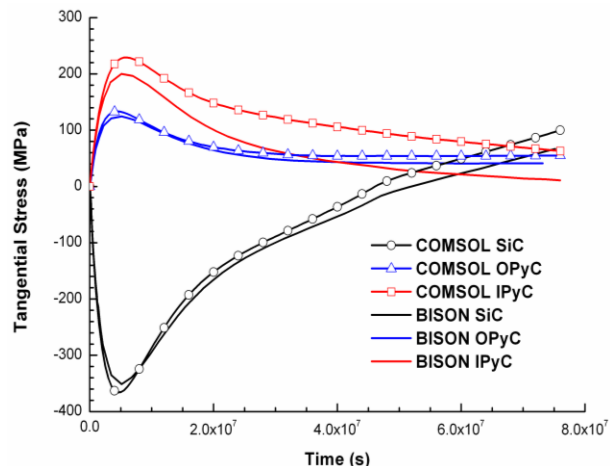
3 模型验证及应用

- TRISO颗粒 高温气冷堆运行参数

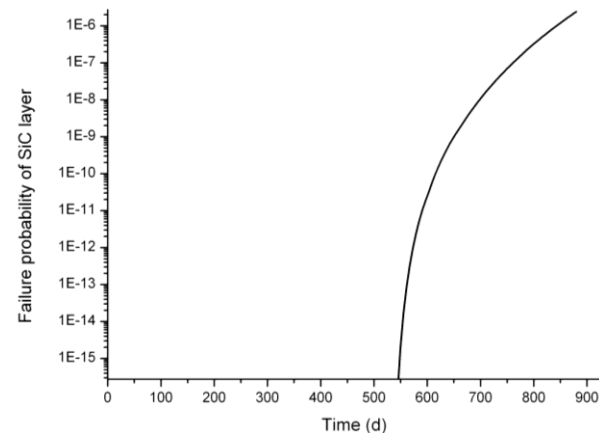
case1



裂变气体和内压



切向应力

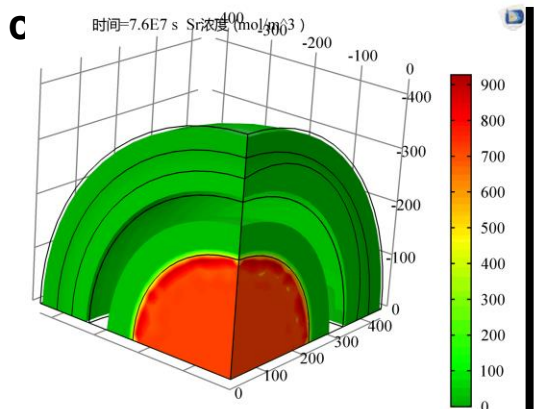


SiC层压力壳失效概率

- 考虑的裂变气体为Kr和Xe。由于气体在间隙和Buffer层累积，内压上升。辐照后期内压来源主要为生成的CO气体。
- 随着裂变气体和CO气体造成的内压逐渐上升，SiC层在切向方向上受到拉应力。当拉应力大于其断裂强度时，SiC层可能发生压力壳式失效而造成燃料颗粒失去阻碍裂变产物泄漏的屏障，因此内压对燃料颗粒结构完整性具有重要影响。
- SiC层的失效概率较低，但随着其所受拉应力增加，失效概率将迅速上升。

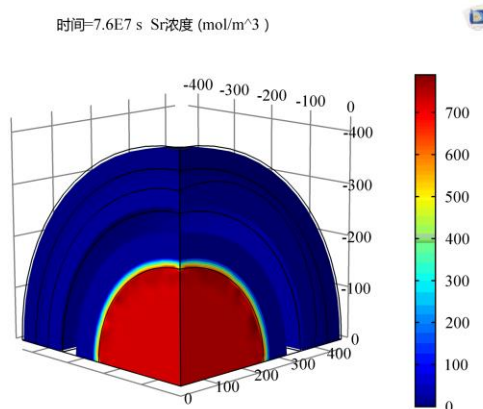
3 模型验证及应用

- TRISO颗粒 高温气冷堆运行参数



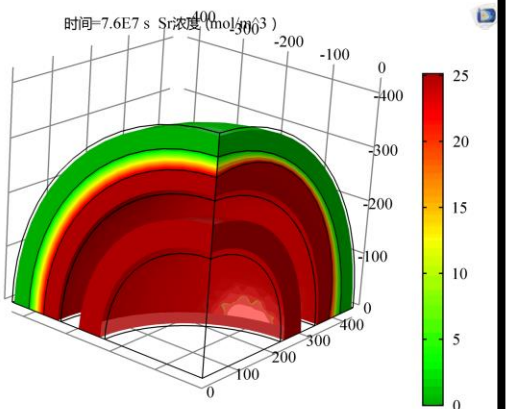
(a)

燃料颗粒的外表面
温度为1500 K

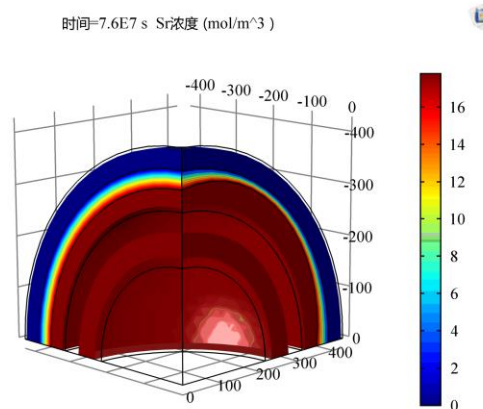


(b)

燃料颗粒的外表面
温度跃升为1700 K



(c)



(d)

温度升高200 K, SiC层的阻挡能力也在下降, 浓度峰值下降22.2%。

裂变产物Sr分布

4 结论

- **建立起了**TRISO燃料颗粒的热传导、力学和裂变产物扩散方程的多物理场耦合分析**模型**。
- 采用IAEA CRP-6基准题对建立的多物理场耦合分析模型进行了对比验证；采用本模型对典型的高温气冷堆TRISO燃料颗粒正常运行工况下的行为进行了分析并且与BISON程序进行了对比，这表明了**模型的合理性**。
- 在TRISO燃料颗粒的辐照过程中，Buffer层与IPyC层之间将出现间隙，影响燃料颗粒的导热效率；Buffer层和间隙中累积的裂变气体和CO气体产生的内压对SiC层的受力状态具有重要影响，过大的内压将明显提高SiC层失效概率。随着温度增加，SiC层阻挡裂变产物往外扩散的能力也将下降。