

西安交通大学

博士学位论文

面向数字孪生的快堆燃料元件高保真模拟与快速预测方法研究

学位申请人：王召浩

指导教师：XXX 教授

学科名称：XXXX

XXXX 年 X 月

A dissertation submitted to
Xi'an Jiaotong University
in partial fulfillment of the requirements
for the degree of
Doctor of Philosophy

By

Zhaohao Wang

Supervisor: (Associate) Prof. XXX

XXXX

XXX XXXX

博士学位论文答辩委员会

面向数字孪生的快堆燃料元件高保真模拟与快速预测方法研究

答辩人：王召浩

答辩委员会委员：

XXXXXX大学 XXX：XXX _____ (注：主席)

XXXXXX大学 XXX：XXX _____

XXXXXX大学 XXX：XXX _____

XXXXXX大学 XXX：XXX _____

XXXXXX大学 XXX：XXX _____

答辩时间：XXXX 年 X 月 X 日

答辩地点：XXXXXX

摘要

论文摘要由摘要正文、关键词、论文类型、资助申明等部分组成。

博士学位论文摘要正文为 1000 字 (word) 左右，硕士学位论文摘要正文为 600 字 (word) 左右。内容一般包括：从事这项研究工作的目的和意义；完成的工作（作者独立进行的研究工作及相应结果的概括性叙述）；获得的主要结论（这是摘要的中心内容）。博士学位论文摘要应突出论文的创新点，硕士学位论文摘要应突出论文的新见解。

摘要中一般不用图、表、化学结构式、非公知公用的符号和术语。

如果论文的主体工作得到了有关基金资助，应在摘要第一页的页脚处标注：本研究得到某某基金（编号：）资助。

.....

关键词： XXX; XXX; XXX; XXX; XXX

关键词由 3~5 个组成。关键词应从《汉语主题词表》中摘选，当《汉语主题词表》的词不足以反映主题时，可由申请人设计关键词，但须加注。每一关键词之间用分号分开，最后一个关键词后不打标点符号。由申请人设计的关键词，须在该关键词的右上角标注 *，并在该页的页脚处注明“* 表示非汉语主题词”。

论文类型： XXXX

论文类型包括：a. 理论研究 (Theoretical Research); b. 应用基础 (Application Fundamentals); c. 应用研究 (Application Research); d. 研究报告 (Research Report); e. 设计报告 (Design Report); f. 案例分析 (Case Study); g. 调研报告 (Investigation Report); h. 产品研发 (Product Development); i. 工程设计 (Engineering Design); j. 工程/项目管理 (Engineering/Project Management); k. 其它 (Others)。

* 本研究得到某某基金（编号：）的资助

ABSTRACT

ABSTRACT

英文摘要撰写要求如下：

- (1) 用词准确，符合语法；
- (2) 关键词按相应专业的标准术语写出，尽量从《英语主题词表》中摘选；
- (3) 如果论文的主体工作得到了有关基金资助，应用英文在摘要第一页的页脚处标注：本研究得到某某基金（编号：）资助；

中文摘要和英文摘要均不要求学位申请人及其指导教师签字。

摘要正文每段开头不空格，每段之间空一行；

The key parts in drip irrigation facilities are emitters. The structural design parameters of emitters can directly affect its performance and the function of the whole drip irrigation system

1. Because.....
2. Only
3. To support

KEY WORDS: XXX; XXX; XXX; XXX

每个关键词组的第一个字母大写，其余为小写，每一关键词之间用分号分开，最后一个关键词后不打标点符号。例如：Drip irrigation emitter; RP&M; Hydraulics; Labyrinth flow channel

TYPE OF DISSERTATION: XXXX

须与中文摘要中的论文类型一致；每个单词第一个字母大写，其余为小写。例如：Applied Research

*The work was supported by the Foundation (foundation ID).

论文类型包括： a. 理论研究 (Theoretical Research); b. 应用基础 (Application Fundamentals); c. 应用研究 (Application Research); d. 研究报告 (Research Report); e. 设计报告 (Design Report); f. 案例分析 (Case Study); g. 调研报告 (Investigation Report); h. 产品研发 (Product Development); i. 工程设计 (Engineering Design); j. 工程/项目管理 (Engineering/Project Management); k. 其它 (Others)。

目 录

摘要	I
ABSTRACT	III
主要符号表	VII
1 绪论	1
1.1 背景	1
1.2 符号说明	1
1.3 基本功能	2
1.3.1 文档层级	2
1.3.2 加粗, 斜体与其他字体设置	3
1.3.3 脚注及其使用	3
1.4 数字、公式和定理环境	4
1.4.1 数字与单位	4
1.4.2 公式、矩阵与数学符号	4
1.4.3 定理相关	6
1.5 其他环境	7
1.5.1 枚举环境	7
2 快堆燃料元件材料基础物性模型	8
2.1 引言	8
2.2 MOX 燃料基础热力学性质	8
2.2.1 热物性	8
2.2.2 热容	14
2.2.3 发射率	15
2.2.4 热膨胀	15
2.2.5 密度	16
2.3 力学物性	16
2.3.1 杨氏模量	16
2.3.2 泊松比	17
2.3.3 蠕变	18
2.3.4 密实化	21
2.3.5 肿胀	22
2.3.6 压力烧结	23
2.3.7 重构	24
2.3.8 断裂强度	26
2.3.9 粘性	26
2.3.10 蒸气压	27

2.3.11 燃料氧化	28
2.4 间隙换热	28
2.4.1 气体传导系数 h_g 的详细模型	28
2.4.2 固-固接触传导系数 h_s 的详细模型	35
2.4.3 辐射传热系数 h_r 的详细模型	37
2.5 裂变气体	38
2.5.1 晶内气体行为模型	39
2.5.2 晶界裂变气体行为模型	41
2.5.3 微观结构演化及其与裂变气体行为的耦合	44
2.5.4 气体总肿胀模型	44
2.5.5 扩展模型	45
2.6 包壳材料堆内行为模型	47
2.6.1 热导率	49
2.6.2 比热容	52
2.6.3 密度	52
2.6.4 热膨胀	53
2.6.5 辐照肿胀	55
2.6.6 塑性	61
2.6.7 断裂失效	66
2.6.8 蠕变	76
2.6.9 屈服应力	84
2.6.10 极限拉伸强度	87
2.6.11 总伸长量	88
2.6.12 弹性模量和泊松比	89
2.6.13 损伤	90
3 强耦合演化模型：多组分迁移与微观重构的影响	95
3.1 引言	95
3.2 气孔迁移与燃料重构动力学模型	95
3.2.1 蒸发-冷凝机制与孔隙迁移速率	95
3.3 氧与钚的热扩散与重分布模型	95
3.4 裂变产物行为演化模型	95
3.4.1 惰性气体行为	95
3.4.2 挥发性产物迁移	95
3.4.3 固体产物导致的集总肿胀	95
4 基于隐式积分算法的多物理场耦合程序开发与实验验证	96
4.1 基于 MOOSE 的多物理场求解框架	96
4.2 隐式力学本构积分算法	96
4.2.1 弹塑性-蠕变本构离散化	96

目 录

4.2.2 径向返回算法的推导与实现	96
4.3 多物理场耦合策略	96
4.3.1 全局耦合逻辑	96
4.3.2 时间步长的自适应控制	96
4.4 程序验证与确认	96
4.5 本章小结	96
5 考虑微观重构效应的燃料元件服役行为演化机理研究	97
5.1 组分重分布对热工性能的影响	97
5.2 裂变气体与间隙传热的互馈机制	97
5.3 典型瞬态工况下的 PCMI 行为	97
5.4 本章小结	97
6 基于物理信息驱动的快速预测代理模型	98
6.1 数据集构建与预处理	98
6.2 代理模型架构设计	98
6.3 模型训练与精度评估	98
6.4 本章小结	98
致谢	99
参考文献	100
附录	108
攻读学位期间取得的研究成果	112
答辩委员会会议决议	114
常规评阅人名单	115
声明	

CONTENTS

ABSTRACT (Chinese)	I
ABSTRACT (English)	III
Glossary	VII
1 Introductions	1
1.1 Backgrounds	1
1.2 Examples	1
1.3 Basic Functions.....	2
1.3.1 Level of this document	2
1.3.2 Bold, Emph and Other Font Settings	3
1.3.3 Footnotes	3
1.4 Equation and Theorem	4
1.4.1 Numbers and Units.....	4
1.4.2 Equations, Matrix and Mathematical Symbols.....	4
1.4.3 Theorems	6
1.5 Other Environments	7
1.5.1 Enumerates	7
2 MOX Fuel Model	8
2.1 MOX Nuclear	8
2.2 mox fundamental	8
2.2.1 Thermal Properties	8
2.2.2 Heat Capacity	14
2.2.3 Emissivity	15
2.2.4 Thermal Expansion	15
2.2.5 Density.....	16
2.3 Mechanical Properties	16
2.3.1 Young's Modulus	16
2.3.2 Poisson's Ratio	17
2.3.3 Creep	18
2.3.4 Densification.....	21
2.3.5 Swelling	22
2.3.6 Pressure Sintering	23
2.3.7 Restructuring.....	24
2.3.8 Fracture Strength	26
2.3.9 Viscosity	26
2.3.10 Vapor Pressure	27

CONTENTS

2.3.11 Fuel Oxidation	28
2.4 Gap Heat Transfer	28
2.4.1 Detailed Model of Gas Conductance h_g	28
2.4.2 solid-solid contact	35
2.4.3 Detailed Model of Solid-Solid Contact Conductance h_s	37
2.5 Fission Gas	38
2.5.1 Intragranular Gas Behavior Model	39
2.5.2 Intergranular Fission Gas Behavior Model	41
2.5.3 Microstructure Evolution and Coupling with Fission Gas Behavior	44
2.5.4 Total Gas Swelling Model	44
2.5.5 Extended Models	45
2.6 cladding	47
2.6.1 thermal conductivity	49
2.6.2 Cavity	52
2.6.3 Density	52
2.6.4 thermal expansion	53
2.6.5 Irradiation Swelling	55
2.6.6 Plasticity	61
2.6.7 duanlie	66
2.6.8 creep	76
2.6.9 Yield stress	84
2.6.10 uts	87
2.6.11 total elongation	88
2.6.12	89
2.6.13 此	90
3 Strongly Coupled Evolution Model Incorporating Multi-component Migration and Microstructural Reconstruction	95
3.1 Introduction	95
3.2 Pore Migration and Fuel Restructuring Kinetics Model	95
3.2.1 Evaporation-Condensation Mechanism and Pore Migration Velocity	95
3.3 Thermal Diffusion and Redistribution Model for Oxygen and Plutonium	95
3.4 Evolution Model for Fission Product Behavior	95
3.4.1 Inert Gas Behavior	95
3.4.2 Volatile Fission Product Migration	95
3.4.3 Solid Fission Product Induced Swelling	95
4 Development and Experimental Verification of a Multiphysics Coupling Program Based on Implicit Integration Algorithm	96
4.1 MOOSE-Based Multiphysics Solving Framework	96
4.2 Implicit Mechanical Constitutive Integration Algorithm	96

4.2.1 Discretization of Elasto-Plastic-Creep Constitutive Laws	96
4.2.2 Derivation and Implementation of the Radial Return Algorithm	96
4.3 Multiphysics Coupling Strategy	96
4.3.1 Global Coupling Logic	96
4.3.2 Adaptive Time Step Control	96
4.4 Program Verification and Validation	96
4.5 Chapter Summary	96
5 Study on the Evolution Mechanism of Fuel Rod In-Service Behavior Considering Mi- crostructural Reconstruction Effects	97
5.1 Impact of Component Redistribution on Thermal Performance	97
5.2 Mutual Feedback Mechanism between Fission Gas Behavior and Gap Heat Transfer	97
5.3 PCMI Behavior under Typical Transient Conditions	97
5.4 Chapter Summary	97
6 Physics-Informed Data-Driven Surrogate Model for Fast Prediction	98
6.1 Dataset Construction and Preprocessing	98
6.2 Surrogate Model Architecture Design	98
6.3 Model Training and Accuracy Assessment	98
6.4 Chapter Summary	98
Acknowledgements	99
References	100
Appendices	108
Achievements	112
Decision of Defense Committee	114
General Reviewers List	115
Declarations	

主要符号表

C_v	灌水器流量偏差系数
CS	Computer Science, 计算机科学
D	管道内径/mm
D_e	灌水器流道当量直径/mm
l	管长/m
Linux	is a generic term referring to the family of Unix-like computer operating systems that use the Linux kernel
LVM	Logical Volume Manager, 逻辑卷管理器
n	迷宫流道单元个数/个
q	灌水器流量/L · h-1
q_n	灌水器额定流量/L · h-1
Re	雷诺数
S_q	灌水器流量标准偏差
ν	流体的运动粘性系数
X	流态指数

1 绪论

1.1 背景

本文档仅提供部分可能用到的示例，系统的学习 L^AT_EX 用法请参考其他书目，如 *lshort*，可通过在 shell(命令行/cmd) 中执行 `texdoc lshort-zh` 获得中文版。

同时，务必意识到 L^AT_EX 的工作及使用方式与 Microsoft Word 有极大的不同，不要问「怎么在 L^AT_EX 中实现 Word 的 xx 功能」。

1.2 符号说明

为了更加清楚的说明本模板的用法，特意使用了如下几种标记方式来标记「L^AT_EX 源码」及「说明」：

行内的灰色字块 表示简短的代码 (L^AT_EX 或 shell);

行内的蓝色字块 表示宏包的名称。

灰色框用来放置有一定长度的 L^AT_EX 源码 (及执行结果)

红色框用来放置学校的学位论文模板的**格式要求**

蓝色框用来放置学校的学位论文模板的**内容要求**

绪论部分的要求

绪论部分主要论述论文的选题意义及应用背景、国内外研究现状分析及论文的主要研究内容等。

1.3 基本功能

1.3.1 文档层级

按照学校的要求，正文最多应具有七个层级，分别使用以下命令，为了方便中英目录的生成，前三层命令是由模板自定义的，同时第六层目录的命令是由模板新增的。注意，不论正文主体是中或英，目录顺序均为先中后英，这些命令有两个参数的也是先中后英。

层级	命令
0	\xchapter{Chs}{Eng}
1	\xsection{Chs}{Eng}
2	\xsubsection{Chs}{Eng}
3	\subsubsection{Chs/Eng}
4	\paragraph{Chs/Eng}
5	\ subparagraph{Chs/Eng}
6	\sub subparagraph{Chs/Eng}

示例如下：

- 1) 第四级标题 1
 - (1) 第五级标题 1
 - (2) 第五级标题 2
 - (3) 第五级标题 3
 - a) 第六级标题 1
 - b) 第六级标题 2
 - c) 第六级标题 3

第六级下的一些文字

(a) 第七级标题 1

第七级下的一些文字

1.3.2 加粗，斜体与其他字体设置

在中文学位论文的写作中，不推荐使用加粗，斜体等方式突出重点。

使用 `\textbf{text}` 进行可以对字加粗；同时，请注意到在英文中，正确的强调方式不是使用加粗，而是使用斜体，即使用 `\emph{text}` 进行强调。如：

为了突出`\textbf{重点}`，英文可以这样：This is the `\emph{key question}`.

为了突出**重点**，英文可以这样：This is the *key question*.

使用 `\textit{text}`、`\underline{text}` 等实现斜体，下划线等格式。

1.3.3 脚注及其使用

脚注可用小号字（一般小五号宋体）列在相应正文同一页最下部并与正文部分用细线（版面宽度的 1/4 长）隔开。

脚注^{①②③}是对文中有关内容的解释、说明或补充，使用上角标（序号①、②、…）进行标注。

脚注可以通过 `\footnote{}` 自动编号生成，也可使用 `\footnotetext{text}` 手动添加脚注。

摘要中关于项目资助的标识，是使用脚注生成的：

`\footnotetext{*本研究得到某某基金（编号：）的资助}`

① 脚注序号“①, ……, ⑨”的字体是“正文”，不是“上标”，序号与脚注内容文字之间空 1 个半角字符，脚注的段落格式为：单倍行距，段前空 0 磅，段后空 0 磅，悬挂缩进 1.5 字符；中文用宋体，字号为小五号，英文和数字用 Times New Roman 字体，字号为 9 磅；中英文混排时，所有标点符号（例如逗号“,”、括号“()”等）一律使用中文输入状态下的标点符号，但小数点采用英文状态下的样式“.”。

② 脚注序号“①, ……, ⑨”的字体是“正文”，不是“上标”，序号与脚注内容文字之间空 1 个半角字符，脚注的段落格式为：单倍行距，段前空 0 磅，段后空 0 磅，悬挂缩进 1.5 字符；中文用宋体，字号为小五号，英文和数字用 Times New Roman 字体，字号为 9 磅；中英文混排时，所有标点符号（例如逗号“,”、括号“()”等）一律使用中文输入状态下的标点符号，但小数点采用英文状态下的样式“.”。

③ 脚注序号“①, ……, ⑨”的字体是“正文”，不是“上标”，序号与脚注内容文字之间空 1 个半角字符，脚注的段落格式为：单倍行距，段前空 0 磅，段后空 0 磅，悬挂缩进 1.5 字符；中文用宋体，字号为小五号，英文和数字用 Times New Roman 字体，字号为 9 磅；中英文混排时，所有标点符号（例如逗号“,”、括号“()”等）一律使用中文输入状态下的标点符号，但小数点采用英文状态下的样式“.”。

1.4 数字、公式和定理环境

1.4.1 数字与单位

模板引入了 `siunitx` 宏包实现数字与单位的正确排版，具体使用细节请自行查看该宏包，即 `texdoc siunitx`。

为了输入不同格式及角度的数字，可以使用 `\num{3.45d-4}` 得到 3.45×10^{-4} ，使用 `\num{-e10}` 得到 -10^{10} ，使用 `\ang{1;2;3}` 得到 $1^\circ 2' 3''$ ，避免了手动调节格式的问题。

该宏包预先定义了部分单位，可以直接调用，同时生成较为复杂的单位。如：

使用 `\SI{10}{\hertz}` 得到 10 Hz。

1.4.2 公式、矩阵与数学符号

1. 公式应另起一行，居中编排，较长的公式尽可能在等号后换行，或者在“+”、“-”等符号后换行。公式中分数线的横线，长短要分清，主要的横线应与等号取平。
2. 公式后应注明编号，公式号应置于小括号中，如公式 (2-3)。写在右边行末，中间不加虚线；
3. 公式下面的“式中：”两字左起顶格编排，后接符号及其解释；解释顺序为先左后右，先上后下；解释与解释之间用“；”隔开。
4. 公式中各物理量及量纲均按国际标准 (SI) 及国家规定的法定符号和法定计量单位标注，禁止使用已废弃的符号和计量单位。

此部分是 LATEX 中比较精彩的一部分，具体的使用细节请自行查阅资料，本模板未对其进行修改。

公式如下：

```
\begin{equation}
-e^{\max}_- \text{dis} \leq a_t \leq e^{\max}_{\text{ch}}
\text{式中: } e \text{ 为 } xxx; \text{ } a \text{ 为 } xxx.
\end{equation}
```

公式如下：

$$-e_{\text{dis}}^{\max} \leq a_t \leq e_{\text{ch}}^{\max} \quad (1-1)$$

式中： e 为 xxx ; a 为 xxx 。

所以如式(1-1)所示：

$$-e_{\text{dis}}^{\max} \leq a_t \leq e_{\text{ch}}^{\max} \quad (1-2)$$

请注意，本模板已经定义了`\diff`命令作为微分符号，请不要自己使用新的符号，使用效果如下：

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \right)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \quad (1-3)$$

$$= \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-r^2} r dr d\theta \quad (1-4)$$

$$= \int_0^{2\pi} \left(-\frac{e^{-r^2}}{2} \Big|_{r=0}^{r=\infty} \right) d\theta \quad (1-5)$$

$$= \pi \quad (1-6)$$

同时，定义了部分用于简化输入的命令：

```
$\seq{x}{n} \\ % serise
$\iprod{i}{j} \\ % inner product
$\mbf{B} \\ % acronym of \mathbf
$\Re{Q}, \Im{Q}$
```

x_1, x_2, \dots, x_n

$\langle i, j \rangle$

B

\Re{Q}, \Im{Q}

1.4.3 定理相关

本模板通过 `thmtools` 宏包定义了以下环境，其中证明环境默认具有缩进，没有编号，同时使用 `\qedhere` 结束证明，其他环境样式一致。

环境	英文名称	中文名称	环境	英文名称	中文名称
proof	Proof	证明	theorem	Theorem	定理
axiom	Axiom	公理	corollary	Corollary	推论
lemma	Lemma	引理	definition	Definition	定义
example	Example	例子	proposition	Proposition	命题
assumption	Assumption	假设	remark	Remark	注
problem	Problem	问题	conjecture	Conjecture	猜想

```
\begin{theorem}[勾股定理]
```

若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

```
\end{theorem}
```

```
\begin{proof}
```

通过 \ldots

所以：

```
\begin{equation*}
G(x, y) = G(y, x). \quad \qedhere
\end{equation*}
\end{proof}
```

定理 1.1 (勾股定理) 若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

证明： 通过...

所以：

$$G(x, y) = G(y, x).$$



命题 1.2 所以：

$$G(x, y) = G(y, x).$$

猜想 1.3 (勾股定理) 若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

公理 1.4 (勾股定理) 若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$. 若 a, b 为直角三角形的两条直角边， c 为斜边，那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

定义 1.5 (勾股定理) 若 a, b 为直角三角形的两条直角边, c 为斜边, 那么 $a^2 + b^2 = c^2$.

1.5 其他环境

1.5.1 枚举环境

```
\begin{enumerate}
    \item 123
    \item 231421
    \item 124124
\end{enumerate}
```

1. 123
2. 231421
3. 124124

2 快堆燃料元件材料基础物性模型

2.1 引言

MOX 燃料的物性，主要来源是 FRAPCON、MATPRO、Bison 的报告，包含根据最小二乘法拟合的最小的多项式和具有物理理论表达式。

2.2 MOX 燃料基础热力学性质

2.2.1 热物性

1) 熔点

熔点是根据燃料和钚含量变化的，根据 Brassfield 的实验结果确定 UO_2 的熔点是 3113.15K， $(U, Pu)O_2$ 燃料的熔点根据实验结果，同时采用最小二乘法获得，如下：

对于钚成份 > 0 ：

$$T_{sol} = 3113.15 - 5.41395C + 7.468390 \times 10^{-3}C^2 - 3.2 \times 10^{-3}FBu$$

$$T_{liq} = 3113.15 - 3.21660C - 1.448518 \times 10^{-2}C^2 - 3.2 \times 10^{-3}FBu$$

对于钚成份 $= 0$ ：

$$T_{sol} = 3113.15 - 3.2 \times 10^{-3}FBu$$

$$T_{liq} = T_{sol}$$

其中 $T_{sol}(K)$ 固态温度， $T_{liq}(K)$ 液态温度， C 是 PuO_2 (wt%) 百分比质量， FBu (MWd/tU) 燃料。

熔化热，指的是一种物质从固态转变为液态时所需要的热量，这个过程通常在物质的熔点温度下进行。未辐照的 UO_2 熔化热在实验上可以测得。Hein 和 Flagella 实验表明熔化热是 $76.1 \pm 2\text{kg/mol}$ ，Leibowitz 实验值是 74kg/mol 。同时在 MOX 燃料的实验中，Leibowitz 测得熔化热为 67kJ/mol ，考虑到两者近似的组成 10% 的误差是合理的。因此，除非有矛盾数据， UO_2 的熔化热被用在 MOX 燃料上。

2) 热导率

在未发生裂解的 UO_2 或者 $(U, Pu)O_2$ 燃料中，热导率能够影响稳态条件和非正常瞬态下的温度分布。热导率是温度、密度、氧金属比 (O/M) 以及高温下钚含量。液态

下的热导率从物理角度考虑，因为没有找到实验数据。

为了消除 1364 到 2300K 处热导率不连续性，对公式进行了微小的修改。表达式如下：

$$k = \frac{D}{1 + (6.5 - 0.004697T)(1 - D)} \left[\frac{C_V}{(A + BT')^3(1 + 3e_h)} \right] + 5.2997 \times 10^{-3} T e^{[-\frac{13358}{T}]} \left\{ 1 + 0.169 \left(\frac{13358}{T} + 2 \right) \right\}$$

其中 k (W/m · K) 是热导率， D (无单位) 理论密度分数， C_V (J/kg · K) 声子对比热容贡献，具体表示形式见比热容部分， e_h (无单位) 当温度大于 300K 由于热膨胀导致的线性应变， T (K) 燃料温度， T' (K) 孔隙率对温度的矫正，当温度 $< 1364K$ ， $T' = 6.50 - T \times 4.69 \times 10^{-3}$ ；当温度 $> 1877K$ ， $T' = -1$ ；中间的温度 (1364-1834) 之间采用插值计算结果， T'' (K) 在燃料温度 $< 1800K$ 时，取值燃料温度；温度 $> 2300K$ ， $T'' = 2050K$ ；中间温度 (1800K-2300K) 采用线性插值， A (m · s/kg · K) 是点缺陷对声子平均自由路径影响的因子， $0.339 + 12.6x$ 其中 x 是 $2.0 - O/M$ ， B (m · s/kg · K) 是声子与声子散射平均自由程的贡献正比的因子， $0.06867 \times (1 + 0.6238x)$ 其中 x 是燃料中 Pu 的含量。

等式第一项表示声子对比热容的影响，第二项表示电子（电子空穴）的影响，适用范围是 90%-100% 理论密度，如果发生熔化，第一项将被忽略。

表达式的误差是根据实验结果进行评估的，对于 UO_2 来说，标准差是 0.2W/m · K，对于含量 2% 的 $(U, Pu)O_2$ ，标准差是 0.3W/m · K。基于此，其他的情况下的固体热导率误差如下：

$$UK = [0.2(1 - COMP) + 0.7COMP] \times (1.0 + |2 - OTM|10)$$

其中 UK (W/m · K) 固体热导率的标准差， $COMP$ 是 PuO_2 的含量 (PuO_2 和整个质量的比值)， OTM (无单位) 燃料的 O/M 比。

BISON 中有三个热物性的模型，所有的模型首先都定义了未辐照燃料。之后对其进行修正，这些修正主要是考虑辐照、燃烧、MOX 含量和孔隙度。对于大部分的模型，都是由晶格震动（声子）和电子的影响。

$$k_{95} = k_{phonon} + k_{electronic}$$

第一项通常变量通常是温度和燃烧，第二项是和温度或者温度平方成反比的指数项。

$$k_{phonon} = 1.0 / (A + B * T + f(Bu) + g(Bu) * h(T))$$

$$k_{electronic} = i(T) * \exp(-F/T)$$

(1) Duriez-Ronchi

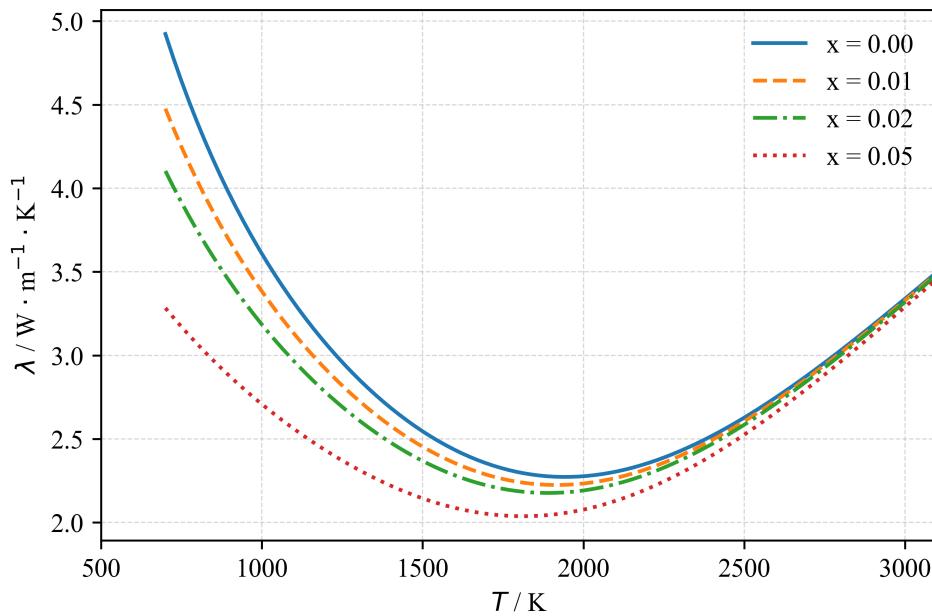
由两部分组成，第一部分是 Duriez 第二部分是 Ronchi 模型，第一个模型给出未辐照的 MOX。

$$\lambda_0(T, x) = 1.158 \cdot \left(\frac{1}{A + CT_n} + \frac{6400}{T_n^{5/2}} \exp\left(-\frac{16.35}{T_n}\right) \right)$$

其中 λ_0 是热导率 $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ ； T_n 是 $T(K)/1000$ 之后的温度； x 是偏移的化学计量； $A(x) = 2.85x + 0.035$ ； $C(x) = -0.715x + 0.286$ 。

C_w 是温度 T 和质量分数 $COMP$ 的函数：

$$C_v = \frac{296.7(535.285)^2}{T^2 \left(e^{-\frac{535.285}{T}} - 1 \right)} \left[e^{-\frac{535.285}{T}} (1 - COMP) + \frac{COMP \cdot (347.4)(571)^2}{T^2 \left(e^{-\frac{537}{T}} - 1 \right)} e^{-\frac{537}{T}} \right]$$

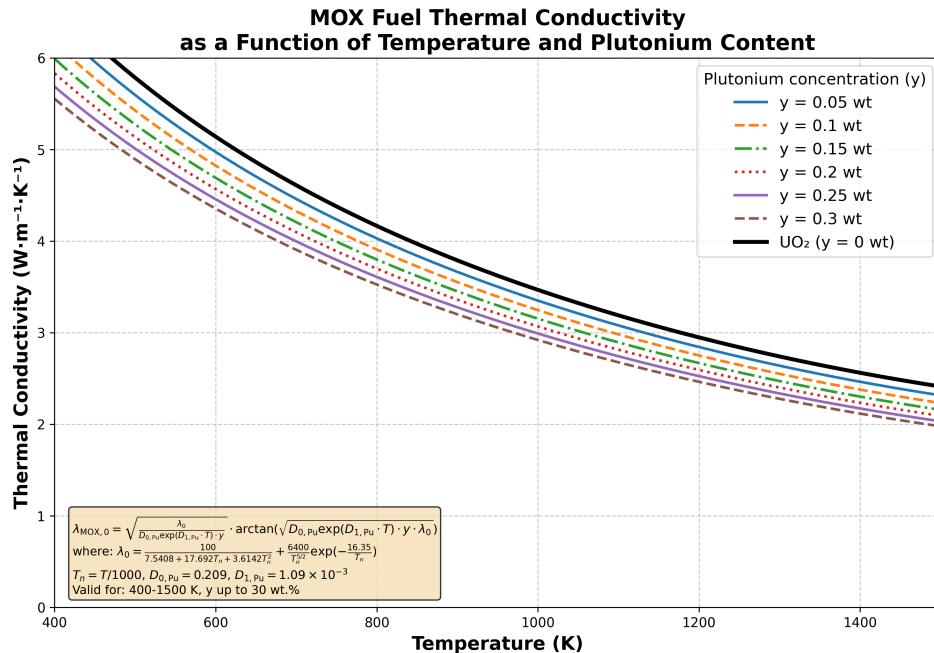


(2) Amaya

不像之前的模型, Amaya 提供了钚含量的影响。根据 UO_2 热导率同时考虑到 Pu 的影响。

$$\lambda_{MOX,0} = \sqrt{\frac{\lambda_0}{D_{0,Pu} \exp(D_{1,Pu} \cdot T) y}} \cdot \arctan(\sqrt{D_{0,Pu} \exp(D_{1,Pu} \cdot T)} y \cdot \lambda_0)$$

其中 $\lambda_{MOX,0}$ 是 MOX 未辐照的热导率 ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$) ; λ_0 是 UO_2 未辐照的热导率 ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$) ; T 是温度 (K) ; y 是钚含量 (wt.%) ; $D_{0,Pu} = 0.209 W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$; $D_{1,Pu} = 1.09 \cdot 10^{-3} K^{-1}$ 。



BISON 中使用 Fink 模型计算未辐照的 UO_2 热导率。Amaya 模型的适合 400-1500K, 钚含量最高是 30wt.%。

(3) Fink

$$k_{95} = \left(\frac{100}{7.5408 + 17.692 \cdot T_n + 3.6142 \cdot T_n^2} + \frac{6400}{T_n^{5/2}} \exp\left(-\frac{16.35}{T_n}\right) \right)$$

其中 T_n 是温度 T (K) 除以 1000。如果要获得 100%TD 热导率:

$$k = k_{95} \cdot \left(\frac{1}{1 - (2.6 - 0.5 \cdot T_n) \cdot 0.05} \right)$$

(4) Halden

修改自 UO_2 燃料，需要在模型中考虑到新加的氧化物影响，添加一个修正因子 k_{phonon} 前面是 0.92。 $k_{electronic}$ 不变。

$$k_{95} = 1 / (term0 + term1 + term2 + term3 + term4 \cdot term5) + term6$$

其中：

$$term0 = 0.1148$$

$$term1 = 1.1599 \cdot Gdeon$$

$$term2 = 1.1599 \cdot f_x$$

$$term3 = 4 \times 10^{-3} \cdot Bu_{VO_2}$$

$$term4 = 2.475 \times 10^{-4} \cdot (1 - 3.33 \times 10^{-3} \cdot Bu_{VO_2}) \cdot \min(1650, T_c)$$

$$term5 = 1$$

$$term6 = 1.32 \times 10^{-2} \cdot \exp(0.00188 \cdot T_c)$$

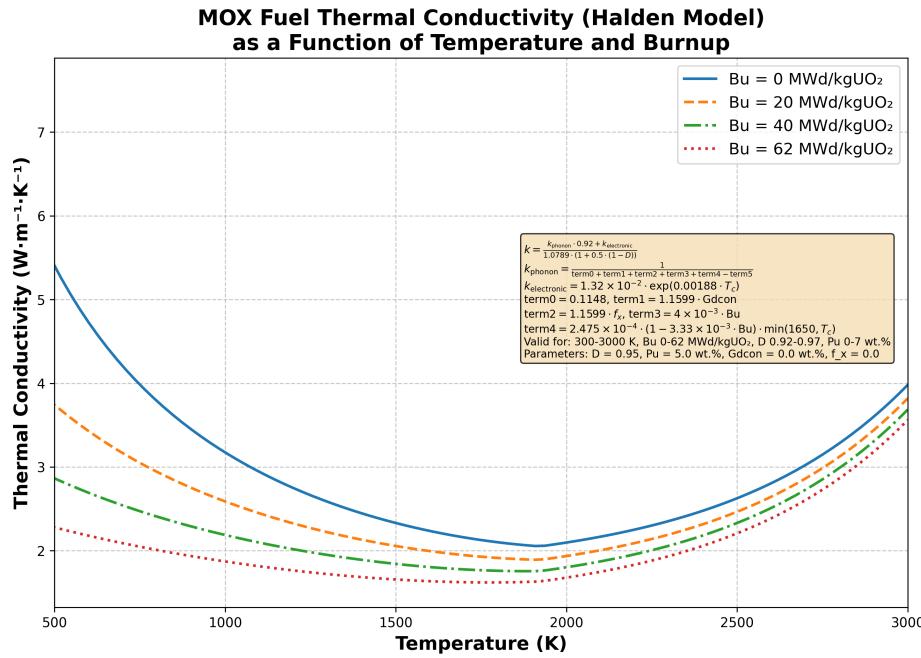
其中 $Gdeon$ 是钇含量 (wt.%)。 f_x 是化学计量偏移量 (2-O/M)， Bu_{VO_2} 是燃耗 (MWd/KgUO₂)。 T_c 是温度 (degC)。

$$k = k_{95} \cdot 1.0789 \cdot \frac{D}{1 + 0.5 \cdot (1 - D)}$$

其中 D 是理论密度百分数。

使用范围：

- $300 \leq T(K) \leq 3000$
- $0 \leq BU \leq MWd/KgU$
- $0.92 \leq D \leq 0.97$
- $0 \leq plutonia content \leq 7wt.\%$
- plutonia particle size $< 20 \times 10^{-6}$



(5) 快堆 MOX 燃料^[1]

快堆的 MOX 燃料比压水堆的 MOX 燃料含有更高的钚的氧化物。模型是未辐照的热导率乘以溶解的固体产物修正 (F_1)、沉淀的固体产物 (F_2)、辐照影响 (F_3)、孔隙度 (F_4):

$$k = F_1 F_2 F_3 F_4 k_0$$

其中 k_0 是全密度的热导率 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$);

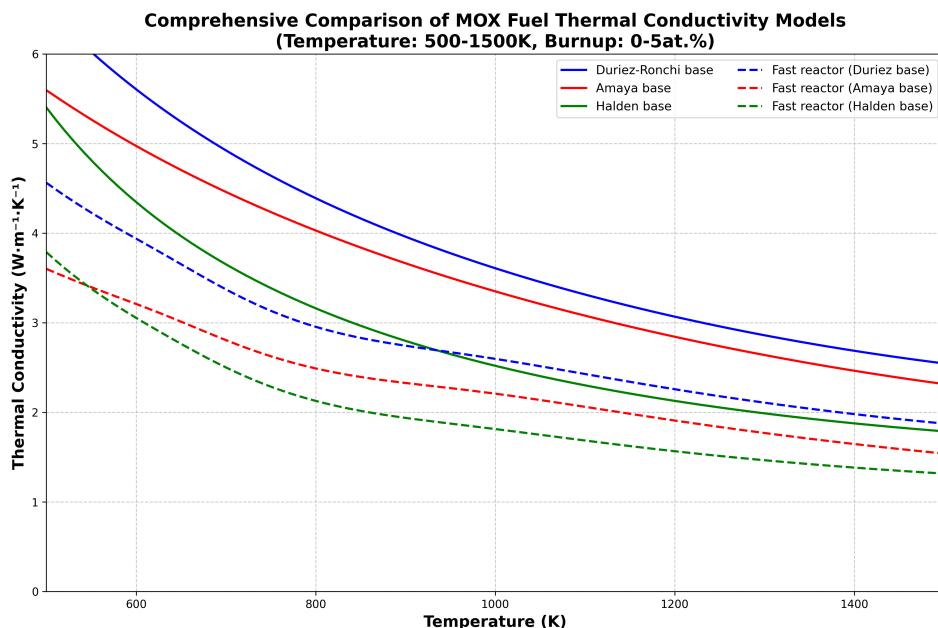
$$F_1 = \left(\frac{1.09}{Bu^{3.265}} + 0.0643 \cdot \sqrt{\frac{T}{Bu}} \right) \cdot \arctan \left(\frac{1.0}{\frac{1.09}{Bu^{3.265}} + 0.0643 \cdot \sqrt{\frac{T}{Bu}}} \right)$$

$$F_2 = 1.0 + \left(\frac{0.019 \cdot Bu}{3.0 - 0.019 \cdot Bu} \right) \cdot \left(\frac{1.0}{1.0 + \exp \left(-\frac{T-1200}{100} \right)} \right)$$

$$F_3 = 1.0 - \frac{0.2}{1.0 + \exp \left(\frac{T-900}{80} \right)}$$

$$F_4 = 1 - \alpha P$$

其中, T 是温度 K; bu 是百分比燃烧 at.%; P 是孔隙度的体积分数; α 是系数 (保守估计 2.5)。



(6) 铜系快堆 MOX 燃料

模型是根据 JOYO 实验结果。

$$k = \left(\frac{(1-p)}{1+0.5p} \right) [(2.713x + 3.583E - 1Am + 6.317E - 2Np + 1.595 \times 10^{-2}) + (-2.625 + 2.493) \times 10^{-4}T]^{-1} + \left(\frac{1.5}{1+0.5p} \right)^{-1}$$

其中 Am 是铜系含量； Np 是镍系元素。

2.2.2 热容

1) MATPRO

比热容用于计算温度随时间变化，主要是和燃料存储能量或者升相关。比热容的模型是温度、成份、熔点和金属氧化值的函数。温度适用范围是 300K 到多余 4000K。

等式适用于 UO_2 和 PuO_2 ：

$$FCP = \frac{K_1 \theta^2 e^{\frac{\theta}{T}}}{T^2 [e^{\frac{\theta}{T}} - 1]} + K_2 T + \frac{Y K_3 E_D}{2 R T^2} e^{-\frac{E_D}{R T}}$$

$$FENTHL = \frac{K_1 \theta}{e^{\frac{\theta}{T}} - 1} + \frac{K_2 T^2}{2} + \frac{Y K_3 e^{-\frac{E_D}{R T}}}{2}$$

其中， FCP (J/kg · K) 是比热容， $FENTHL$ (J/kg) 燃料的， T (K) 温度， Y 是氧金

属比 O/M, $R = 8.3143 \text{ (J/mol} \cdot \text{K)}$ 气体常数, θ (K) 受周期温度。

下表展示了 UO_2 和 PuO_2 的参数:

表 2-1 比热容中计算需要的系数

常数	UO_2	PuO_2	单位
K_1	296.7	347.4	$\text{J/kg} \cdot \text{K}$
K_2	2.43×10^{-2}	3.95×10^{-4}	$\text{J/kg} \cdot \text{K}^2$
K_3	8.745×10^7	3.860×10^7	J/kg
θ	535.285	571.00	K
E_D	1.577×10^5	1.967×10^5	J/mol

UO_2 和 PuO_2 在液态的比热容 $FCP = 503 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ 。

对于混合的 UO_2 和 PuO_2 燃料, 采用每种成份的质量分数乘以相对应的物性。 UO_2 的标准误差是 $\pm 3 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$, 对于 MOX 标准差是限 PuO_2 的分数相关, 从 6 到 $10 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ 。对于低于熔点 2K 到熔点的比热容用液态的比热容和固态比热容进行线性插值。

2.2.3 发射率

反射率和辐射换热相关, 具体取决于间隙大小、间隙温度梯度和气腔压力。MATPRO 中使用的发射率是 $e = 0.7856 + 1.5263 \times 10^{-5}T$ 。发射率在实验数据上的标准误差是 $\pm 6.8\%$, 温度使用范围限制是 2400K 之下, 之后的温度因为没有数据支持, 考虑也采用表达式的外推值。同时 PuO_2 因为没有数据, 表达式也用于 UO_2 的发射率。

2.2.4 热膨胀

在 MATPRO 中, 燃料热膨胀是温度, PuO_2 含量、熔化占比的函数, 与 O/M 比值没有关系。根据实验数据发现当 $|O/M - 2.0| > 0.2$ 会对热膨胀产生影响, 但是传统的反应堆中偏离化学计量大约为 0.1 左右。

固态的热膨胀系数如下:

$$\frac{\delta L}{L_0} = K_1 T - K_2 + K_3 e^{-\frac{E_D}{kT}}$$

其中 $\frac{\delta L}{L_0}$ 是热膨胀到线应变 (300K 的时候为 0), T (K) 温度, E_D (J) 缺陷形成的能力, $k (1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K})$ 是玻尔兹曼常数。 K_1, K_2, K_3, E_D 是常数, 见下表:

对于 MOX 燃料, 同样是使用各自的质量分数乘以对应的热膨胀应变。

在熔化之后, 热膨胀应变被认为是 0.043。如果存在部分应变, 热膨胀应变通过下式计算:

表 2-2 热膨胀应变计算需要的系数

常数	UO_2	PuO_2	单位
K_1	1.0×10^{-5}	9.0×10^{-6}	K^{-1}
K_2	3.0×10^{-3}	2.7×10^{-3}	无单位
K_3	4.0×10^{-2}	7.0×10^{-2}	无单位
E_D	6.9×10^{-20}	7.0×10^{-20}	J

$$\frac{\delta L}{L_0} = \frac{\delta L}{L_0}(T_m) + 0.043 * FACMOT$$

其中, $\frac{\delta L}{L_0}(T_m)$ 固体下的热膨胀应变 ($T = T_m$), T_m 是燃料的熔点, $FACMOT$ 是燃料中熔化分数。

如果全熔融的燃料热膨胀应变为:

$$\frac{\delta L}{L_0} = \frac{\delta L}{L_0}(T_m) + 0.043 + 3.6 \times 10^{-5}[T - (T_m + \Delta T_m)]$$

固体到液体的相转变对于纯 UO_2 和 PuO_2 , 对于 MOX 燃料, 转变要跨越一个温度范围, 也就是上式中的 ΔT_m 、 ΔT_m 是液态温度减去固态的 MOX 温度。

模型的不确定性跟温度相关, 随着温度增加而增加, 所以给出误差大概在 $\pm 10\%$ 。

2.2.5 密度

在 MATPRO 中密度的计算公式使用的是根据膨胀应变相关的计算表达式。如下:

$$\rho = \rho_0(1 - 3\epsilon_{UO_2})$$

其中 ρ (kg/m^3) 是 UO_2 的密度, $\rho_0 = 10980$ (kg/m^3) 是室温下的 UO_2 的密度, ϵ_{UO_2} 是 UO_2 的热膨胀应变。

2.3 力学物性

2.3.1 杨氏模量

陶瓷燃料的杨氏模量和温度、密度、微观结构、氧金属比 (O/M) 和燃烧。实验数据表明 PuO_2 的掺杂会导致杨氏模量增加, 这些会导致模型的误差增大。

$$ES = 2.334 \times 10^{11}[1 - 2.752(1 - D)][1 - 1.0915 \times 10^{-4}T]$$

其中, ES (Pa) 是 UO_2 的杨氏模量, D 是燃料密度 (理论密度分数), T (K) 是

温度。

对于含有 PuO_2 的燃料来说，低于熔点下的杨氏模量采用下式的计算：

$$E = ES e^{-Bx} [1 + 0.15f]$$

其中， E (Pa) 是杨氏模量， ES (Pa) 是 UO_2 的杨氏模量， B 在超化学计量比是 1.34，低化学计量比是 1.75， x 是指的偏移化学计量比的程度 $MO_{2\pm x}$ ， f 是 PuO_2 的质量分数。

对于纯 UO_2 燃料，标准差是：

$$S_{ES} = \begin{cases} 0.06 \times 10^{11}, & 450 < T < 1600K \\ 0.06 \times 10^{11} + ES(T_1600)/6052.6, & 1600 < T < 3113K \end{cases}$$

对于偏移化学计量比的燃料（MOX 燃料）或者包含 PuO_2 的燃料，标准差是：

$$S_E = [(S_{ES}^2 + (E - ES)^2)]^{1/2}$$

其中 S_{ES} 和 S_E (Pa) 分别是 UO_2 和偏移化学计量比燃料的标准误差。

2.3.2 泊松比

在 MATPRO 中 UO_2 和 PuO_2 燃料的泊松比是燃料温度和成份的函数。泊松比通过杨氏模量剪切模量计算得到。

$$\mu = \frac{E}{2G} - 1$$

其中， μ 是泊松比， E (Pa) 是杨氏模量， G (Pa) 是剪切模量。

Wachtman 等人文章中，杨氏模量和剪切模量分别计算式是 $E = 2.30 \times 10^{11} Pa$ 和 $G = 0.874 \times 10^{11} Pa$ ，因此，泊松比是 0.316，需要注意的是 Wachtman 的实验仅仅考虑单晶的 UO_2 在 25℃ 下的情况。Padel 和 de Novion 测得多晶下的 UO_2 的泊松比是 0.314 和 0.306，这和 Wachtman 的 0.316 符合的很好。

Nutt 等人测得 $U_{0.8}Pu_{0.2}O_{2-x}$ 室温下的泊松比是 0.276 ± 0.094 ，并且是和密度不相关的。所以，MOX 燃料使用此值。

2.3.3 蠕变

MATPRO 中的 UO_2 和 $(U, Pu)O_2$ 的蠕变数据来源有堆内和堆外数据，样品都是高密度（95% 的理论密度）同时燃烧非常低，蠕变是主要的影响因素。

模型适合 UO_2 和 MOX 燃料，模型包含 UO_2 时间相关的蠕变率，即适合稳态也适合瞬态分析。燃料的蠕变模型是时间、温度、晶粒尺寸、密度、裂变率、氧金属比（O/M）和外部压力的函数。

蠕变率从相应力线性相关转变为指数 n 相关的是和转变应力相关的。转变应力的定义如下：

$$\sigma_t = \frac{1.6547 \times 10^7}{G^{0.5714}}$$

其中， σ_t (Pa) 是转变应力， $G(\mu m)$ 是燃料晶粒尺寸。

蠕变函数依赖于 Arrheius 模型的活化能，活化能发现是氧金属比 O/M 的函数。增加氧金属比，蠕变率会增加。 UO_2 的活化能具体形式：

$$Q_1 = 17884.8 \left\{ e^{\left(\frac{-20}{ln(x-2)} - 8 \right)} + 1 \right\}^{-1} + 72124.23$$

其中， Q_1 (cal/mol) 是在转变应力之下活化能， x 是氧金属比 O/M。

转变应力之后的活化能计算：

$$Q_2 = 19872 \left\{ e^{\left(\frac{-20}{ln(x-2)} - 8 \right)} + 1 \right\}^{-1} + 111543.5$$

其中 Q_2 (cal/mol) 是转变应力之后的活化能。

稳态下的 UO_2 的蠕变率使用：

$$\dot{\epsilon} = \frac{(A_1 + A_2 \dot{F}) \sigma e^{\left(-\frac{Q_1}{RT} \right)}}{(A_3 + D) G^2} + \frac{(A_4 + A_8 \dot{F}) \sigma^{4.5} e^{\left(-\frac{Q_2}{RT} \right)}}{A_6 + D} + A_7 \sigma \dot{F} e^{\left(-\frac{Q_3}{RT} \right)}$$

其中， $\dot{\epsilon}(s^{-1})$ 是稳态的蠕变率， $A_{1\sim 4}, A_{6\sim 8}$ 是常数，分别是 $0.3919, 1.3100 \times 10^{-19}, -87.7, 2.0391 \times 10^{-25}, -90.5, 3.72264 \times 10^{-35}, 0$ ， \dot{F} (fission/m² · s) 是裂变率， σ (Pa) 是应力， R (J/mol · K) 气体常数， T (K) 温度， D 理论密度百分比， G (μm) 是晶粒大小， Q_3 (J/mol) 2.6267×10^3 。

^① 考虑高温下辐照蠕变更大，因此认为参考文献错误，此处 Q_3 前面应该有负号。

BISON 中采用 MATPRO 的模型和 Halden 蠕变模型, 主要处理蠕变率中第三项(低温蠕变), 原始的 MATPRO 公式中此项包含温度。仔细查看 MATPRO 中的参考文献, 可以清楚看到, 这种低温依赖性仅涉及一项非常有限的实验数据^[2]。此外, 根据早期的研究仅适用相对较窄 (523K < T < 773K)。其他的研究, 包括早期[3-6] 和近期[7-9] 的研究, 均未观察到低温辐照蠕变的温度依赖, 但是报告了蠕变速率仅与应力裂变率有关。因此在 BISON 中的 UO_2 稳态蠕变替换第三项为广泛使用的 Halden^[8]辐照蠕变模型, 具体的形式是:

$$\dot{\epsilon}_{irr} = A_7 \dot{F} \sigma$$

其中 $A_7 = 7.78 \times 10^{-37}$ 。

稳态下的 MOX 燃料蠕变率使用:

$$\dot{\epsilon}_s = \frac{B_1 + B_2 \dot{F}}{G^2} \sigma \exp\left(-\frac{Q_3}{RT} + B_3(1 - D) + B_4 C\right) + (B_5 + B_6 \dot{F}) \sigma^{4.5} \exp\left(-\frac{Q_4}{RT} + B_7(1 - D) + B_8 C\right)$$

其中, $B_1 \sim B_7$ 是常数, 分别是 $0.1007, 7.57 \times 10^{-20}, 33.3, 3.56, 6.469 \times 10^{-25}, 0, 10.3, Q_3 = 55354.0, Q_4 = 70451.0$, C 是 PuO_2 的质量分数, 除去 D 变为质量分数 ($D < 1$) 其他值和之前提到的一样。

特别注意, 上面模型存在笔误, 根据 Bison 报告^[10]和网站上对该模型的描述, 通过比较, 最终 MOX 的蠕变模型采用如下形式:

$$\dot{\epsilon}_s = \frac{B_1 + B_2 \dot{F}}{G^2} \sigma \exp\left(-\frac{Q_3}{T} + B_3(1 - D) + B_4 C\right) + (B_5 + B_6 \dot{F}) \sigma^{4.5} \exp\left(-\frac{Q_4}{T} + B_7(1 - D) + B_8 C\right)$$

其中的系数也有细微差别。 $B_1 \sim B_5, B_7$ 分别是 $0.1007, 7.57 \times 10^{-20}, 33.3, 0.014, 6.469 \times 10^{-25}, 0, 10.3, Q_3 = 50327.1, Q_4 = 70458.0$ 。

对于上述的 UO_2 和 MOX 燃料, MATPRO 模型规定, 当施加应力小于过度应力的时候, 施加应力 (这里认为是 von Mises) 代入方程的第一项 σ , 第二项幂律贡献为 0; 如果大于转变应力, 则方程第一项采用转变应力 (σ_t), 第二项幂律关系用施加应力 (这里认为是 von Mises)。但是 Mai 等人的研究了 MATPRO 的过渡方法并与实际实验数据进行了比较, 得出的结论: 忽略过度应力, 并在所有的情况下同时使用低应力项和高应力项, 可以更好的拟合数据。

对于 MOX 燃料, 当第一次经历应力, 或者是施加的最高应力高于其他时间步长, 应变率是时间相关的^[11], 具体公式如下:

$$\epsilon_T = \epsilon_S [2.5e^{(-1.4 \times 10^{-6}t)} + 1]$$

其中, ϵ_T (S^{-1}) 是总应变速率, $\epsilon_S(s^{-1})$ 是稳态下求解出来的应变率, t (s) 是施加最大应力以来的时间。

Bison 中给出的 MOX 蠕变的公式如下:

$$\dot{\epsilon}_{cr} = (1 + a \exp(-b \cdot t)) \cdot \dot{\epsilon}_s$$

其中

$$\dot{\epsilon}_s = \frac{B_1 + B_2 \dot{F}}{G^2} \sigma \exp\left(-\frac{Q_3}{T} + B_3(1 - D) + B_4 C\right) + B_5 \sigma^{4.5} \exp\left(-\frac{Q_4}{T} + B_7(1 - D) + B_4 C\right) + A \sigma \dot{F}$$

其中 T (K) 温度, D (理论密度分数) 燃料密度分数, σ (Pa) 有效应力, \dot{F} ($m^{-3} \cdot s^{-1}$) 裂变率, G (μm) 晶粒尺寸, C (wt.%) 是 PuO_2 质量分数。

在国际单位制下:

$$a = 2.5$$

$$b = 1.40 \times 10^{-6}$$

$$A = 4.78 \times 10^{-36}$$

$$B_1 = 0.1007$$

$$B_2 = 7.57 \times 10^{-20}$$

$$B_3 = 33.3$$

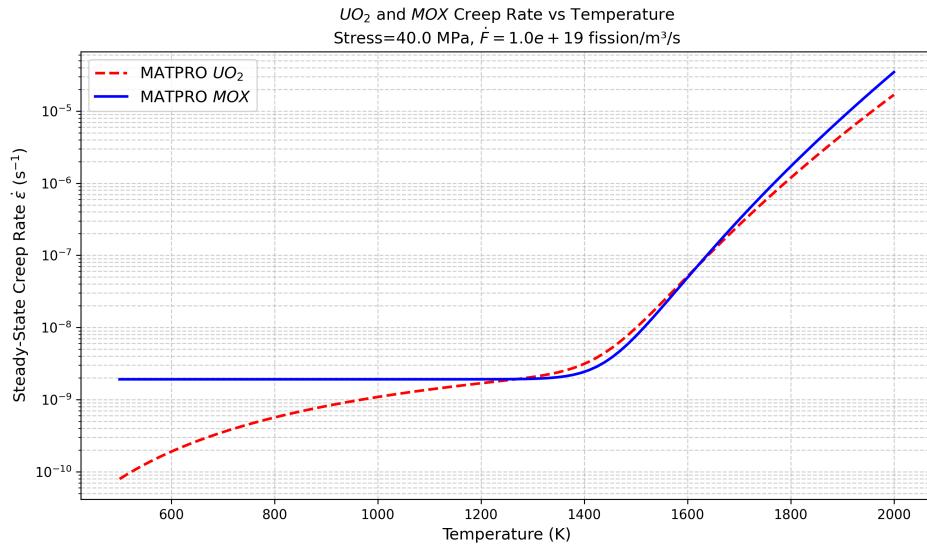
$$B_4 = 0.014$$

$$B_5 = 6.4691 \times 10^{-25}$$

$$B_7 = 10.3$$

$$Q_3 = 55354.0$$

$$Q_4 = 70451.0$$



2.3.4 密实化

UO_2 和 $(U, Pu)O_2$ 在压水堆开始的几个小时之后发生的由于辐照导致的密实化。密实化是燃料、温度和初始密度的函数。模型是基于少量的压水堆静水压数据。密实化可能是由于芯包接触导致的静水压发生变化，在之后也会提到。两个模型描述了相同的物理过程，计算结果更大的密实化用于程序计算。

如果在辐照的最初的 1000 小时内，燃料密实化远大于膨胀，那么，对于第一近似，在此期间膨胀可以忽略。建议在这种给出的密实化模型和膨胀模型结合。

最大变化密度可以来自两个方法，一种是直接在实验中进行再烧结实验（超过 24 小时的 1973K）观察密度的变化，另一种是通过初始未辐照的燃料密度和燃料制造烧结的温度进行计算。

如果输入最大密度变化值（非零）：

当 $FTEEMP < 1000K$,

$$\left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m = -(0.0015)RSNTR$$

当 $FTEEMP > 1000K$,

$$\left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m = -(0.00285)RSNTR$$

如果没有给最大密度变化值：

当 $FTEEMP < 1000K$,

$$\left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m = -\frac{22.2(100 - DENS)}{(TSINT - 1453)}$$

当 $FTEEMP > 1000K$,

$$\left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m = -\frac{66.6(100 - DENS)}{(TSINT - 1453)}$$

其中: $\left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m$ (百分比) 由于辐照导致的燃料最大的尺寸变化, $RSNTR$ (kg/m^3) 是重烧燃料密度变化, $FTEMP$ (K) 是燃料温度, $DENS$ (百分比) 理论密度, $TSINT$ (K) 烧结温度。

燃料导致的密实化计算公式:

$$\frac{\Delta L}{L} = \left(\frac{\Delta L}{L} \right)_m + e^{1-3(FBU+B)} + 2.0e^{1-35(FBU+B)}$$

其中: $\frac{\Delta L}{L}$ (百分比) 尺度变化, FBU (MWd/kgU) 燃耗, B 是满足当 $FBU = 0$, $\frac{\Delta L}{L}$ 接近 $\frac{\Delta L}{L}$ 的常数, 可以考虑一个比较大的数字。

BISON 中使用的密实化模型书是 ESCORE 的经验关系式:

$$\epsilon_D = \Delta\rho_0 \left(e^{\frac{Bu_D(0,01)}{C_DB_u}} - 1 \right)$$

其中 ϵ_D 是密实化导致的应变, $\Delta\rho_0$ 是整个密实化的密度变化 (理论密度的百分数); Bu 是燃耗, Bu_D 是完成密实化的燃耗。低于温度 750K C_D 的表达式是 $7.2 - 0.0086(T - 25)$, 高于 750K , 是 1; 为了消除不连续性, BISON 中使用在低于 750K 时候 $7.2 - 0.0086(T - 25)$ 。

2.3.5 肿胀

肿胀是因为燃烧过程中固体裂变产物和气体裂变产物。

固体裂变产物导致的肿胀使用:

$$S_s = 2.5 \times 10^{-29} B_s$$

其中: S_s (m^3/m^3) 是由于固体裂变产物导致的肿胀, B_s (fission/ m^3) 是一个时间步的燃耗。

在温度低于 2800K 时, 气体裂变产物导致的肿胀是:

$$S_g = 8.8 \times 10^{-56} (2800 - T)^{11.73} e^{1-0.0162(2800-T)} e^{1-8.0 \times 10^{-27} B |B_s|}$$

其中： $S_g (m^3/m^3)$ 是由于气体裂变产物导致的肿胀， $T (K)$ 温度， $B (\text{fission}/m^3)$ 是整个燃耗。

当温度大于 2800K，气体导致的肿胀是 0，因为假设 2800K 之后裂变气体全部释放。

BISON 中说也采用了 MATPRO 中的模型，但是给出的形式不完全相同，具体形式是：

$$\Delta\epsilon_{sw-s} = 5.577 \times 10^{-5} \rho \Delta Bu$$

其中 $\Delta\epsilon_{sw-s}$ 是由于固体产物导致的体积的肿胀， ΔBu （裂变率每原子 U）是燃耗的增量， $\rho (kg/m^3)$ 是密度。

气体导致的肿胀：

$$\Delta\epsilon_{sw-g} = 1.96 \times 10^{-31} \rho \Delta Bu (2800 - T)^{11.73} e^{-0.0162(2800-T)} e^{-0.0178\rho Bu}$$

其中的 $\Delta\epsilon_{sw-g}$ 表示气体产物导致的增量， Bu 和 ΔBu （裂变率/原子 U）是燃耗和燃耗增量， $\rho (kg/m^3)$ 表示密度， $T (K)$ 是温度。

2.3.6 压力烧结

氧化物燃料在高静水压（压力烧结）、高温度（热烧结）和辐照条件下会密实化。MATPR 中模型的根据推外的压力烧结实验数据。压力烧结模型补充了之前辐照密实化模型。

燃料在堆内的密实化过程是温度、应力和辐照的函数。热烧结和压力烧结机理是压力驱动的，具体形式是：

$$P = P_e - P_i + 2\gamma/a$$

其中： $P_e (Pa)$ 是外部静水压， $P_i (Pa)$ 是内部空隙压力， $\gamma (J/m^2)$ 是单位面积的表面能， $a (m)$ 晶粒尺寸。

压力烧结是主要的密实化过程，因为在反应堆中 P_e 相比另外几项更大。只有在 P_e 等于 0 的时候，其他两项才有影响，但是都非常小，所以 MATPRO 中不考虑后面两项。

上面没有包含辐照导数的应力变化。假设辐照密实化是可以直接想加到等式的右

边。因为辐照密实化对应力的影响是线性的，所以独立对待。

根据 Solomon 的 UO_2 实验数据拟合的晶格扩散蠕变方程如下：

$$\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} = 48939 \left(\frac{1-\rho}{\rho} \right)^{2.7} \frac{P}{TG^2} e^{-\frac{Q_u}{RT}}$$

其中： ρ 理论密度分数， t (s) 时间， P (Pa) 静水压， T (K) 温度， G (μm) 晶粒尺寸， Q_u (J/mol) 活化能， $R = 8.314(J/mol \cdot K)$ 。 UO_2 的活化能跟氧金属比 (O/M) 相关：

$$Q_u = R \left(\frac{9000}{e^{\left(\frac{20-81 \log(x-1.999)}{\log(x-1.999)} \right) + 1.0}} + 36294.4 \right)$$

其中 x 是氧金属比。

根据 Roubort 的 MOX 实验结果拟合的晶格扩散变方程如下：

$$\frac{1}{\rho} \frac{dp}{dt} = 1.8 \times 10^7 \left(\frac{1-p}{\rho} \right)^{2.25} \frac{P}{TG^2} e^{-\frac{48000}{RT}}$$

每种的标准差均是 $\pm 0.5\%$ 。

模型的使用范围是 1600-1700K，静水压 2-6MPa。超过范围，使用的时候需要格外小心。

2.3.7 重构

随着反应堆运行，燃料的形态和结构也会发生变化。这些变化是时间、温度、燃料和能量密度。结构的改变影响燃料热导率、燃料膨胀、裂变气体释放和燃料蠕变。辐照燃料的结构可以分为四类：制造中未重构的燃料，等轴晶粒（有较大的边长大或相同的放大的燃料晶粒），长轴平行于径向功率温度梯度的柱状晶粒，以及由于燃料晶粒组成的破碎或者烧结的晶粒（这些晶粒在高功率瞬变期间断裂而没有与其他晶粒结合）。

MATPRO 中的模型主要计算等轴晶粒尺寸、柱状晶粒尺寸以及正常或者瞬态反应堆运行期间燃料的破碎区域。

晶粒生长是晶界的曲率或者温度梯度，晶粒生长速度受到晶界处的杂质移动的影响。由于杂质和迁移的机理可能相同，所以模型适用于 UO_2 和 $(U, Pu)O_2$ 。

等轴晶粒生长模型：

$$g = \left(\frac{1.0269 \times 10^{-13} t e^{-\frac{35873.2}{T}}}{(1.0 + 5.746 \times 10^{-6} B)^2 T} + g_0 \right)^{1/4}$$

其中: g (m) 时间步结束之后的晶粒尺寸, g_0 (m) 开始时间步的晶粒尺寸, t (s) 迭代时间, T (K) 温度, B (MW/kg) 燃烧。

根据实验数据的标准差是 $\pm 8.4 \times 10^{-6}$ (m)。

柱状晶粒是在透镜状(大透镜状)孔之后形成的, 随着温度梯度在燃料中移动, 表达式是:

$$V = \frac{49.22 \nabla T e^{-\frac{4800}{T}}}{T^2}$$

其中: V (m/s) 是气泡的移动速度, ∇T (k/m) 温度梯度, T (K) 是温度。

柱状晶粒的形成是阈值温度和温度梯度。阈值温度和时间、温度和温度梯度组合定义的, 这些条件在一个时间步之内使得晶界或者气泡移动到颗粒直径的十分之一(大约是 0.0005m)。柱状晶粒长轴是时间步长内孔隙迁移的长度或者到颗粒中心距离中较小的。如果一个时间步内迁移距离小于 0.0005m, 则不会产生柱状晶。如果在这一步之前产生了柱状晶, 这一步没有产生, 柱状晶仍然保持之前的状态; 如果这一时间步产生柱状晶, 则柱状晶的长度应该是这一步迁移距离和计算点到燃料中心距离两者中的比例的小的那个值。

破碎燃料的形成是通过一个整数 $NSHATR$ 表示, 如果破碎, 则表示为 1, 如果没有破碎, 则表示为 0。

如果 $E > E_D$ 和 $T < T_m$ 同时柱状晶粒没有生成。

$NSHATR = 1$ 。

如果 $E < E_D$ 或者 $T > T_m$ 或者柱状晶粒已经生成。

$NSHATR = 0$ 。

其中: E (J/m³) 是瞬态周期沉积的能量, E_0 (J/m³) 是在晶界处断裂所需要的能量, T_m (K) 燃料的熔化温度, T (K) 燃料的温度。

晶界上断裂所需要的能量通过下式计算:

$$E_0 = \frac{8.64 \times 10^{-14}}{g} (T - 1673)$$

2.3.8 断裂强度

MATPRO 中计算 UO_2 的断裂强度模型是燃料温度和百分比密度的函数。模型的温度最高是 1000K，是根据堆内的实验数据，对于高于 1000K 的温度，断裂强度认为是常数。

$$\sigma_F = \begin{cases} 1.7 \times 10^8 [1 - 2.62(1 - D)]^{1/2} e^{-\frac{1800}{RT}}, & 273 < T \leq 1000K \\ & \end{cases}$$

其中， σ_F (Pa) 断裂强度， D 是理论密度分数， T (K) 温度。

2.3.9 粘性

粘性是模拟地壳损坏期间固有所需的重要参数之一。MATPRO 中不考虑偏离化学计量和 UO_2 固体液体共存温度，同时也不考虑熔融 UO_2 的污染。

粘性的计算方程根据温度不同分为三个部分，第一部分低于 UO_2 的熔点， UO_2 的固液混合状态，完全的液态。完全的液态时侯的的粘性：

$$\eta_e = 1.23 \times 10^{-2} - 2.09 \times 10^{-6}T$$

其中， η_e (Pa · s) 液体动态粘度， T (K) 温度，固态下的 UO_2 ，粘度表达式是：

$$\eta_s = 1.38 e^{(4.942 \times 10^4 / T)}$$

其中， η_s (Pa · s) 低于熔点的动态粘度。如果温度处于固液混合区间，粘性的计算方式：

$$\eta = \eta_s(1 - f) + \eta_e f$$

其中， η (Pa · s) 是固液混合的动力粘度， f (无单位) 是燃料中液态占比。模型的不确定性是：

$$U = \eta A (1 + |\gamma - 2|)$$

其中， U (Pa · s) 是预估的不准确性， A 是常数，低于熔点是 0.67；高于熔点是 0.33， Y 是燃料的氧金属比。

2.3.10 蒸气压

在非常高的温度下，反应堆燃料中会产生蒸汽等于或者超过气腔气体或者裂变气体的压力。这些压力会影响导致包壳失效，由于蒸发的不一致（气体组成与燃料的成份不同）可能导致燃料的体积显著发生变化。燃料蒸汽包含的成分非常多。MATPRO 的模型确定轴、环和混合氧化物的铜系元素蒸汽和氧蒸汽压，是燃料中氧金属比和温度的函数。

对于轴：

$$\log_{10}^P = -11191/T + 9.9932 \ln(T) - 0.00132T - 69.174$$

误差是： $SOE(\log_{10}) = \pm 0.206$

对于环：

$$\log_{10}(P) = (-5404.1 + 6854.6x)/T + 18.166 \ln(T) - 0.003389T - 130.65$$

误差是： $SOE(\log_{10}) = \pm 0.559$

其中： P (Pa) 是蒸气压， X 是偏移化学计量 ($O/M - 2$)， T (K) 温度。轴的蒸气压在所有的氧金属比条件下都是可用的。环的蒸气压在低化学计量的时候采用后者，因为在环或者混合氧化物燃料中不太可能是超化学计量比的。混合氧化物蒸气压使用各自成份的质量分数，乘以对应的蒸气压。

对于氧 [$Pu(O_2), Pu(0)$] 或者 U_1 的蒸气压采用类似的方法：

$$\log_{10}(P(O_2)) = \begin{cases} -14638.2/T + 21.775x + 6.2062, & O/M > 2.004 \\ -(49535 + 1418.11nx)/T + 15.181, & O/M < 1.99 \\ -\frac{14638}{T} + 1.8036 \ln(x + 0.004) + 6.2933, & 1.999 < O/M < 2.004 \end{cases}$$

其中： $P(O_2)$ 是动态氧分压。随着接近化学剂量，氧分压迅速减少，使用下式计算：如果 $-52708/T + 23.32 \leq \log_{10}P(O_2)$,

$$\log_{10}(P(O_2)) = -52708/T + 23.32$$

如果 $-52708/T + 23.32 < \log_{10}P(O_2)$, 仍然采用 1.999-2.004 范围内的结果。

2.3.11 燃料氧化

MATPRO 中的燃料氧化模型是计算在高于 1150K 的吸氧量，使用抛物线动力学建模， UO_2 的氧化影响了化学成份，进而影响燃料的其他的材料属性。

模型方程如下：

$$W^2 = 24.4e^{-\frac{26234}{T}} \Delta t + W_0^2$$

其中： $W(\text{kg}/\text{m}^2)$ 当前时间步结束之后的氧化重量的增加， $T(\text{K})$ UO_2 表面的温度， $\Delta t(\text{s})$ 氧化的时间， $W_0(\text{kg}/\text{m}^2)$ 初始氧化重量的增加。模型的标准差在 $0.027(\text{kg}/\text{m}^2)$ 。

氧化产生的功率如下：

$$P = \frac{(W - W_0)(1.84 \times 10^5)}{\Delta t}$$

其中 $P(\text{W}/\text{m}^2)$ 是热功率。

2.4 间隙换热

在核燃料棒的热工水力分析中，间隙换热是一个至关重要的物理过程。燃料芯块与包壳之间存在微小间隙，其传热特性直接影响燃料温度分布和核安全。本报告^①基于 BISON 燃料性能分析程序和 MATPRO 材料属性库，详细阐述间隙换热的物理模型、数学描述和数值实现方法。

间隙换热采用多机制耦合的建模方法，总传热系数由三个主要部分组成：

$$h_{\text{gap}} = h_g + h_s + h_r$$

其中： h_{gap} ：间隙总传热系数 ($\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$)； h_g ：气体传导系数，描述气体分子传热； h_s ：固-固接触传导系数，考虑表面粗糙度导致的直接接触传热； h_r ：辐射传热系数，考虑热辐射效应。

这种多机制耦合的方法能够全面描述从接触压力变化到温度变化的复杂物理过程。

2.4.1 气体传导系数 h_g 的详细模型

气体传导系数采用 Ross 和 Stoute 提出的经典模型：

^① 虽然本报告是关于快堆，但是此部分采用的压水堆的研究结果

$$h_g = \frac{k_g}{d_g + C_r(r_1 + r_2) + g_1 + g_2}$$

该模型将气体传热视为串联热阻网络：其中， k_g ：气体混合物的温度相关热导率（W/m·K）； d_g ：几何间隙尺寸，由力学求解器计算得到； C_r ：表面粗糙度系数，无量纲； r_1, r_2 ：两个接触表面的粗糙度（m）； g_1, g_2 ：温度跳跃距离（m），考虑稀薄气体效应。

1) d_g

d_g 间隙尺寸 d_g 根据几何构型采用不同的计算方法：

平板几何： $d_g = \text{间隙宽度}$

$$\text{圆柱几何}：d_g = r \cdot \ln\left(\frac{r_2}{r_1}\right)$$

$$\text{球体几何}：d_g = r^2 \cdot \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}\right)$$

其中 r_1 和 r_2 分别为内外半径， r 为平均半径。

2) 温度跳跃距离模型 ($g_1 + g_2$)

Temperature Jump Distance Model ($g_1 + g_2$)

温度跳跃距离 ($g_1 + g_2$) 表征壁面处气体温度与壁面温度之间的不连续性差异。目前提供两种基于 Kennard 理论的建模方法：

(1) LANDING 模型

基于 Laming 和 Hann 的综述，温度跳跃距离计算如下：

$$g_1 + g_2 = 5376 \left(\frac{2 - \alpha_{\text{mix}}}{\alpha_{\text{mix}}} \right) \left(\frac{k_g \sqrt{T_g}}{P} \right) \left(\sum_{i=1}^{10} \frac{f_i}{M_i} \right)^{-1/2} \quad (2-1)$$

其中： $g_1 + g_2$ 单位为 cm， k_g 为气体热导率单位 $\frac{\text{cal}}{\text{cm} \cdot \text{K} \cdot \text{s}}$ ， P 为压力单位是 $\frac{\text{dynes}}{\text{cm}^2}$ ， f_i 为第 i 种气体的摩尔分数， M_i 为第 i 种气体的分子量， α_{mix} 为气体混合物的热适应系数， T_g 取两表面温度的平均值。

(2) TORTEX 模型

基于 Toptan 等人的改进，针对平板、圆柱和球体几何形状：

$$g = \frac{\sqrt{8\pi}}{(1+\gamma)\nu} \frac{k_g}{P\Lambda_{12}} \sqrt{\frac{T}{R_g M}} \quad (2-2)$$

几何修正因子 Λ_{12} 的计算方法为：

$$\Lambda_{12} = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_1 \alpha_2} \quad (\text{平板}) \quad (2-3)$$

$$\Lambda_{12} = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 + \alpha_1(1 - \alpha_2) \left(\frac{r_1}{r_2}\right)} \quad (\text{圆柱}) \quad (2-4)$$

$$\Lambda_{12} = \frac{\alpha_1 \alpha_2}{\alpha_2 + \alpha_1(1 - \alpha_2) \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^2} \quad (\text{球体}) \quad (2-5)$$

对于相似的平面，($\alpha_1 = \alpha_2$)，此时，几何修正因子 Λ_{12} ：

$$\Lambda_{12} = \frac{1}{2/\alpha - 1} \quad (\text{平板})$$

$$\Lambda_{12} = \frac{1}{1/\alpha + (1/\alpha - 1) \left(\frac{r_1}{r_2}\right)} \quad (\text{圆柱})$$

$$\Lambda_{12} = \frac{1}{1/\alpha + (1/\alpha - 1) \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^2} \quad (\text{球体})$$

Kernnard 的系数是：

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{8\pi/R_g}}{(1+\gamma)\nu} &\approx 0.2173 \quad \text{单原子气体 (如 He、Ar 等)} \\ &\approx 0.1149 \quad \text{双原子气体 (如 N}_2\text{、O}_2\text{ 等)} \\ &\approx 0.1242 \quad \text{多原子气体 (如 H}_2\text{O 等)} \end{aligned}$$

热适应系数用于表征气固界面处的相互作用强度，反映气体分子与固体表面达到热平衡的程度。Knudsen 最早提出热适应系数的概念，并将其定义为：

$$T_i - T_r = \alpha(T_i - T_w) \quad (2-6)$$

其中， α 为热适应系数， T_r 为反射分子温度， T_i 为入射分子温度， T_w 为壁面温度。
提供两种热适应系数计算模型：

基于 MATPRO 数据库 Allison 等和 Lanning 与 Hann 的研究，氦气和氩气的热适应系数计算公式为：

$$\alpha_{\text{He}} = 0.425 - 2.3 \times 10^{-4} T \quad (2-7)$$

$$\alpha_{\text{Xe}} = 0.749 - 2.5 \times 10^{-4} T \quad (2-8)$$

对于混合气体，采用线性插值方法：

$$\alpha_{\text{mix}} = \alpha_{\text{He}} + \frac{(\alpha_{\text{Xe}} - \alpha_{\text{He}})(M_{\text{mix}} - M_{\text{He}})}{(M_{\text{Xe}} - M_{\text{He}})} \quad (2-9)$$

其中， M_{Xe} 、 M_{He} 和 M_{mix} 分别为氙气、氦气和混合气体的分子量。

另一个是，基于 Baule 的硬球碰撞理论，并采用 Goodman 和 Wachman 公式的改进形式，Toptan 等提出以下经验公式：

$$\alpha(T) = 1 - \left(1 - \alpha_{\infty} \tanh \left[\frac{\sqrt{M_g T}}{\alpha_{\infty}} \theta_1 \right] \right) \exp \left(-\frac{\theta_2}{T} \right) \quad (2-10)$$

其中， M_g 为入射气体分子量， M_s 为固体分子量（标定时取 $M_s = 1 \times 10^5 \text{ g/mol}$ ）， $\Theta = \{\theta_1, \theta_2\}$ 为系数矩阵（见表 3）， $\alpha_{\infty} = 2.4\mu/(1 + \mu)^2$ ， $\mu = M_g/M_s$ 为分子量比。

表 2-3 惰性气体热适应系数计算参数 (Toptan 等, 2019)

参数	氦	氖	氩	氪	氙
θ_1	-1.055	-0.611	0.032	0.344	0.784
θ_2	146.7	360.6	591.3	724.7	916.7

对于混合气体，Mikami 等 (1966) 基于能量平衡提出：

$$\alpha_m = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{z_{ci}}{V_{M,i}}}{\sum_{i=1}^n \frac{z_{ci}}{V_{M,i}}} \quad (2-11)$$

其中，求和遍历混合物的各个组分。

3) k_g

k_g 采用 MATPRO 模型中的混合气体热导率，总共考虑 10 中气体（氦气、氩气、氪气、氙气、氢气、氮气、氧气、一氧化碳、二氧化碳、水蒸气）。气体的温度是两个表面的平均温度。

针对混合气体的热导率，采用 MATPRO 中的混合模型，具体公式如下所示：

$$k_{mix} = \sum_i^n \frac{k_i x_i}{x_i + \sum_{j=1}^n (1 - \delta_{ij}) \Psi_{ij} x_j}$$

其中的权重系数 Ψ_{ij}

$$\Psi_{ij} = \phi_{ij} \left[1 + 2.41 \frac{(M_i - M_j)(M_i - 0.142M_j)}{(M_i + M_j)^2} \right]$$

其中二元交互系数 ϕ_{ij}

$$\phi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\frac{k_i}{k_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j} \right)^{1/4} \right]^2}{2^{3/2} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{1/2}}$$

在气体混合物热导率的计算模型中，各参数的物理意义如下： k_i 表示纯组分 i 的热导率， x_i 为组分的摩尔分数， δ_{ij} 为 Kronecker Delta 函数（当 $i = j$ 时取值为 1，否则为 0），且分母中的求和项排除了 $i = j$ 的情况（因为 $\delta_{ii} = 1$ ，故 $1 - \delta_{ii} = 0$ ）。

对于纯惰性气体和双原子气体，热导率采用幂函数形式计算：

$$k = AT^B$$

其中 A 和 B 为经验系数， T 为气体温度（K）。各气体的经验系数详见表2-4。

表 2-4 气体热导率关联式经验系数

气体	系数 A	系数 B	适用温度范围 (K)
He	2.639×10^{-3}	0.7085	73–793
Ne	9.000×10^{-4}	0.691	73–793
Ne	9.683×10^{-4}	0.685	1000–1500
Ar	2.986×10^{-4}	0.7224	73–793
Ar	4.905×10^{-4}	0.651	1000–2500
Kr	8.247×10^{-5}	0.8363	173–793
Xe	4.351×10^{-5}	0.8616	173–793
Xe	1.140×10^{-4}	0.710	1000–1500
H ₂	1.097×10^{-3}	0.8785	—
N ₂	5.314×10^{-4}	0.6898	—
O ₂	1.853×10^{-4}	0.8729	—
CO	1.403×10^{-4}	0.9090	—
CO ₂	9.460×10^{-6}	1.3120	—

对于水蒸气的热导率，采用更复杂的关联式，具体如下所示：

$$k_g = 17.6 \times 10^{-3} + T_C [5.87 \times 10^{-5} + T_C (1.04 \times 10^{-7} - 4.51 \times 10^{-11} T_C)]$$

其中 $T_C = T - 273.15$, 单位为摄氏度 (°C)。

MATPRO 中对于水蒸气热导率的计算公式更为复杂, 具体如下所示: 当 $T \leq 973.15$ K 时:

$$\begin{aligned} k_{\text{steam}} = & \left(-2.8516 \times 10^{-8} + 9.424 \times 10^{-10} T - 6.005 \times 10^{-14} T^2 \right) \frac{P}{T} \\ & + \left[17.6 + 5.87 \times 10^{-5} (T - 273) + 1.08 \times 10^{-7} (T - 273)^2 \right. \\ & \quad \left. - 4.51 \times 10^{-11} (T - 273)^3 \right] \times \frac{1.009 P^2}{T^2 (T - 273)^{4.2}} \end{aligned}$$

当 $T > 973.15$ K 时:

$$k_{\text{steam}} = 4.44 \times 10^{-6} T^{1.45} + 9.5 \times 10^{-5} \left(\frac{2.1668 \times 10^{-9}}{T} P \right)^{1.3}$$

其中: T 为气体温度 (K), P 为气体压力 (N/m^2), 热导率 k 的单位为 $\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 。

上述的关联式中, 热导率和温度相关, 校准数据也是压力小于 0.1MPa 的实验数据。但是实际上气体的热导率与压力相关, 且根据压力的不同可以分为三个区域: 低压区、中压区和高压区。

- 极低压区: $P < 0.1$ kPa, 即 Kundsen 区域, 该区域内热导率和压力几乎线性相关。
- 低压区: $P < 1\text{MPa}$, 压力对热导率的影响微乎其微。
- 高压区: $P > 1\text{MPa}$, 压力增加会导致热导率增加

考虑到这种特性, Tournieer 和 EI-Genk 将热导率表示为:

$$k_g(T, P) = k_g^0(T) + k_{g,c}^* \Psi_k \left(\frac{\rho}{\rho_{cr}} \right), \quad (2-12)$$

其中各参数定义如下:

$$k_g^0 = \left(\frac{15R_g}{4M} \right) \mu^0(T), \quad (2-13)$$

$$\mu^0 = A_\mu (T - T_\mu)^n, \quad (2-14)$$

$$k_{g,c}^* = \frac{0.201 \times 10^{-4} T_{cr}^{0.277} M^{-0.465}}{(0.291 \times V^*)^{0.415}}, \quad (2-15)$$

$$V^* = \left(\frac{R_g T_{cr}}{P_{cr}} \right), \quad (2-16)$$

$$\Psi_k = 0.645\rho_r + 0.331\rho_r^2 + 0.0368\rho_r^3 - 0.0128\rho_r^4, \quad (2-17)$$

$$\rho_r = \frac{\rho}{\rho_{cr}}. \quad (2-18)$$

各参数的物理意义如下： k_g^0 为基于动力学理论的纯稀薄气体热导率， μ^0 为纯稀薄气体的动力粘度， $k_{g,c}^*$ 为拟临界热导率， V^* 为特征摩尔体积， Ψ_k 为超额热导率， M 为分子量， ρ_r 为约化密度。 R_g 为气体常数。

表2-5 列出了 Tournier 和 El-Genk (2008) 提供的临界气体物性参数。

表 2-5 临界气体物性参数

参数	氦 (helium)	氖 (neon)	氩 (argon)	氪 (krypton)	氙 (xenon)
M (g/mol)	4.003	20.180	39.948	83.798	131.293
P_{cr} (MPa)	0.2275	2.678	4.863	5.51	5.84
T_{cr} (K)	5.2	44.5	150.69	209.4	289.7
ρ_{cr} (kg/m ³)	69.64	481.9	535.6	908.4	110.0
$A_\mu \times 10^7$	3.063	8.4528	6.989	6.963	7.568
T_μ (K)	-21.33	16.47	65.70	71.07	112.31
n	0.724	0.643	0.640	0.667	0.655

随着流体密度的增加，其行为会偏离理想气体。文献中引入了多种修正方法，从而基于宏观热力学性质和粒子相互作用得到了理想气体定律的维里展开形式。维里状态方程由下公式表示。若已知气体的温度和压力，则可通过求解公式 (5) 中的三次方程来计算气体密度，并采用求根算法获得密度值。由于这是一个三次方程，可能存在三个解，其中最高的实数解被指定为气体的摩尔密度。请注意，仅当为填充气体热导率选择了“高级”选项时，才会计算气体密度。

$$\frac{P}{R_g T} = \hat{\rho} + B_2(T)\hat{\rho}^2 + B_3(T)\hat{\rho}^3,$$

其中， P 为压力 (Pa)， T 为温度 (K)， R_g 为理想气体常数 (8.314 J/mol · K)， $Z = \frac{P}{\hat{\rho}R_g T}$ 为压缩因子， $\hat{\rho} = 1/V$ 为摩尔密度， $B_i(T)$ 为第 i 维里系数，且仅为温度的函数。

对于氙 (Xe)、氪 (Kr)、氩 (Ar)、氖 (Ne) 等气体，其约化维里系数可通过以下经验公式计算：

$$B_{2,r} = -102.6 + (102.732 - 0.001\theta - 0.44\theta^{-1.22}) \tanh(4.5\sqrt{\theta})$$

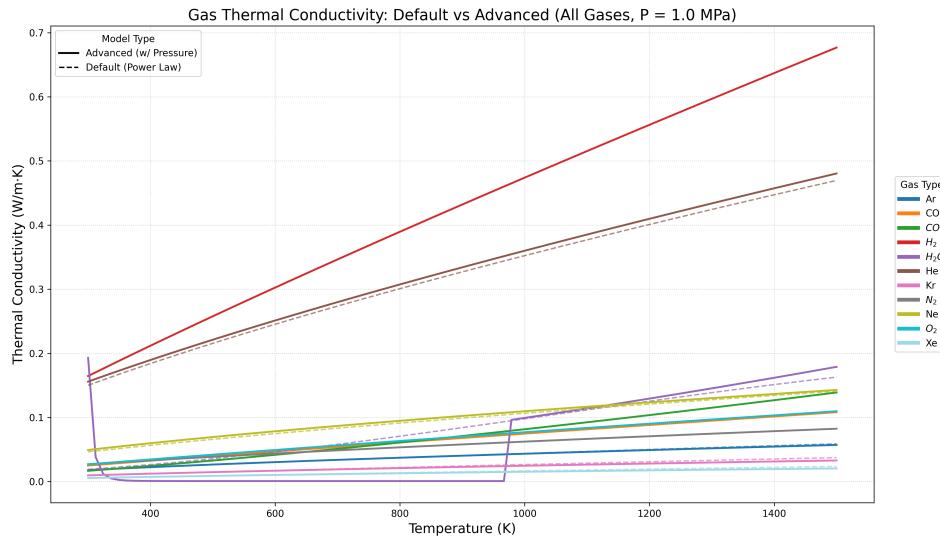
$$B_{3,r} = 0.0757 + (-0.0862 - 3.6 \times 10^{-5}\theta + 0.0237\theta^{-0.089}) \tanh(0.84\theta)$$

其中: $B_{2,r} = B_2/V^*$, $B_{3,r} = B_3/V^{*2}$ (约化系数); $\theta = T/T_{cr}$ (约化温度, T_{cr} 为临界温度)

考虑到氦气在常规条件下的稀薄气体特性, 采用简化处理方案:

$$B_2^{He}(T) = 8.4 - 0.0018T + \frac{115}{T} - \frac{858}{T}$$

由于氦气的稀薄气体行为, 其第三维里系数对状态方程的影响可忽略不计



2.4.2 固-固接触传导系数 h_s 的详细模型

当两个固体表面发生部分或完全接触时, 需引入附加项以描述界面处的热量传递。该界面热阻被称为收缩电阻 (或接触电阻) R_c , 其定义为:

$$R_c = \frac{\Delta T_c}{(q/A)} = \frac{1}{h_c A} \quad (2-19)$$

其中, q 为热流率, ΔT_c 为克服接触热阻所需的温降, A 为表观接触面积。

该问题的理论研究始于 Kottler (1927) 对电导体的类比分析。Maxwell (1954) 指出温度差在热流中的角色类似于电势在电流理论中的角色。Holm (1958) 在此基础上, 求解了半无限大物体平面上半径为 r_a 的等温圆形接触区的热收缩电阻, 结果为 $R_c = 1/(4r_a k)$; 对于两个相同的半无限物体, 总收缩电阻为 $R_c = 1/(2r_a k)$ 。Clark 与 Powell (1962) 推导了两个不同材质的半无限物体通过圆形接触区域的总收缩电阻:

$$R_c = \left(\frac{1}{4r_a k_1} + \frac{1}{4r_a k_2} \right) = \frac{1}{2r_a k_m} \quad (2-20)$$

若假设理想的接触几何形态，特定区域内 n_a 个固体接触点的总并联电阻可近似为 $R_c = 1/(2r_a k_m n_a)$ (Clausing and Chao, 1965)。一旦表观面积已知，即可通过近似收缩电阻估算接触导热系数。

接触面积的分析至关重要。Archard 指出，当变形为纯弹性时，接触面积 $A_a \propto KW^{2/3}$ ，其中 K 为取决于局部曲率半径和材料弹性常数的常数。而当微凸体发生塑性变形时，接触面积与 $A_a \propto W/p_m$ 相关， p_m 为较软材料的流动压力或硬度 (Archard, 1953; 1957)。表观面积与真实接触面积之间的关系可概括为：

$$\frac{A_a}{A} \propto \left(\frac{W}{H}\right)^n \quad (2-21)$$

其中， W 为接触界面载荷（即接触压力）， H 为较软材料的迈耶硬度， n 为偏离弹性变形的指数（例如， $n = 0$ 为弹性， $n = 1$ 为塑性）。

由于实际接触面积几乎与载荷成正比 (Bowden and Tabor, 1950)，早期的热接触模型普遍采用塑性变形机制。将总接触面积 $A_a = \pi r_a^2 n_a$ 代入式 (2-21) 可得接触导热系数：

$$h_c = \frac{2r_a k_m n_a}{A_a} = C \frac{k_m}{r_a} \left(\frac{W}{H}\right) \quad (2-22)$$

由于接触形状、表面微凸体变形及接触点数量难以精确测定，在核燃料性能建模中常使用近似的间隙闭合关系。Ross-Stoute 模型 (Ross and Stoute, 1962) 是一个常用的固体接触模型，其中 r_a 作为表面粗糙度 ϵ 的函数被引入关联式。BISON 中的默认模型是该关联式的修改版本：

$$h_c = C \frac{k_m}{\delta} \left(\frac{P_c}{H}\right) \quad (2-23)$$

其中， C 为经验常数， k_m 为接触固体材料的等效热导率， P_c 为接触压力， δ 为平均气膜厚度（近似为 $0.8(\epsilon_1 + \epsilon_2)$ ）， H 为较软材料（即包壳）的迈耶硬度。根据钢与铝接触的测量结果，Ross 与 Stoute (1962) 推荐 $C = 10 \text{ m}^{-1/2}$ ，此值为 BISON 中的默认值。迈耶硬度的默认值为 680 MN/m^2 。此外，程序中也可选用以下与温度相关的关联式 (Hagermann et al., 1980)：

$$H(\text{N/m}^2) = \exp(26.034 - 2.6394 \times 10^{-2}T + 4.3502 \times 10^{-5}T^2 - 2.5621 \times 10^{-9}T^3) \quad (2-24)$$

作为可选功能，燃料-包壳界面处的化学相互作用层可在接触项中加以考虑。基于实验工作 (Kim, 2010)，在燃料-包壳接触期间考虑 U_zO_{2-x} 层的生长，并通过抛物线规

律描述：

$$\frac{dS^2}{dt} = G \quad (2-25)$$

其中， S (m) 为层厚度， $G = 4 \times 10^{-18} \text{ m}^2/\text{s}$ (Kim, 2010) 为抛物线生长速率。式(18)通过下式数值求解：

$$S_i = \sqrt{G\Delta t + S_{i-1}^2} \quad (2-26)$$

其中， S_i 为当前时间步的层厚度(m)， S_{i-1} 为前一时间步的层厚度(m)， Δt 为时间增量(s)。该化学相互作用层假定按其厚度填充燃料和包壳的粗糙度，从而有效减小式(17)中的 ϵ_1 和 ϵ_2 ，改善传热。

2.4.3 辐射传热系数 h_r 的详细模型

1) Stefan-Boltzmann 定律与线性化

Stefan-Boltzmann Law and Linearization 基于 Stefan-Boltzmann 定律：

$$q_r = \sigma F_e (T_1^4 - T_2^4)$$

为便于数值计算，采用线性化近似：

$$q_r \approx h_r (T_1 - T_2)$$

推导得到辐射传热系数：

$$h_r \approx \frac{\sigma F_e (T_1^4 - T_2^4)}{T_1 - T_2} = \sigma F_e (T_1^2 + T_2^2)(T_1 + T_2)$$

2) 发射率函数

Emissivity Function 对于无限大平行平板构型：

$$F_e = \frac{1}{1/\epsilon_1 + 1/\epsilon_2 - 1}$$

其中 ϵ_1 和 ϵ_2 为两表面的发射率。

2.5 裂变气体

在核反应堆燃料元件的服役过程中，裂变气体的行为是决定燃料棒热力学性能和安全裕度的关键因素之一。氧化物核燃料（如 UO_2 或 MOX^①）在发生核裂变反应时，会产生大量的裂变产物。其中，惰性气体氙（ Xe ）和氪（ Kr ）约占总裂变产物的 15%。由于这些惰性气体原子在燃料晶格中的溶解度极低，它们倾向于从晶格中析出，形成气泡或释放到燃料棒自由体积中。

裂变气体的行为对燃料棒的安全性主要体现在以下两个方面：

1. **热学影响：**裂变气体释放（Fission Gas Release, FGR）进入燃料棒的包壳气隙（Gap）和顶部气腔，会显著降低填充气体的导热系数。这会导致燃料芯块表面温度升高，进而通过正反馈机制进一步促进气体的扩散与释放。
2. **力学影响：**滞留在燃料基体内部的气体原子会聚集形成气泡。气泡在高温和低静水压力下会发生显著的体积膨胀，导致燃料发生气态肿胀（Gaseous Swelling）。肿胀会加速芯块与包壳间隙的闭合，并在后期引发芯块-包壳机械相互作用（PCMI），可能导致包壳破损。

随着核燃料技术向高燃耗和高性能方向发展，深入理解裂变气体在微观尺度的演化机制（如高燃耗结构形成、氦气行为等）变得愈发关键。建立一套基于物理机制（Physics-based）的数学模型，准确描述气体在晶内及晶界的输运过程，是本研究的核心内容。

控制裂变气体肿胀和释放动力学的基本物理过程是一个跨尺度的复杂系统。燃料中的气体演化可概括为以下几个物理阶段：

1. **生成与晶内扩散：**气体原子在晶粒内部通过裂变产生。在高温驱动下，单原子在晶格中进行热扩散。
2. **晶内捕获与再溶解：**在扩散过程中，气体原子易被晶内缺陷（如空位簇、位错）或纳米级气泡捕获（Trapping）。同时，高能裂变碎片的轰击会将气泡中的原子重新打回晶格中（Re-solution）。这种动态平衡决定了向晶界扩散的有效通量。此外，值得注意的是，晶内纳米气泡对总体积肿胀的贡献通常远小于晶界气泡（在燃耗低于 45 GWd/t 时尤为显著）
3. **晶界积聚与气泡生长：**气体原子扩散至晶粒边界（Grain Boundary）后，虽然少部分会被辐照再次再溶解回晶内，但绝大多数会聚集并形成微米级气泡。由于持续的气体流入，这些气泡通常处于高内压的“非平衡态”。这种气泡过压作为

^① 本章所述的物理模型及基础参数主要源自二氧化铀（ UO_2 ）的实验数据与理论推导。考虑到混合氧化物燃料（MOX）与 UO_2 具有相似的萤石结构及物理化学性质，其裂变气体行为的基本物理机制（如扩散、捕获、晶界演化等）是通用的。在 MOX 燃料性能分析中，通常采用这套物理框架，并根据需要对特定参数（如扩散系数、氦气生成率）进行修正。本研究采用该通用物理模型作为分析基础。

热力学驱动力，促使气泡吸收空位以降低自由能，从而导致气泡体积显著增长并引发晶界肿胀。

4. **连通与释放：**随着晶界气泡的生长和合并，它们最终会在晶面上形成相互连通的“隧道网络”。当网络贯通至自由表面时，气体便从晶界释放到燃料棒外部。

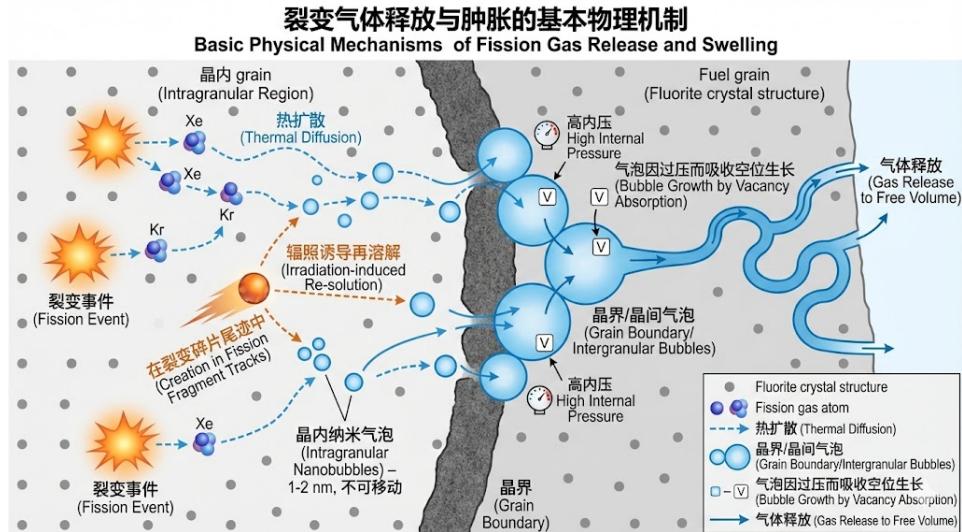


图 2-1 裂变气体在核燃料中的行为示意图^[12]

2.5.1 晶内气体行为模型

1) 单原子扩散与气泡行为模型

Single Atom Diffusion and Bubble Behavior Model 关于空间问题，晶粒内扩散采用经典的 Booth 方法处理，即假设半径为 a 的球形晶粒。根据 Speight 最初提出的近似，我们求解总晶粒内气体浓度，该浓度由单原子气体浓度 c_1 和被捕获在晶粒内气泡中的气体浓度 m 之和给出：

$$\frac{\partial}{\partial t}(c_1 + m) = \frac{b}{b+g} D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} (c_1 + m) + yF \quad (2-27)$$

其中 D 是单原子扩散系数（表格2-6）， g 是气体原子被捕获到气泡中的速率（表格2-7）， b 是辐照诱导的气体原子从气泡重溶回到晶格中的速率（表格2-8）， y 是裂变气体的裂变产额， F 是裂变率， r 是球形晶粒内的径向坐标， t 是时间。 $\alpha/(\alpha + \beta)D$ 被称为有效扩散系数，解释了单原子可用于向晶界扩散的时间比例（即未被捕获在晶粒内气泡中）

2) 晶内气泡的演化与肿胀

Intragranular Gas Behavior Model 对于晶粒内气泡浓度 N_{ig} 的演化，当前模型假设气泡以成核率 ν （表格2-9）形成，并因辐照诱导的再溶解而被破坏。因此， N_{ig} 的演化方

表 2-6 晶粒内单原子扩散系数 D (m^2s^{-1}) 的计算模型

扩散系数模型	参考文献
常数扩散系数 (试算模型)	-
Turnbull 模型 (热扩散 + 辐照增强扩散 + 非热扩散) $D = 7.6 \times 10^{-10} \exp\left(-\frac{4.86 \times 10^{-19}}{k_B T}\right)$ $+ 5.64 \times 10^{-25} \sqrt{F} \exp\left(-\frac{1.91 \times 10^{-19}}{k_B T}\right) + 8.0 \times 10^{-40} F$	[13]
Matzke 模型 (经验 Arrhenius 形式) $D = 5.0 \times 10^{-8} \exp(-40262/T)$	[14]

表 2-7 晶粒内气体原子捕获率 g (s^{-1}) 的物理模型

捕获率模型及参数说明	参考文献
常数捕获率 (试算模型)	-
基于 Ham 理论的扩散控制捕获模型 $g = 4\pi D(R_{ig} + R_{sg})N_{ig}$ 其中: D 为晶粒内扩散系数; R_{ig} 为晶内气泡半径; R_{sg} 为气体原子有效半径; N_{ig} 为晶内气泡数密度	[15]

表 2-8 晶粒内气泡再溶解率 b (s^{-1}) 的计算模型

再溶解率模型及参数说明	参考文献
常数再溶解率 (试算模型)	-
辐照诱导再溶解模型 (Turnbull 型) $b = 2\pi\mu_{ff}(R_{ig} + R_{ff})^2 F$ 其中: $\mu_{ff} = 6.0 \times 10^{-6} \text{ m}$ 为裂变碎片径迹长度; $R_{ff} = 1 \text{ nm}$ 为裂变碎片径迹半径	[13]
经验型辐照再溶解模型 $b = 3.0 \times 10^{-23} F$	[16]
考虑氦气热再溶解的扩展模型 $b = 2\pi\mu_{ff}(R_{ig,\text{He}} + R_{ff})^2 F + \gamma$ 其中热再溶解率: $\gamma = \frac{3D_{\text{He}}k_H k_B T Z}{R_{ig,\text{He}}^2}$ $k_H = 4.1 \times 10^{24} \exp\left(-\frac{7543.5}{T}\right)$ 适用于 1073–1773 K	[17-18]

程为:

$$\frac{dN_{ig}}{dt} = \nu - \alpha N_{ig} \quad (2-28)$$

其中 N_{ig} 表示晶粒内的气泡浓度， ν 表示气泡成核速率， b 表示由于辐照导致的晶内气泡分解速率。

表 2-9 晶粒内气泡形核率 ν 的物理模型

形核率模型及参数说明	参考文献
常数形核率（试算模型）	-
与裂变率相关的经验形核模型 $\nu = 2\eta F$ (bub m ⁻³ s ⁻¹) 其中： $\eta = 25$ ，表示单位裂变碎片产生的气泡数	[19-21]

基于每个气泡包含 m/N_{ig} 个原子的假设，计算晶内气泡半径 R_{ig} ：

$$R_{ig} = \left(\frac{3\Omega}{4\pi} \frac{m}{N_{ig}} \right)^{1/3} \quad (2-29)$$

其中， $\Omega = 4.09 \times 10^{-29} \text{ m}^3 \cdot \text{at}^{-1}$ 为晶格中的气体原子体积。由此可推导出气体肿胀的晶内分量：

$$\left(\frac{\Delta V}{V} \right)_{ig} = \frac{4}{3} \pi N_{ig} R_{ig}^3 \quad (2-30)$$

2.5.2 晶界裂变气体行为模型

当裂变气体原子通过晶粒内扩散到达晶界后，其行为主要表现为晶界气泡的成核、生长、互连以及由此引起的气体释放过程。为描述上述机制，本文采用基于物理过程的晶界裂变气体演化模型，该模型适用于稳态与瞬态等不同堆内工况。

1) 晶界气体守恒与扩散通量

Intergranular Gas Conservation and Diffusion Flux 晶界气体面密度 q (at m⁻²) 的演化由晶粒内部向晶界的扩散通量与晶界释放项共同控制，其控制方程为

$$\frac{\partial q}{\partial t} = - \left[\frac{3}{a} \frac{\alpha}{\alpha + \beta} D \frac{\partial}{\partial r} (c_1 + m) \right]_{r=a} - R \quad (2-31)$$

其中，第一项表示从晶粒内部扩散至晶界的单原子气体通量， a 为晶粒半径， D 为晶粒内气体扩散系数， α 与 β 分别表示辐照诱导再溶解与气泡捕获过程的速率常数； R 表示晶界气体释放速率。

模型假设：到达晶界的气体原子被迅速捕获并储存在晶界气泡中，因此晶界上不存在自由单原子气体；同时忽略晶界气泡中气体的再溶解过程，且晶棱气泡未被显式

建模。晶界气泡假定为在晶面上瞬时成核^[22]，并呈圆形投影的透镜状几何形态。气泡内部气体压力通过吸收沿晶界扩散而来的空位得到松弛，其生长过程由晶界空位扩散系数 D_v 所控制，并最终达到力学平衡状态^[23]。

晶界空位扩散系数 D_v 的可选模型列于表格2-10。

表 2-10 晶界空位扩散系数 D_v (m^2s^{-1}) 的计算模型

空位扩散系数模型	参考文献
常数扩散系数（低温或数值试算假设） $D_v = 1.0 \times 10^{-30} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$	-
Arrhenius 型晶界空位扩散模型 $D_v = 6.9 \times 10^{-4} \exp\left(-\frac{3.88 \times 10^4}{T}\right)$ 其中 T 为绝对温度 (K)	[24]
修正系数形式的经验模型 $D_v = \frac{3}{5} 8.86 \times 10^{-6} \exp\left(-\frac{4.17 \times 10^4}{T}\right)$	[25]

2) 晶界气泡生长与互连

Growth and Interconnection of Intergranular Bubbles 通常情况下，晶界气泡处于非平衡状态，并通过吸收或发射空位来恢复平衡。假设晶面气泡呈圆形投影的透镜状 (Lenticular shape)，其气体内压的机械平衡值 p_{eq} 表示为：

$$p_{\text{eq}} = \frac{2\gamma}{R_{\text{gf}}} - \sigma_h \quad (2-32)$$

其中， γ 为 UO_2 /气体比表面能， σ_h 为静水应力（若固体介质处于受压状态，则取负值）。

晶界气泡的生长（或收缩）过程采用 Speight 和 Beere 模型^[23] 描述，即由晶界上产生的空位的吸收（或发射）控制。气泡处的空位吸收/发射速率 $\frac{dn_v}{dt}$ 给出为：

$$\frac{dn_v}{dt} = \frac{2\pi D_v \delta_g}{kTS} (p - p_{\text{eq}}) \quad (2-33)$$

其中， n_v 为气泡内的空位数量， D_v 为晶界空位扩散系数， δ_g 为晶界扩散层厚度， k 为玻尔兹曼常数， T 为温度。 S 为取决于晶面气泡覆盖率 F_{gf} 的几何因子：

$$S = \frac{-((3 - F_{\text{gf}}) \cdot (1 - F_{\text{gf}}) + 2 \ln(F_{\text{gf}}))}{4} \quad (2-34)$$

气泡体积 V_{gf} 由包含 n_g 个裂变气体原子和 n_v 个空位共同决定：

$$V_{\text{gf}} = n_g \omega + n_v \Omega_{\text{gf}} \quad (2-35)$$

其中, ω 为裂变气体原子的范德华体积, Ω_{gf} 为晶界气泡内的原子(空位)体积。

随着上述机制驱动的晶界气泡生长, 气泡之间逐渐发生互连。晶面上的气泡面密度 N_{gf} ($\text{bub} \cdot \text{m}^{-2}$) 随其在晶面上的平均投影面积 A_{gf} ($\text{m}^2 \cdot \text{bub}^{-1}$) 的增加而降低, 演化关系遵循^[22]:

$$\frac{dN_{\text{gf}}}{dA_{\text{gf}}} = -2N_{\text{gf}}^2 \quad (2-36)$$

晶界气泡生长与互连的净效应表现为晶面覆盖率

$$F_{\text{gf}} = N_{\text{gf}} A_{\text{gf}} \quad (2-37)$$

的持续增加。当覆盖率达到饱和值

$$F_{\text{gf}} = F_{\text{gf,sat}} = 0.5 \quad (2-38)$$

时, 假设沿晶面形成了连续的渗流路径 (Percolated path), 从而允许裂变气体从晶界释放。

一旦发生晶界渗流, 由晶粒内部扩散而来的气体原子将不再完全滞留于晶界气泡中, 因此晶界肿胀速率随之降低。

晶界气体引起的体积肿胀采用如下机理模型描述:

$$\left(\frac{\Delta V}{V}\right)_{\text{gf}} = \frac{3}{a} \cdot \frac{4\pi}{3} N_{\text{gf}} R_{\text{gf}}^3 \quad (2-39)$$

其中, R_{gf} 为晶界气泡半径, $\frac{3}{a}$ 为燃料晶粒的比表面积。

在上述晶界气泡演化模型的基础上, 进一步考虑晶界微裂纹对裂变气体释放行为的影响。该机制采用基于文献^[26-27]的半经验模型描述^[28-32]。通过引入未发生微裂纹的晶界面积比例 f_{gf} , 晶界覆盖率及其饱和值的演化可分别表示为

$$\frac{dF_{\text{gf}}}{dt} = \frac{\partial F_{\text{gf}}}{\partial q} \frac{dq}{dt} + F_{\text{gf}} \left(\frac{df_{\text{gf}}}{dt} \right) \quad (2-40)$$

$$\frac{dF_{\text{gf,sat}}}{dt} = F_{\text{gf,sat}} \left(\frac{df_{\text{gf}}}{dt} \right) \quad (2-41)$$

其中, 晶界覆盖率的演化同时受到气体原子流入及随后的晶界气泡演化过程, 以及晶界微裂纹生成与愈合行为的共同影响。未开裂晶界比例 f_{gf} 的演化由经验性微裂纹参数

控制，该参数为温度与燃耗的函数，能够描述加热与冷却瞬态期间的微裂纹生成^[29-32]以及随燃耗增加导致的微裂纹愈合效应^[33]。

2.5.3 微观结构演化及其与裂变气体行为的耦合

燃料微观结构的演化直接改变裂变气体的扩散距离、储存容量及释放路径，因此必须在裂变气体行为模型中加以描述^[34-35]。微观结构演化主要通过晶粒尺寸的变化体现，其影响主要表现在以下两个方面：(1) 晶粒尺寸 a 改变了晶粒内气体向晶界扩散的特征时间尺度 a^2/D ；(2) 随着晶界在晶粒生长过程中发生迁移，其以速率 $3a^2(da/dt)$ 扫过燃料体积，从而收集晶粒内部的气体原子和气泡^[36-38]。

1) 晶粒尺寸变化与裂变气体迁移的耦合关系

Coupling Between Grain Size Change and Fission Gas Migration

在中低燃耗和较高温度条件下，燃料晶粒经历正常晶粒生长过程。采用基于 Hillert^[39]理论并考虑 Zener 钉扎效应的晶粒生长模型^[40]：

$$\frac{da}{dt} = 4M \left(\frac{1}{a} - \frac{g(bu)}{a_m} \right) \quad (2-42)$$

其中， a 为晶粒半径， M 为晶界迁移率：

$$M = 1.46 \times 10^{-10} \exp \left(-\frac{32114.5}{T} \right) \quad (2-43)$$

$g(bu) = 1 + 0.002 bu$ 为燃耗 bu 的经验函数，用以描述随燃耗增加而增强的钉扎效应； a_m 为给定温度下的极限晶粒尺寸：

$$a_m = 2.23 \times 10^{-3} \exp \left(-\frac{7620}{T} \right) \quad (2-44)$$

2.5.4 气体总肿胀模型

燃料的总气体肿胀由晶粒内与晶界两部分组成：

$$\left(\frac{\Delta V}{V} \right)_{\text{gas}} = \left(\frac{\Delta V}{V} \right)_{ig} + \left(\frac{\Delta V}{V} \right)_{gb} \quad (2-45)$$

2.5.5 扩展模型

1) 氦气行为

氦气主要来源于次锕系核素的 α 衰变，其在燃料中的生成、扩散、俘获与再溶解过程会显著影响气泡形态演化及气体释放行为。因此，有必要在裂变气体行为分析中引入针对氦气的独立物理模型。

本文采用基于速率理论的氦气行为机理模型^[18,41-43]，对晶粒内氦气的溶解、扩散及气泡演化过程进行描述。

为描述氦气在 UO₂ 燃料中的溶解特性，假定其溶解行为服从亨利定律，即氦气在固体燃料中的平衡溶解度与其分压成正比：

$$c_{\text{lim}} = k_H p \quad (2-46)$$

其中， c_{lim} 为氦气在燃料中的溶解度极限， p 为氦气分压， k_H 为体系的亨利常数。

亨利常数具有显著的温度依赖性，其经验表达式可写为：

$$k_H = 4.1 \times 10^{24} \exp\left(-\frac{7543.5}{T}\right) \quad (2-47)$$

该关系在典型反应堆运行温度范围内能够合理描述氦气在晶粒内部的溶解行为。

晶粒内氦气行为采用球形等轴晶粒假设，并假定氦气以单原子形式在晶粒内扩散。扩散过程中，氦原子可被俘获形成晶粒内气泡，同时气泡中的氦原子可在辐照作用下重新溶解回晶格。

在上述假设下，晶粒内氦气浓度 c_{He} 与气泡中氦气浓度 m_{He} 的演化由以下耦合方程描述^[44-45]：

$$\begin{cases} \frac{\partial c_{\text{He}}}{\partial t} = D_{\text{He}} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_{\text{He}}}{\partial r} \right) - g_{\text{He}} c_{\text{He}} + \gamma m_{\text{He}} + yF \\ \frac{\partial m_{\text{He}}}{\partial t} = g_{\text{He}} c_{\text{He}} - \gamma m_{\text{He}} \end{cases} \quad (2-48)$$

其中， D_{He} (表格2-11) 为晶粒内氦气扩散系数， g_{He} 为俘获速率， γ 为再溶解速率， yF 表示氦气的体积生成率。

再溶解速率 γ 描述了晶粒内气泡中氦原子在热激活作用下重新返回晶格的过程，其表达式采用基于速率理论的形式：

$$\gamma = \frac{3D_{\text{He}}k_H k_B T Z}{R_{\text{ig},\text{He}}^2} \quad (2-49)$$

其中 k_H 为氦在氧化物燃料中的亨利常数, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度, Z 为气泡内气体的可压缩性因子^[17], $R_{ig,He}$ 为晶粒内氦气泡半径。氦气在晶格中的溶解行为假定满足亨利定律, 其亨利常数采用单晶二氧化铀实验数据的经验关联式^[18]:

$$k_H = 4.1 \times 10^{24} \exp\left(-\frac{7543.5}{T}\right) \quad (2-50)$$

该表达式在 1073–1773 K 温度范围内能够合理描述晶粒内氦气的溶解行为。

表 2-11 晶粒内氦气扩散系数 D_{He} 的经验模型

模型类型	扩散系数关联式	参考文献
低损伤晶格	$D_{He} = 2.0 \times 10^{-10} \exp\left(-\frac{24603}{T}\right)$	[46]
高损伤晶格	$D_{He} = 3.3 \times 10^{-10} \exp\left(-\frac{19032.8}{T}\right)$	[46]

2) 放射性裂变气体的衰变效应

在燃料棒包壳失效或事故工况分析中, 放射性裂变气体的释放对源项评估具有关键意义。与稳定裂变气体不同, 放射性裂变气体在扩散与释放过程中同时受到放射性衰变的影响, 因此其行为必须通过独立的物理模型加以描述。

在稳定裂变气体模型的基础上^[47-48], 引入放射性衰变项, 建立晶粒内与晶界放射性裂变气体的统一描述框架。

在晶粒内, 放射性裂变气体的演化由扩散、俘获、再溶解、生成以及放射性衰变过程共同控制, 其控制方程可表示为:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) - bm - gc - \lambda c + yF \\ \frac{\partial m}{\partial t} = -bm + gc - \lambda m \end{cases} \quad (2-51)$$

其中, c 表示晶粒内单原子裂变气体浓度, m 表示晶粒内气泡中气体浓度; D 为扩散系数, b 为辐照诱导再溶解速率, g 为俘获速率, λ 为放射性衰变常数。

对于部分放射性裂变气体, 其生成过程涉及短寿命前驱核素。前驱体的衰变可能发生在扩散过程中, 从而增强有效扩散能力。该效应通过引入前驱体增强因子 α ^[49] 对扩散系数进行修正:

$$\alpha = \frac{1 - \left(\frac{y_0}{x_0}\right)^3}{\left[1 - \left(\frac{y_0}{x_0}\right)^2\right]^2} \quad (2-52)$$

其中，

$$y_0 = \sqrt{\frac{D_p}{\lambda_p}}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{D_d}{\lambda_d}} \quad (2-53)$$

D_p 、 D_d 分别为前驱体与子体的扩散系数， λ_p 、 λ_d 为其衰变常数。短寿命裂变气体的值： ^{133}Xe 的特征值为 $\alpha = 1.25$ ，而 ^{85m}Kr 的特征值为 $\alpha = 1.31$ 。

在晶界处，放射性裂变气体的行为与稳定裂变气体类似，但需额外考虑放射性衰变对晶界气体存量的削减作用。晶界气体面密度 q 的演化方程可写为：

$$\frac{\partial q}{\partial t} = - \left(\frac{3}{a} \frac{b}{a+b} D \frac{\partial(c+m)}{\partial r} \right)_{r=a} - \lambda q - R \quad (2-54)$$

其中， R 为气体释放项，其形式与稳定裂变气体模型保持一致。

在模型中假定：短寿命放射性裂变气体在质量与扩散行为上与稳定裂变气体相同，其释放特性主要由扩散时间尺度与放射性衰变时间尺度之间的竞争关系所控制。

2.6 包壳材料堆内行为模型

本文档包含程序中所包含的包壳模型，CW316，SS316，D9，HT9。

D9 是前国家包壳和管道（NCD）开发的奥氏体不锈钢，相比于 SS316 提高了钼的含量。具体的含量在表格2-12中，在开发过程中，根据合金高温强度、抗再结晶和抗蠕变断裂的需求，微调了钼和硅的含量。D9 在 ASEM 中代号为 S38660。

表 2-12 Chemical Composition of D9-C1 and D9-C1P

Element	D9-C1(nom)*	D9-C1P(nom.)**
C	0.05	0.05
Mn	2.00	2.00
Si	1.00	0.90
P	0.02 max.	0.01 max.
S	0.01 max.	0.007 max.
Cr	13.5	13.5
Ni	15.5	15.5
Mo	1.50	1.65
Cu	0.04 max.	0.02 max.
Nb	0.05 max.	0.01 max.
Al	0.05 max.	0.01 max.
Ti	0.25	0.25
As	0.03 max.	0.03 max.
Ta	0.02 max.	0.01 max.
V	0.02 max.	0.02 max.
Zr	—	0.001 max.
Co	0.050 max.	0.031 max.
O	—	0.005 max
B	0.001 max.	0.001 max.
N	0.01 max.	0.005 max.
Fe	Balance	Balance

HT9 是基于 Fe-12Cr-1Mo 的马氏体不锈钢。HT9 在 ASME 代码中编号为 S42100。

表 2-13 HT9 Chemical Composition

Element	Weight, %
Carbon	0.17 – 0.23
Manganese	0.40 – 0.70
Phosphorus, max.	0.015*
Sulfur, max.	0.010
Silicon	0.20 – 0.30
Nickel	0.30 – 0.80
Chromium	11.0 – 12.5
Molybdenum	0.80 – 1.20
Niobium	0.05 – max.
Tungsten	0.40 – 0.60
Aluminum, max.	0.050
Vanadium	0.25 – 0.35

2.6.1 热导率

1) SS316

SS316 的热导率^[50]使用下面的公式:

$$k = -7.301 \times 10^{-6} T^2 + 2.716 \times 10^{-2} T + 6.308 \quad (2-55)$$

其中 T 是温度, K。k 是热导率, $W/m - K$ 。

NASA^[51]中关于 SS316 热导率报告中提到在 255.37K 到 1255.37K, 分为两段, 分别是:

$$k = 3.155A\left(\frac{T}{1.8}\right)^B \quad 255.37 \leq T \leq 699.816 \quad (2-56)$$

其中 k 是热导率, $W/m - K$ 。T 是温度, K。跟原文相比, 此处进行了单位转换。A 是常数, $A = 0.52048$; B 也是常数, $B = 0.43367$ 。

$$k = 3.155(C + D\frac{T}{1.8}) \quad 699.816 \leq T \leq 1255.37 \quad (2-57)$$

其中 k 是热导率, $w/m - K$ 。T 是温度, K。跟原文相比, 此处进行了单位转换。C 是常数, $C = 4.553$, D 也是常数, $D = 5.507 \times 10^{-3}$

在 T.W Waston 的报告^[52]中, SS316 的热导率跟温度相关, 具体形式如下:

$$k = 100(0.1333 + 0.1727 * \frac{T - 273.15}{1000} - 0.043334 * (\frac{T - 273.15}{1000})^2 + 0.0332 \left(\frac{T - 273.15}{1000}\right)^3) \quad (2-58)$$

其中 k 是热导率, $W/m - K$, T 是温度, $363.15 < T < 113.15$, K。

齐飞鹏的论文也用到了 SS316 的热导率, 也是温度经验关系式:

$$k = 7.956 + 1.919 \times 10^{-2}T - 3.029 \times 10^{-6}T^2 \quad (2-59)$$

316SS 的比热容 $C_p^{[50]}$ 使用下面的公式:

$$C_p = 428.46 + 0.1816T \quad (2-60)$$

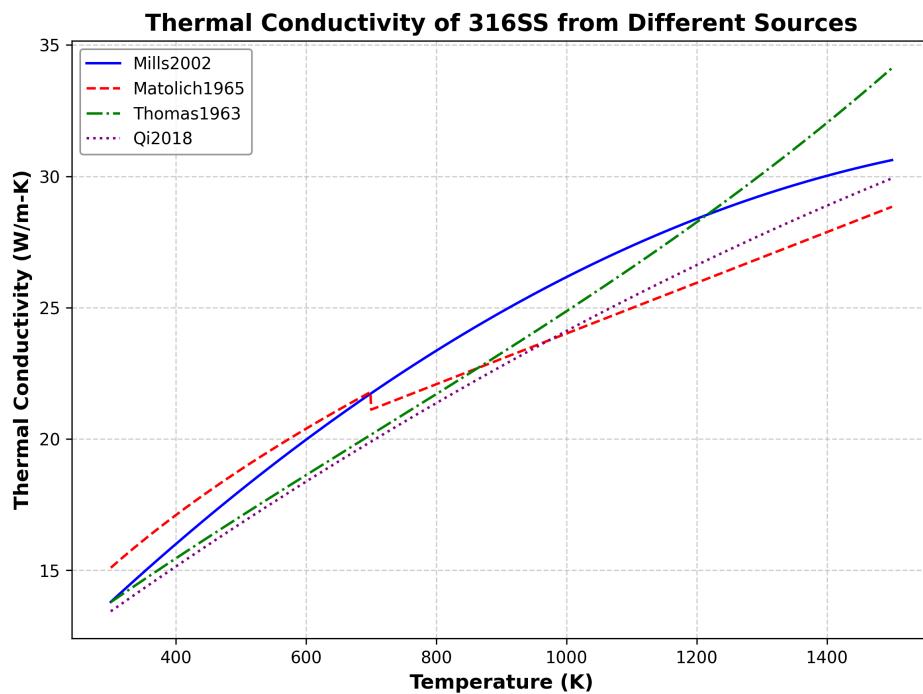


图 2-2 SS316 不同热导率模型随温度的变化曲线

2) HT9

HT9 的热导率 $k, W/m - K^{[53]}$ 计算公式:

$$k = 29.65 - 6.668 \times 10^{-2}T + 2.184 \times 10^{-4}T^2 - 2.527 \times 10^{-7}T^3 + 9.621 \times 10^{-11}T^4 \quad (2-61)$$

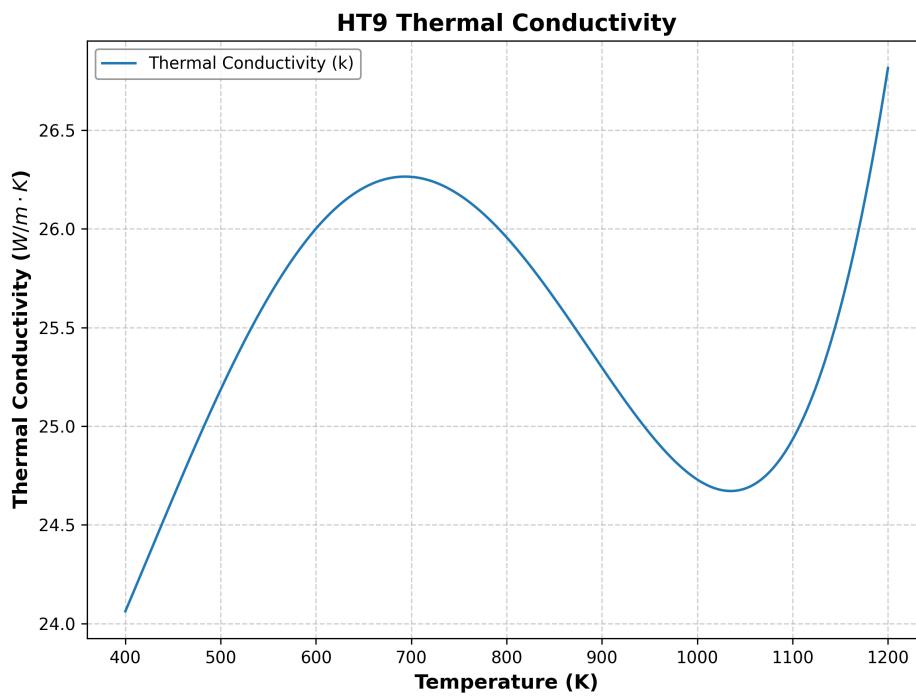


图 2-3 HT9 包壳材料热导率

3) D9

D9 的热导率^[54]跟温度 T(K) 相关, 具体形式如下:

$$k = \begin{cases} 7.598 + 2.391 \times 10^{-2}T - 8.899 \times 10^{-6}T^2, & \text{for } 500 \leq T \leq 1030 \text{ K} \\ 7.260 + 1.509 \times 10^{-2}T, & \text{for } 1030 \leq T \leq 1200 \text{ K} \end{cases} \quad (2-62)$$

报告中提到

$$\lambda = 8.25795 + 1.94121 \times 10^{-2}T - 3.24027 \times 10^{-6}T^2, \quad (2-63)$$

其中 λ 是热导率, W/mK , T 是温度, K 。

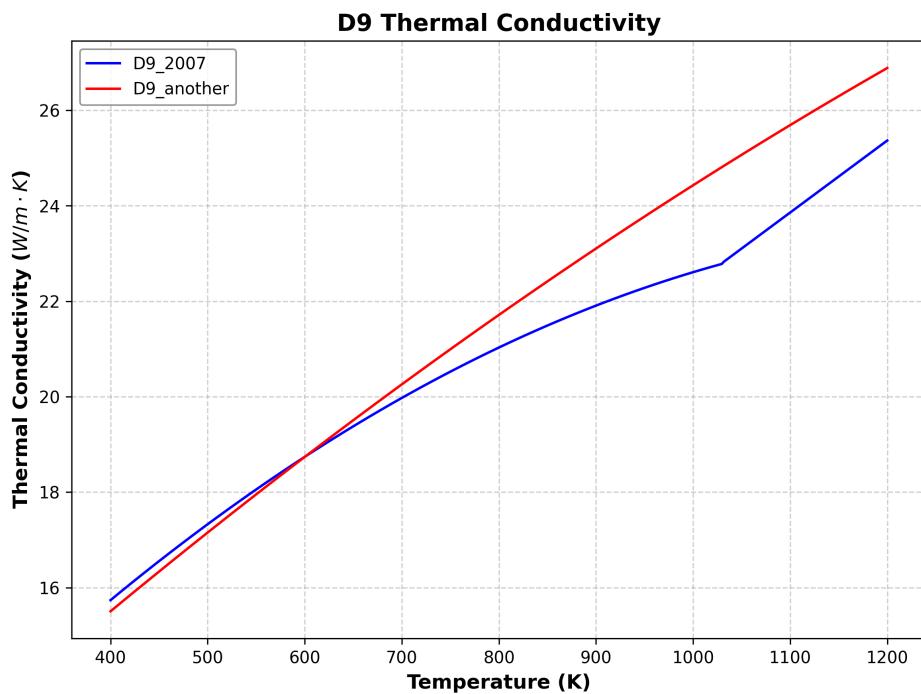


图 2-4 D9 包壳材料热导率

2.6.2 比热容

1) HT9

比热容 C_p ^[55]采用的公式是：

$$C_p = 0.257T + 380 \quad (2-64)$$

2) D9

D9 的比热容 C_p ^[56]计算公式如下：

$$c_P = 431 + 17.7 \times 10^{-2}T + 8.72 \times 10^{-5}T^{-2} \quad (2-65)$$

2.6.3 密度

1) D9

未辐照的密度：

$$\rho = 7.98 - 4.3 \times 10^{-4}T \quad (2-66)$$

其中 ρ 是密度, g/cm^3 。T 是摄氏度, $300 < T < 800$ 。

2) HT9

HT9 的密度是温度的函数:

$$\rho = a + bT \quad (2-67)$$

其中:

$$\rho = \text{密度 (Density,) } g/cm^3$$

$$T = \text{温度 (Temperature,) } ^\circ C$$

$$a = 7.778$$

$$b = -3.07 \times 10^{-4} \quad 0 \leq T \leq 800^\circ C$$

注意超过 $800^\circ C$, 因为存在铁素体到奥氏体的转变。

2.6.4 热膨胀

1) D9

D9 的热膨胀模型:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta L}{L_0} &= 0.72549 - 0.12875T^{\frac{1}{2}} + 5.1890 \times 10^{-3}T - 5.0431 \times 10^{-7}T^2, \quad (293 < T < 1200 K) \\ &= -1.273 \times 10^{-3} \text{ at } 293K \\ &= 1.76\% \text{ at } 1200K \end{aligned} \quad (2-68)$$

$\frac{\Delta L}{L_0}$ 单位是百分比。

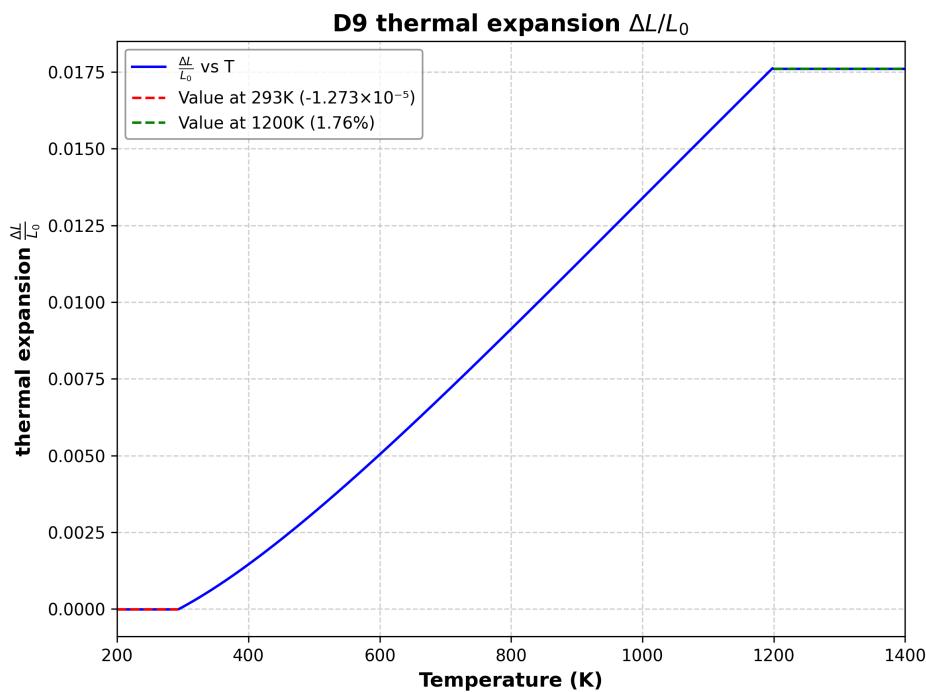


图 2-5 D9 热膨胀模型

2) HT9

模型给出了铁素体的 HT9 的热膨胀模型, ANL-CMT 测得马氏体到奥氏体的转变, 将温度范围扩展到 1200K。目前模型温度范围 $293 < T < 1050$ 。

$$\frac{\Delta L}{L_0} = -0.16256 + 1.62307 \times 10^{-4}T + 1.42357 \times 10^{-6}T^2 - 5.50344 \times 10^{-10}T^3 \quad (2-69)$$

其中 $\frac{\Delta L}{L_0}$ 是百分比应变。

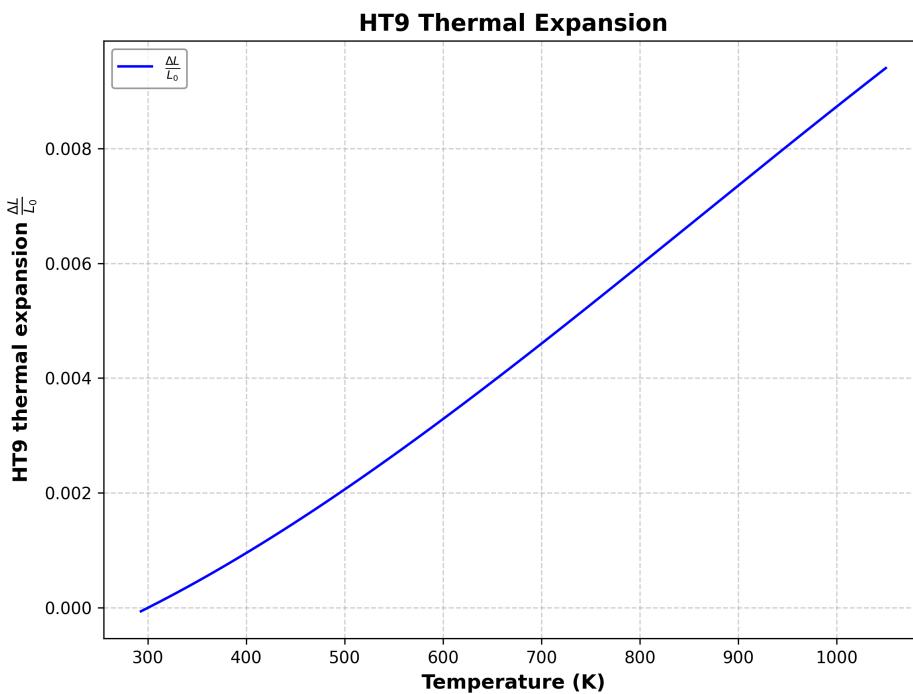


图 2-6 D9 包壳材料热膨胀模型

2.6.5 辐照肿胀

Bison 中整合了 HT9、D9 和 SS316 包壳类型的体积膨胀模型。HT9 和 D9 分别采用公式 2-78 2-86 变体，其中 $\frac{\Delta V}{V_0}$ 表示由膨胀和致密化引起的体积变化， S_0 为空洞导致的负分数密度变化， D 为固态反应引起的分数密度变化。多年来，随着包壳应变数据的累积，HT9、D9 和 SS316 的经验关系式不断修改，更新了如 R 、 τ 和 α 等参数，这三个参数分别决定了包壳体积变化增长率的曲线，以及快速稳态膨胀起始点。

1) CWSS316

20%CW316SS 的辐照肿胀，存在两种肿胀驱动，一种是直径 2-3nm 的氦气泡驱动，一种是大于 4nm 的孔洞驱动。在 300-340 摄氏度，56dpa 与以下，表面为氦气泡增加，到达临界直径之后，转变为孔洞。在描述，辐照导致的肿胀采用幂律膨胀模型。在 305 到 315 摄氏度下，肿胀小于 0.03%。

$$\Delta V/V_0 = A(\phi t)^n \quad (2-70)$$

其中 A 和 n 是材料相关的常数， ϕt 是剂量。在 HFIR 中，400 到 440 摄氏度下， n 选择 1.5。在快中子反应堆 EBR-II 中 E-75， n 是 1.67，同一个反应堆中的 E-88 实验结果表明， n 选择 2.01。

n 的变大说明，肿胀的驱动力从氦气泡驱动，逐渐转换为混合驱动，最终转换为孔洞驱动。但是最大的肿胀率在 100dpa 是小于 3% 肿胀。

2) SS316

SS316 快堆包壳会经历辐照诱导膨胀，膨胀过程与辐照通量和温度密切相关。根据 EBR-II 的实验数据和 BISON 的文章^[57]得到 SS316 辐照肿胀的应变（包含密实化）：

$$\frac{\Delta V}{V_0} = \frac{S_0}{1 - S_0} \quad (2-71)$$

需要注意的是，快堆中子通量大于 $10^{23} \frac{n}{cm^2}$ ，无应力膨胀的预测值可能过高，因此，模型只能提供保守的估计值。

其中 S_0 是空隙 (void) 形成产生的负的密度变化，具体形式是：

$$S_0 = 0.01R\phi t + \frac{0.01R}{\alpha} \ln \left(\frac{1 + e^{\alpha(\tau - \phi t)}}{1 + e^{\alpha\tau}} \right) \quad (2-72)$$

其中 R 是稳态膨胀率百分比，单位是 $10^{-22} cm^2$ 。中子注量 ϕt 的单位是 $n \cdot cm^{-2}$ 。SS316 的稳态膨胀率是通过使用实验数据拟合出来的。

$$R = e^{0.497 + 0.795\beta - 0.0948\beta^2 + 0.908\beta^3 - 1.49\beta^4} + e^{-8(\beta - 1.35)^2} \quad (2-73)$$

$$\beta = \frac{T - 773}{100} \quad (2-74)$$

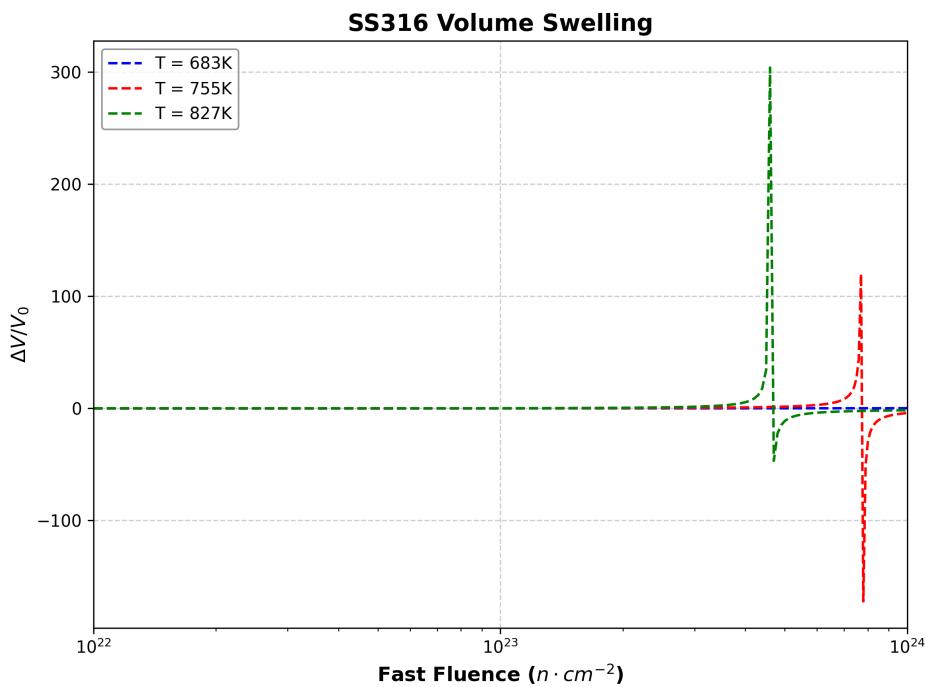
曲率参数 α 的单位是 $10^{-22} cm^2$ 。参数孵化时间 τ 的单位是 $10^{22} cm^2$ ，是快速稳态膨胀开始的时间。

$$\alpha = 0.75 \quad \tau = \begin{cases} 6.58 - 0.566\beta, & \text{for } T < 848 \text{ K} \\ 4.3105 + 2.46\beta, & \text{for } T \geq 848 \text{ K} \end{cases} \quad (2-75)$$

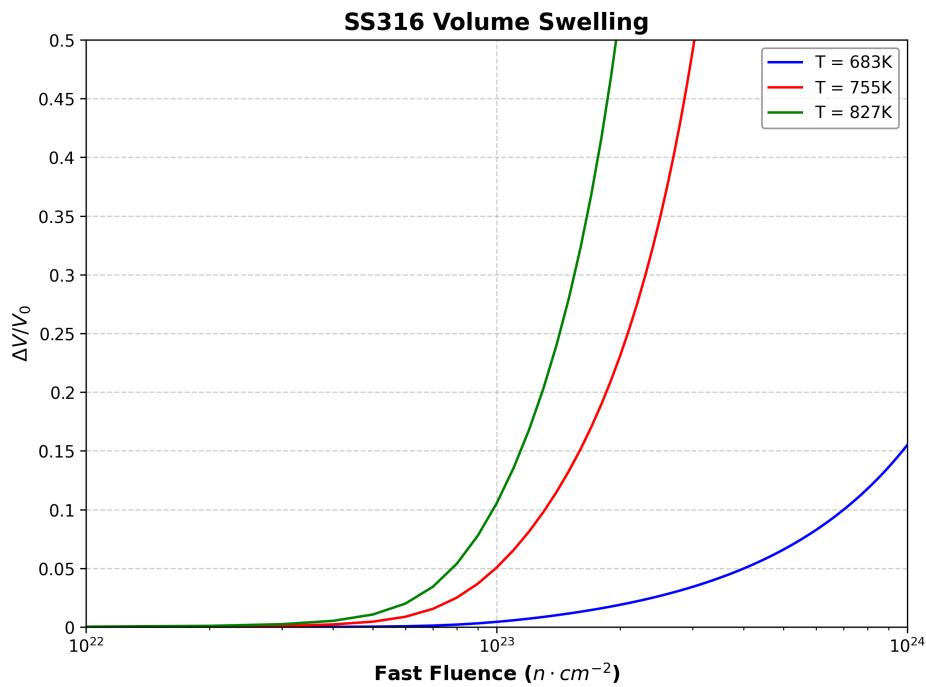
需要注意的是，Bison 代码中通过增量的形式实现，因为公式2-71是根据当前的温度和中子注量给出的。

$$\frac{dA}{dt} = \dot{V} = \frac{\dot{S}_0}{(1 - S_0)^2} \quad (2-76)$$

$$\frac{dS_0}{dt} = \dot{S}_0 = \frac{0.01R\phi t}{1 + e^{\beta(T - \phi t)}} \quad (2-77)$$



(a) 未处理的辐照肿胀模型随中子注量变化曲线



(b) 处理后的辐照肿胀模型随中子注量变化曲线

图 2-7 SS316 辐照肿胀模型随中子注量变化曲线

3) HT9

HT9 的孔洞肿胀 (void Swelling) 是 NSMH 提供的, 需要注意的是, 根据实验数据, HT9 基本不会表现出明显的肿胀。虽然在实验中观察到低温下看到一些孔洞出现。HT9 辐照肿胀的应变 (包含密实化):

$$\frac{\Delta V}{V_0} = S_0 + D \quad (2-78)$$

其中 S_0 是空隙形成产生的负的密度变化, D 是固态微观结构引起的密度变化, 具体形式分别是:

$$S_0 = 0.01R\phi t + \frac{0.01R}{\alpha} \ln \left(\frac{1 + e^{\alpha(\tau - \phi t)}}{1 + e^{\alpha\tau}} \right) \quad (2-79)$$

$$D = 0.0015 \left(1 - e^{-0.1\phi t} \right) \quad (2-80)$$

其中 R 是稳态膨胀率百分比, 单位是 $10^{-22}cm^2$ 。HT9 的稳态膨胀率:

$$R = 0.085e^{-1 \times 10^{-4}(T-673)^2} \quad (2-81)$$

曲率参数 α 的单位是 $10^{-22}cm^2$ 。参数孵化时间 τ 的单位是 $10^{22}cm^2$, 是快速稳态膨胀开始的时间。

$$\alpha = 0.75 \quad \tau = 14.2 \quad (2-82)$$

需要注意的是, Bison 代码中通过增量的形式实现, 因为公式2-78是根据当前的温度和中子注量给出的。

$$\frac{dA}{dt} = \dot{V} = \dot{S}_0 + \dot{D} \quad (2-83)$$

$$\frac{dS_0}{dt} = \dot{S}_0 = \frac{0.01R\phi t}{1 + e^{\beta(T-\phi t)}} \quad (2-84)$$

$$\frac{dD}{dt} = \dot{D} = 1.5 \times 10^{-4}\phi e^{-0.1\phi t} \quad (2-85)$$

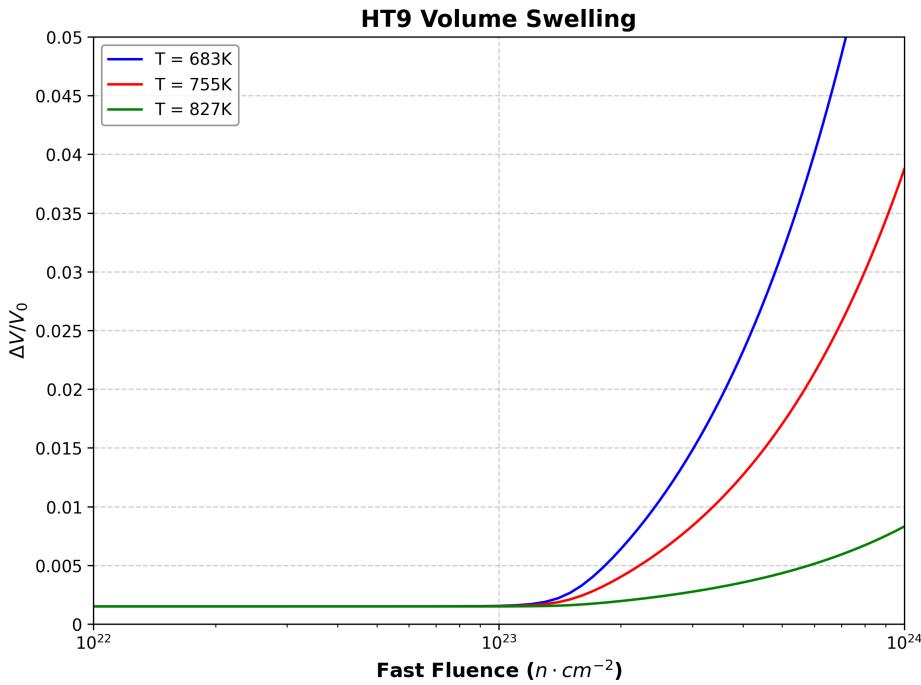


图 2-8 HT9 辐照肿胀随中子注量变化曲线

4) D9

根据 EBR-II 的实验数据和 BISON 的文章得到 D9^①辐照肿胀的应变 (包含密实化):

$$\frac{\Delta V}{V_0} = S_0 - D \quad (2-86)$$

其中 S_0 是空隙形成产生的负的密度变化, D 是固态微观结构引起的密度变化, 具体形式分别是:

$$S_0 = 0.01R\phi t + \frac{0.01R}{\alpha} \ln \left(\frac{1 + e^{\alpha(\tau - \phi t)}}{1 + e^{\alpha\tau}} \right) \quad (2-87)$$

$$D = 0.01 \left(1 - e^{-30\phi t} \right) \left(-1.7 \times 10^{-4}T + 0.241 \right) \quad (2-88)$$

其中 R 是稳态膨胀率百分比, 单位是 $10^{-22}cm^2$ 。 T 是温度, K。D9 的稳态膨胀率是:

$$R = 2.76e^{-1.4 \times 10^{-4}(T-773)^2} \quad (2-89)$$

曲率参数 α 的单位是 $10^{-22}cm^2$ 。参数孵化时间 τ 的单位是 $10^{22}cm^2$, 是快速稳态膨胀开始的时间。

^① 和 METALLIC FUELS HANDBOOK 做了改进, 此处仅仅使用更新的模型

$$\alpha = 0.75 \quad \tau = 11.9 \quad (2-90)$$

需要注意的是，Bison 代码中通过增量的形式实现，因为公式2-86是根据当前的温度和中子注量给出的。

$$\frac{dA}{dt} = \dot{V} = \dot{S}_0 - \dot{D} \quad (2-91)$$

$$\frac{dS_0}{dt} = \dot{S}_0 = \frac{0.01R\phi t}{1 + e^{\beta(T-\phi t)}} \quad (2-92)$$

$$\frac{dD}{dt} = \dot{D} = 0.3\phi e^{-30\phi t} (-1.7 \times 10^{-4}T + 0.241) \quad (2-93)$$

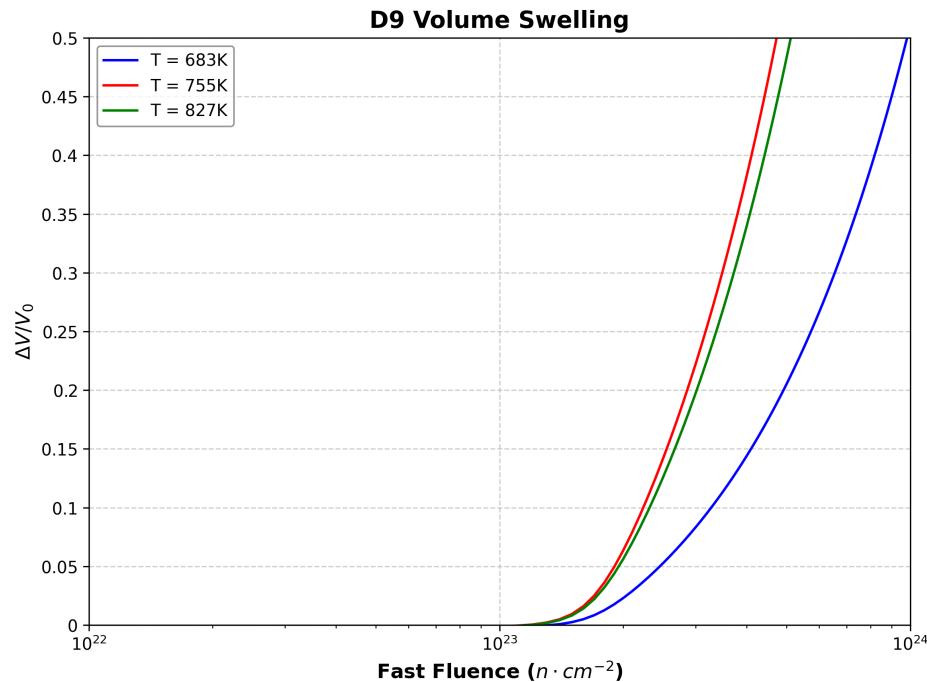


图 2-9 D9 辐照肿胀随中子注量变化曲线

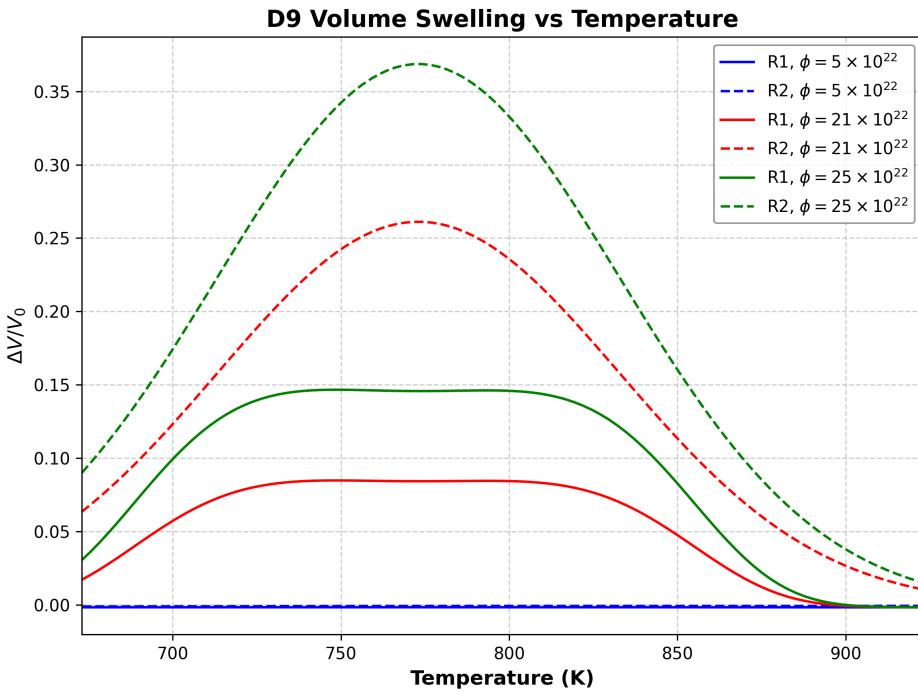


图 2-10 D9 辐照肿胀比较, 虚线是改进后的模型, 实线是 METALLIC FUELS HANDBOOK 的模型

2.6.6 塑性

1) SS316

SS316 的蠕变^[58]测定是在棘轮实验, 温度范围是 550-600 摄氏度条件下。稳态的蠕变速率(二阶蠕变)和温度以及应力相关, 采用 Norton 的形式:

$$\dot{\epsilon}_c = A \exp \left[-\frac{Q_c}{RT} \right] \sigma^n \quad (2-94)$$

其中 Q 是蠕变活化能, 单位为 cal/mol , R 是气体常数约 $2 cal/mol/K$, T 是测试温度, 单位为 K , n 是应力指数, A 是材料常数, 5.37×10^{-20} 。应力指数 n 和蠕变活化能的值分别为 5.1875 和 $33087 cal/mol$ 。

弹塑性采用 Ramborg-Osgood 形式:

$$\epsilon = \frac{\sigma}{E} + B \exp \left[-\frac{Q_h}{RT} \right] \sigma^m \quad (2-95)$$

其中 E 是平均弹性模量, 此处取为 $23.95 \times 10^6 \text{psi}$ ($165.2 \times 10^3 MPa$), Q_h 是硬化活化能, R 是气体常数, T 是以 K 为单位的测试温度, m 是应力指数, 5.83, B 是材料常数, 6.031×10^{-22} 。实验得到的 Q_h 值为 $23640 cal/mol$, 大于蠕变活化能 Q_c 。这是因为源于

硬化速率对温度变化的敏感性。

在考虑蠕变和塑形的关系时候，有两种方法，一种简化为单独的考虑：

$$\dot{\epsilon} = \dot{\sigma}/E + \dot{\epsilon}_p + \dot{\epsilon}_c \quad (2-96)$$

另一种是 Bailey-Orowan 模型，考虑为塑形变形由蠕变和塑形共同作用：

$$\dot{\epsilon}' = f(\sigma - \tilde{\sigma}) \quad (2-97)$$

f 是阶跃函数，具体形式（屈服准则）

$$f(\sigma - \tilde{\sigma}) = 0 \quad \text{if } \sigma < \bar{\sigma}, \quad (2-98)$$

$$f(\sigma - \tilde{\sigma}) > 0 \quad \text{if } \sigma = \bar{\sigma}. \quad (2-99)$$

其中 $\bar{\sigma}$ 称为瞬时流动应力，其控制方程如下：

$$\frac{d\bar{\sigma}}{dt} = \left[\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon'} \right]_t \cdot \frac{d\epsilon'}{dt} + \left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} \right]_{\epsilon'} \quad (2-100)$$

第一项 $\left[\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon'} \right]_t \cdot \frac{d\epsilon'}{dt}$ ： $\left[\frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon'} \right]_t$ 表示在恒定时间 t 下，应力 σ 对塑形应变 ϵ' 的偏导数。

$\frac{d\epsilon'}{dt}$ 表示应变随时间的变化率，即应变速率。这一项描述了由于应变随时间变化而引起的应力变化。

第二项 $\left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} \right]_{\epsilon'} : \left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} \right]_{\epsilon'}$ 表示在恒定应变 ϵ' 下，应力对时间的偏导数。

$$\left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \epsilon_p} \right] = \frac{1}{mb \exp\left(-\frac{Q_h}{R\theta}\right) \bar{\sigma}^{m-1}} \quad (2-101)$$

$$\left[\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial t} \right]_{\epsilon_c} = -\frac{A}{mB} \exp\left(-\frac{Q_c - Q_h}{R\theta}\right) \bar{\sigma}^{-m+1} \quad (2-102)$$

这里明确一点，塑性包含两部分，一个是硬化，一个是屈服准则，所以此处为硬化方程。硬化方程又可以分为各向同性和各向异性。硬化方程通常是和等效塑性应变 p 相关的。下面是通过调研得到 SS316 的硬化方程。

首先是 SS316 中线性硬化方程^[59]：

$$\sigma_y = \sigma_y^0 + K\varepsilon_p^n \quad (2-103)$$

其中 σ_y 是屈服应力, $\sigma_y^0(125\text{MPa})$ 是初始屈服应力, $K(500\text{MPa})$ 是硬化模量, ε_p 是等效塑性应变, $n(0.4)$ 是硬化指数。下图展示了在 600 摄氏度 SS316 的屈服应力和应变曲线, 屈服应力应该是温度的曲线。此外通过增才制造的 SS316 的屈服应力可能和其他工艺生产的 SS316L 有很大不同。

另一个是 Chaboche 模型^[60]:

$$\dot{r}(p) = b(Q - r)\dot{p} \quad \text{or} \quad dr(p) = b(Q - r)dp \quad (2-104)$$

对上式进行积分, 同时初始条件是 $r(0) = 0$, 得到:

$$r(p) = Q(1 - e^{-bp}) \quad (2-105)$$

最终的屈服应力是:

$$\sigma = \sigma_y^0 + r(p) \quad (2-106)$$

因为只有两个温度点的数据, 所以其他温度下的材料参数和温度相关采用线性差值。

表 2-14 材料参数表

$T(\text{°C})$	$E(\text{GPa})$	ν	$\sigma_y(\text{MPa})$	b	$Q(\text{MPa})$
20	185	0.3	82	8	60
550	141.26	0.3	31	31	27.8

第三个是实验获得的 SS316 的硬化方程^[61]:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{true}} &= (2.6\eta^2 - 16.8\eta + 2.6)(547.75(0.08 + \epsilon_{p1})^{0.632}) \\ &\quad + (71.3\eta^2 + 39\eta + 1.1)(653.38(0.074 + \epsilon_{p1})^{0.664}g^{-1/2}) \end{aligned} \quad (2-107)$$

其中无量纲参数 $\eta = g/t$, g (单位: μm) 为晶粒大小, t (单位: μm) 为样品厚度。 ϵ_{p1} 为等效塑性应变, σ_{true} (单位: MPa) 表示真实屈服应力。

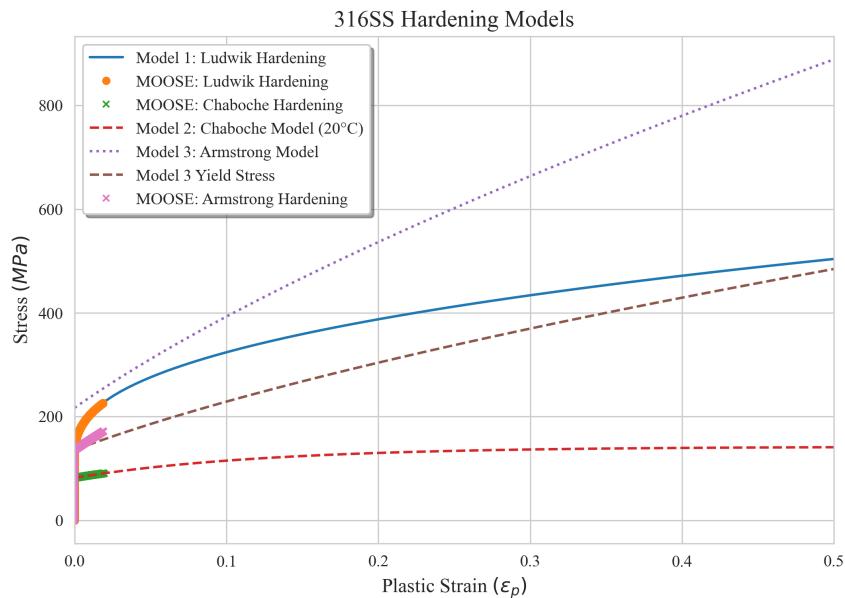
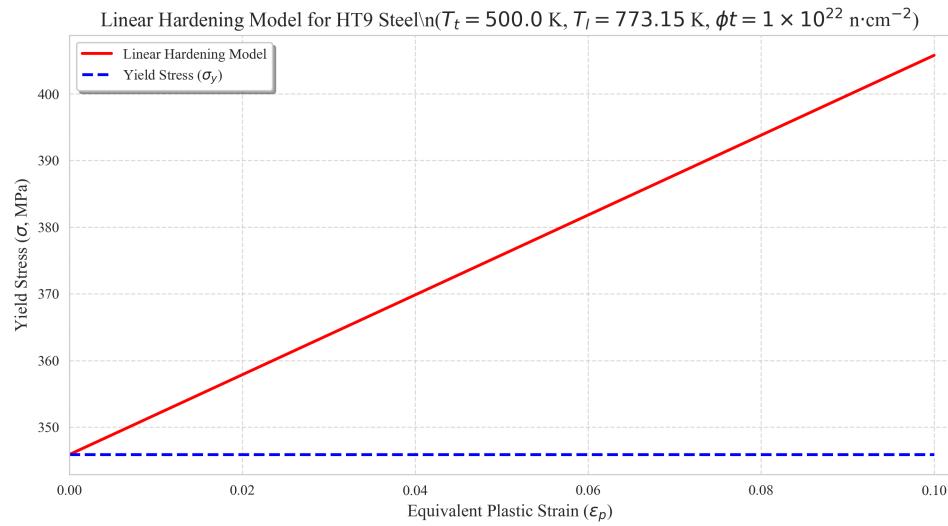


图 2-11 SS316 硬化模型比较

2) HT9

HT9 的硬化方程采用线性硬化模型^[62]，虽然极限抗拉强度 (σ_{uts}) 屈服应力 (σ_y) 和最小延伸率 (ϵ_t) 本身是非线性的，但是模型最终简化为基于 σ_{uts} σ_y 和 ϵ_t 的线性关系。极限抗拉强度在章节2.6.10.2中已经给出，屈服强度在章节2.6.9.3中给出。最小延伸率在章节2.6.11.2给出。

$$H = \frac{\sigma_{uts} - \sigma_y}{\epsilon_t} \quad (2-108)$$



3) D9

同样,D9的硬化方程采用同样处理线性硬化模型^[62]。极限抗拉强度在章节2.6.10.1中已经给出。屈服应力在章节2.6.9.2给出。最小延伸率在章节2.6.11.1给出。

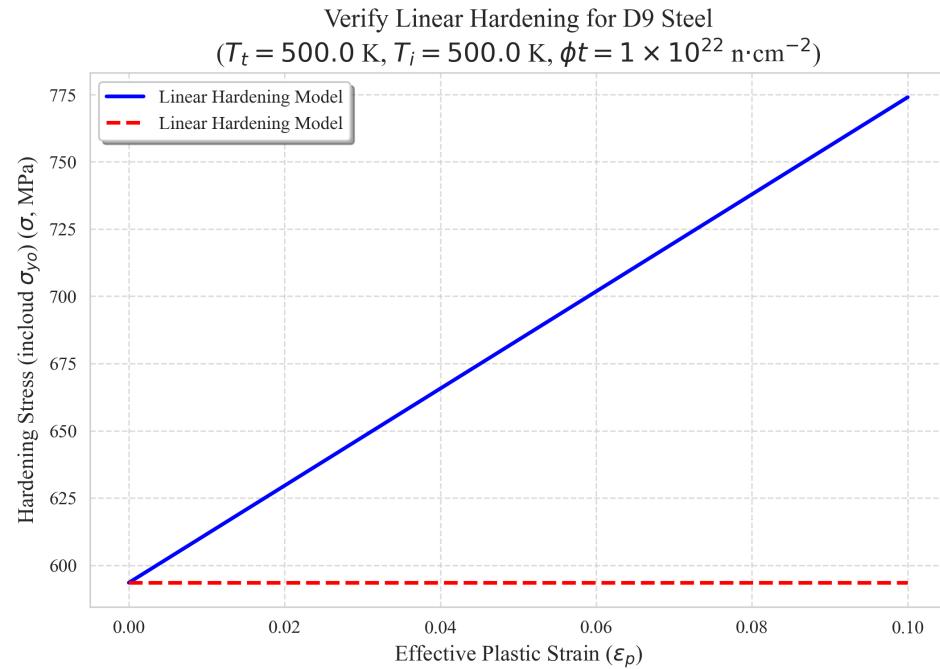


图 2-12 D9 硬化模型

2.6.7 断裂失效

包壳失效模型主要是基于累计损伤分数 (CDF) 的概念，CDF 是基于材料的疲劳寿命和断裂寿命模型。CDF 模型主要用于稳态模拟。这里面说的稳态是反应堆物理中的术语：稳态主要是指反应堆正常运行时的辐照条件，而瞬态主要是事故场景下的辐照条件。稳态不是字面意思，稳态也可能设计与时间相关的辐照条件。

CDF 模型的基本思想是通过计算材料在给定温度、应力和剂量下的疲劳寿命和断裂寿命，来评估材料的损伤程度。CDF 值从 0 到 1 变化，0 表示没有损伤，1 表示完全失效。通常，当 CDF 达到 1 时，材料被认为已经失效。

CDF 的计算公式如下：

$$CDF = \int_0^t \frac{dt}{t_r(\sigma, T)} \quad (2-109)$$

因此 CDF 预测模型的关键是合适断裂时间关系式，该关系式通常是温度和环向应力的函数。

1) SS316

316 不锈钢作为快中子增殖反应堆等高温核能系统的关键结构材料，其在长期高温、应力和中子辐照耦合环境下的断裂行为（通常表现为蠕变断裂）是反应堆安全设计与寿命评估的核心问题。针对其断裂时间的预测，已发展出从经验外推到物理机理的多尺度模型体系。

在工程应用层面，广泛采用基于大量实验数据的经验或半经验断裂时间模型。这类模型通常以应力、温度和时间参数为核心，通过回归分析建立关联。例如，在 ANL 开发的 DEFORM-5 程序^[63]中采用的 TDC-2 瞬态损伤关联式，即为一个典型的复杂经验模型，它通过引入辐照注量、稳态辐照温度、瞬态温度变化率等参数，描述了冷加工 316 不锈钢包壳在事故瞬态工况下的断裂时间（详细见后续的 D9 破裂时间模型）。其一般形式可抽象为：

$$t_r = f(\sigma, T, \dot{T}, \phi t, TI) \quad (2-110)$$

其原理是 Kramer 和 DiMelfi 开创性地提出了一个双机制失效框架^[64-65]：在低温和高应力区域，断裂由塑性失稳控制，其判据可由基于广义 Voce 方程的本构模型结合大应变分析推导得出；在高温和低应力区域，断裂则由晶间裂纹的形核与扩展主导。

对于先进改进型材料，如日本 DFBR 计划开发的 316FR 不锈钢，在继承传统 316 不锈钢模型框架的基础上，通过优化化学成分（如控制 C、N 含量）来提升长期蠕变强度和延性。其蠕变性能的预测模型也相应发展，以更准确地反映其在长期高温服役下的行为。在演变过程中，具有代表性的蠕变断裂时间模型包括：传统 316 不锈钢的 ORNL

模型，表达形式为^[66]：

$$\log_{10} t_R = C_h - 0.01312\sigma - 2.552 \log_{10} \sigma + \frac{20880}{T} \quad (2-111)$$

其中的 t_R 为断裂时间 (h), σ 为应力 (MPa), T 为温度 (K), C_h 为批量常数, 反应给定热源的相对强度, -11.870。

316FR 不锈钢的早期 Japanese-98 模型, 其形式为^[66]:

$$\log_{10}(t_R) = -23.962345 + \frac{30708.247}{T + 273.15} + \frac{2914.114}{T + 273.15} \log_{10} \sigma - \frac{2465.8312}{T + 273.15} (\log_{10} \sigma)^2 \quad (2-112)$$

其中 T 是温度, 摄氏度。 σ 是应力, N/mm^2 。 t_R 是断裂时间, h。

以及考虑长期蠕变机制变化的 316FR 改进模型, 该模型采用区域分割的方法, 其通用表现形式是^[67]:

$$(T + 273.15)[\log_{10}(t_R) + C + ZS] = A_0 + A_1 \log_{10} \sigma + A_2 (\log_{10} \sigma)^2 \quad (2-113)$$

该模型的关键在于根据 Monkman-Grant 关系中最小蠕变速率与断裂时间关系斜率的转变点来划分数据区域, 其分界时间随温度升高而显著缩短(例如, 在 550°C、600°C、650°C 和 700°C 下, 分界时间分别为 100,000 小时、20,000 小时、7,000 小时和 1,000 小时)。模型中温度 T 适用范围为 425°C 至 650°C, 应力 $\sigma > 41MPa$, 变量 Z 根据失效概率取值(平均行为取 0, 5% 失效概率取 1.64, 1% 失效概率取 2.33), 并具有独立短期($C = 26.80300, A_0 = 22603.32, A_1 = 13143.29, A_2 = -4886.874, S = 0.2359638$)和长期($C = 18.64241, A_0 = 30080.75, A_1 = -4416.944, A_2 = 12.57805, S = 0.1022380$)参数集。此模型可以预测快堆设计寿命 60 年内的断裂时间。Japanese-98 还提供了最小蠕变速率和断裂时间, 温度的关系。

$$\dot{\varepsilon}_m = 262.24698 \cdot \exp \left[\frac{-5922.1293}{T + 273.15} \right] \cdot t_R - 1.1351216 \quad (2-114)$$

其中 t_R 和 T 和上面的相同, $\dot{\varepsilon}$ 是最小的蠕变速率, mm/h。根据 ORNL 拟合的断裂时间和应力温度关系:

$$\log_{10} t_R = C_h - 0.01312\sigma - 2.552 \log_{10} \sigma + 20.880T \quad (2-115)$$

其中 t_R 是断裂时间, h。 σ 是应力, Mpa。 T 是温度, K。 C_h 是给定热源的相对强度, -11.870。对于高强度和低强度可以分别采用-11.065 和-12.674。Japanese-98 连续循环疲劳模型:

$$(\log_{10} N_f)^{-1/2} = A_0 + A_1 \cdot \log_{10} \Delta\epsilon_1 + A_2 (\log_{10} \Delta\epsilon_1)^2 + A_4 \cdot (\log_{10} \Delta\epsilon_1)^4 \quad (2-116)$$

其中

$$T = \text{temperature}({}^{\circ}\text{C})$$

$$\Delta\epsilon_t = \text{total strain range}$$

$$N_f = \text{cycles to failure}$$

$$A_0 = 1.3203567 - 1.3046351 \times 10^{-7} \times T^2 \times R$$

$$A_1 = 8.7650102 \times 10^{-1} - 1.1381593 \times 10^{-2} \times R$$

$$A_2 = 3.1365177 \times 10^{-1} - 5.3062684 \times 10^{-8} \times T^2$$

$$A_3 = -1.6049523 \times 10^{-2}$$

$$R = \log_{10} \dot{\epsilon}$$

$$\dot{\epsilon} = \text{strain rate}(s^{-1})$$

Brinkman 对 US SS316 也进行循环疲劳的测试，下面分别给出 550 摄氏度和 600 摄氏度下的总应变和循环周期的关系：

$$\begin{aligned} SR(\%) &= 102.8261 * (\log N)^{-4.174} + 0.3091 & T = 550^{\circ} \\ SR(\%) &= 62.0(\log N)^{-3.55} + 0.232 & T = 600^{\circ} \end{aligned} \quad (2-117)$$

文章^[68]，提出另一种断裂寿命和应力关系，形式是 $t_r = B\sigma^{-n}$ 。具体的形式是：

$$t_r = 400\sigma^{-0.16} \quad \sigma = (t_r/303)^{-0.11} \quad (2-118)$$

2) D9

基于 Briggs 等人(1995)的研究，D9 包壳失效模型包含两种不同时间尺度的预测方法。对于稳态工况及长期瞬态过程（如燃耗分析），采用基于应力断裂的累积损伤分数(CDF)方法，通过高应力和低应力两组系数分别计算断裂时间，并保守地选取较小值进行 CDF 评估。对于短期瞬态过程，则采用更为复杂的瞬态失效关联式，该模型综合考虑了中子注量、瞬态温度、稳态辐照温度以及温度变化率等多物理场耦合效应，通过引入 TRAMP 函数和归一化应力参数 \square^* 来准确捕捉材料在快速瞬态条件下的失效行为。两种模型共同构成了 D9 包壳从稳态运行到极端瞬态工况的全范围失效评估体系。

(1) 稳态计算模型

D9 的应力断裂模型是没有辐照的堆外条件。需要注意的是，D9-C1P 的断裂模型本来是 20% CW316，D9-C1 是 D9 的断裂模型。总的来说，在 600 摄氏度以上，D9-C1 比 D9-C1P 有更长的疲劳寿命。

D9-C1P 的断裂模型：

$$\log_{10} t_r = A + \frac{B}{T} + \frac{C(\log_{10} \sigma)}{T} \quad (2-119)$$

其中

A	B	C	SEE	Condition
-16.638	+34054	-7113	0.26	High Stress
-12.637	+22219	-3591	0.18	Low Stress

注：具体使用哪种应力，选择依据是更小的断裂时间。

表 2-15 D9-C1P 的断裂模型

其中 t_r 是时间，h。T 是温度，K。 σ 是环向应力，MPa。SEE 是标准差。

使用条件：

- $770 < T < 1100$
- $t_r \geq 2$ hours

环向应力的计算公式是：

$$\sigma = \frac{D_0^2 + D_i^2}{D_0^2 - D_i^2} \cdot P \quad (2-120)$$

其中， D_0 是外直径， D_i 是内直径，P 是内部气体压力。

(2) 瞬态模型

瞬态失效模型是文献^[57]中附录 A.2 中给出的。模型具体形式如下：

$$\ln t_r = A + B \ln \left(\ln \left(\frac{\sigma^*}{\sigma} \right) \right) + \frac{Q}{T} + \text{TRAMP} + C \tanh(\Phi t) + 125 \left[\tanh \left(\frac{\sigma}{550} \right)^{10} \right] \left[1 - \tanh \left(\frac{TI}{583} - F \right)^{25} \right] \left[\tanh \left(\frac{TI}{583} - F \right)^{25} \right] \quad (2-121)$$

其中各参数含义如下：

$$\text{TRAMP} = -0.28 + 1.18 \tanh \left[-0.5(\ln \dot{T}) - 1 \right] \quad (2-122)$$

$$\sigma^* = 775 - \left[387.5 \tanh \left(\frac{D - TI}{E} \right) \right] \tanh \left(\frac{\Phi t}{2.0} \right) + 125 \left[\tanh \left(\frac{\sigma}{550} \right)^{10} \right] \left[1 - \tanh \left(\frac{TI}{583} - F \right)^{25} \right] \left[\tanh \left(\frac{TI}{583} - F \right)^{25} \right] \left[\tanh \left(\frac{\Phi t}{2.5} \right)^{25} \right] \quad (2-123)$$

其中的各种材料参数的变量如下：

- t_r = 失效时间, hours
- σ = 环向应力, MPa
- Φ_t = 中子注量 n/cm^2 , $E > 0.1 \text{ MeV}$, $\times 10^{22}$
- T = 温度, K
- TI = 稳态辐照温度, K
- \dot{T} = 瞬态温度速率, K/sec
- A = -43.06
- B = 7.312
- C = -1.73
- Q = 41339
- D = 1000
- E = 200
- F = 0.438

D9-C1 的断裂模型：

$$\log_{10} t_r = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T} \log_{10} \sigma + D \log_{10} \sigma \quad (2-124)$$

A	B	C	D	Condition
-10.727	29732	-7414.8	0	High Stress
-53.034	61542	-21246.8	18.361	Medium Stress
-17.141	32605	-6803.5	0	Low Stress

表 2-16 Parameters for Different Stress Conditions

其中 t_r 是时间, h。T 是温度, K。 σ 是环向应力, MPa。使用条件:

- $640 < T < 1100$
- $t_r \geq 1 \text{ hours}$

对于温度 640-820, 使用高应力的系数。对于高于 820K 之后, 采用下面的方式判断选择合适的系数。

表 2-17 Valid Stress Range for Each Equation

Condition	判断依据
High Stress	$\frac{42.306T-31810}{18.361T-13832.0} \leq \log_{10} \sigma_H$
Medium Stress	$\frac{35.893T-28937}{18.361T-14443.3} \leq \log_{10} \sigma_M \leq \frac{42.306T-31810}{18.361T-13832.0}$
Low Stress	$\log_{10} \sigma_L \frac{35.893T-28937}{18.361T-14443.3}$

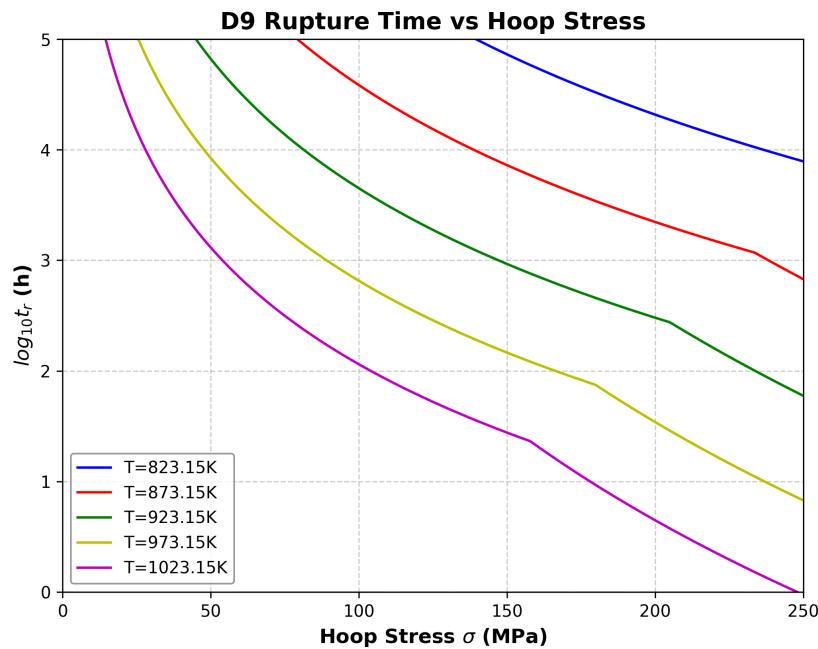


图 2-13 D9 断裂时间和环向应力关系

在文章^[68]的 973K 的实验中也提到了断裂寿命和施加应力之间的幂律定律。 $t_r = B\sigma^n$ 。D9 材料具体形式是：

$$t_r = 478\sigma^{-0.14} \quad \sigma = (t_r/394)^{-0.11} \quad (2-125)$$

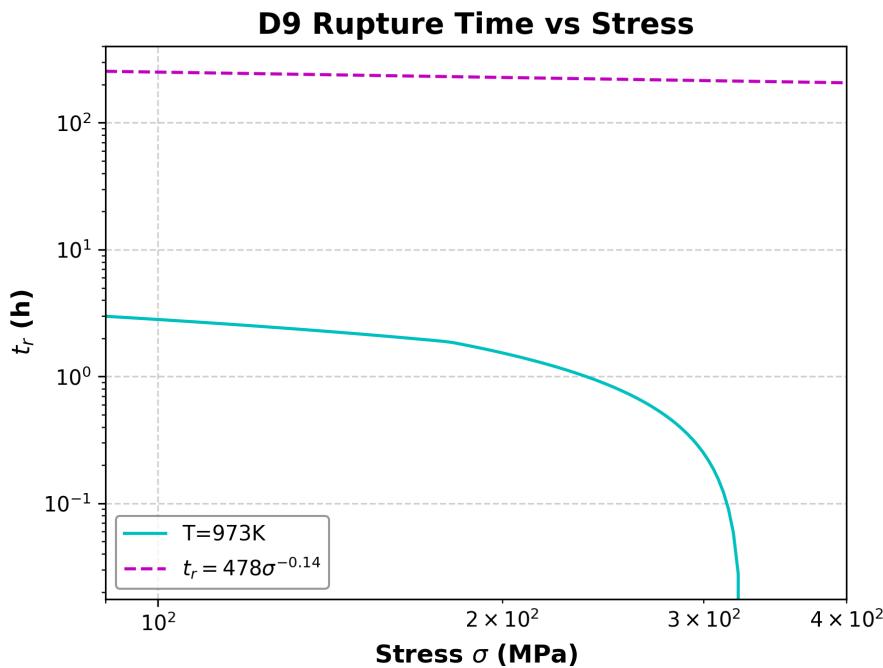


图 2-14 D9 在 973K 下两种断裂模型

3) HT9

参考 Karaha 和 Buongiomo^[69]使用的方法，考虑两种类型的包壳失效模型：一种是之前提到的基于累计损伤分数 CDF，另一种是基于约束空腔增长（CCG）并考虑扩散和蠕动以及滑动（DCS）机制。CCG 模型主要用于功率瞬态（事故工况）场景。

对于 CDF 方法存在多个破裂时间相关性研究。首先是 Karaha 和 Buongiomo^[69]研究中提到的一对长短时标的模型。其中长短时标均是 Dorn 参数关联式^[70]。另一个是来自 Metallic Fuels Handbook(MFH)^[53]的模型。由于缺少堆内的实验数据，所以采用堆外的试验结果。但是堆内的实验数据显示，破裂时间略短，尤其是在低应力的条件下，因此使用堆外的应力破裂准则和堆内蠕变模型来计算应变失效，会过高估计低应力下的应变。最后西屋公司的报告提到一个针对瞬态时间的破裂时间模型。

(1) 长/短时间尺度模型

长短时间尺度的破裂时间模型^[71]。

破裂时间 t_r 的函数（以小时为单位）：

$$C_T \theta = t_r e^{-\frac{Q_L}{RT}} \quad (2-126)$$

其中 Q_L 对于长时间尺度使用 154kcal/mol , 对于短时间尺度使用 70.17kcal/mol , R 是玻尔兹曼常数, T 是温度, K。 C_T 是 Dorn 参数, 长时间尺度取值范围是 3.915×10^{-24} , 短时间尺度的取值是 2.778×10^{-4} (所有的短时间尺度), Dorn 参数的 θ 来源曲线拟合:

$$\log_{10} \theta = 2028.9 - 800.13 \log_{10} \sigma_\theta + 105.26(\log_{10} \sigma_\theta)^2 - 4.63886(\log_{10} \sigma_\theta)^3 \quad (2-127)$$

$$\log_{10} \theta = -109.212 + 30.801 \log_{10} \sigma_\theta - 2.3811(\log_{10} \sigma_\theta)^2 + 0.00622(\log_{10} \sigma_\theta)^3 \quad (2-128)$$

分别表示长时间和短时间尺度, 其中 σ_θ 表示环向应力, Pa。

如果同时选择两个时间尺度, 采用较长的破裂时间作为实际的破裂时间^[72]。同时选择两种相关性时, 可能会出现错误值。当模拟值落在长期和短期尺度相关性重叠的范围内时, 建议同时使用这两种相关性。

(2) MFH

MFH^[53]提供了另一套 HT9 的蠕变失效的关系式。和上面的类似, MFH 模型也采用两阶段方法来解释高应力和低应力的断裂时间。

未辐照的 HT9 的断裂时间模型:

$$\log_{10} t_r = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T} \log_{10} \sigma \quad (2-129)$$

	A	B	C
High Stress	-32.490	57781	-11800
Low Stress	-35.173	45858	-5563.1

注: 具体使用哪种应力, 选择依据是更小的断裂时间。

表 2-18 Stress Data

其中

σ = 环向应力, MPa

t_r = 失效时间, hrs

T = 温度, $700 \leq T \leq 1100K$

高温下的断裂没有相关表达式, 根据相关研究表明, 高温下断裂的应变会变大 (10-

30%)。

(3) WHC

在 1994 年，西屋汉福德公司^[73] (WHC) 提供了一个 HT9 的断裂时间模型，主要用于瞬态条件下。在 WHC 关系式中，断裂时间 t_r 是温度和应力的函数：

$$t_r = \theta e^{\frac{Q}{RT}} \quad (2-130)$$

其中 θ 是 Dorn 参数， Q 是活化能 70.17kcal/mol ，R 是气体常数，T 是温度，K。 t_r 是失效时间，s。

Dorn 参数 θ 的是环向应力 σ 的函数，计算公式：

$$\log_e \theta = A + B \log_e \left[\log_e \left(\frac{\sigma^*}{\sigma} \right) \right] \quad (2-131)$$

其中 $\sigma^* = 730\text{MPa}$ 是材料的标称硬度。拟合系数 $B=12.47$ ，同时假设和温度无关。A 是温度的函数，计算公式：

$$A = \begin{cases} 24.942 - 0.153 \cdot (T - 273.15) + 9.488 \times 10^{-5} \cdot (T - 273.15)^2 & T < 1144.15 \\ -36.1 + 1.5 \tanh \left(\frac{T-1144.15}{80.0} \right) & 1144.15 \leq T < 1393.15 \\ -36.1 + 1.5 \tanh \left(\frac{179}{80.0} \right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2-132)$$

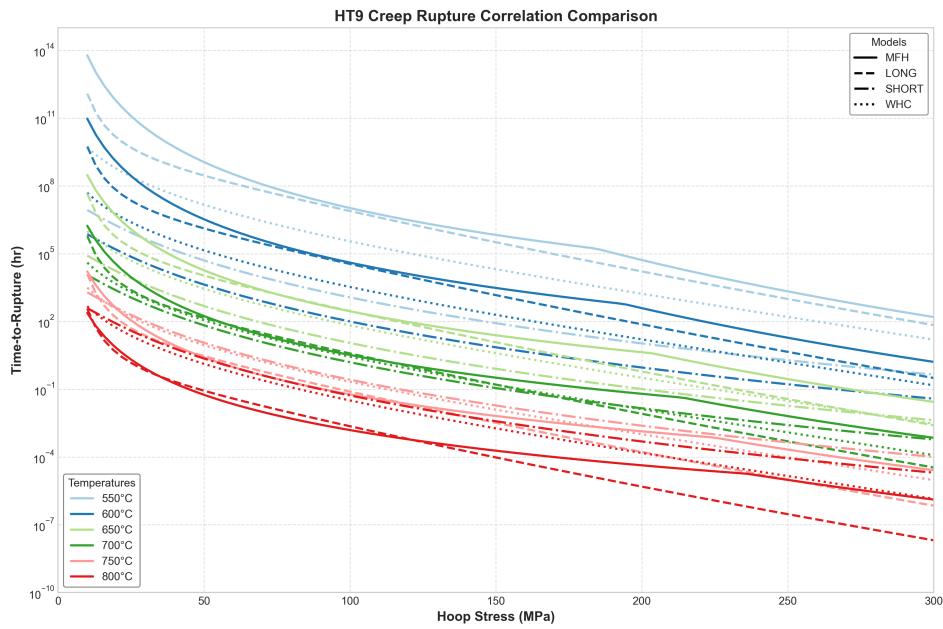


图 2-15 D9 断裂时间和环向应力关系

(4) 受约束空洞聚集模型 (CCG)

采用 D&CS 的约束空洞聚集 (CCG) 模型^[74]可计算沿晶界周期性分布的空洞的裂纹半径 a 。空洞中心以间距 $2b$ 等距分布，当 $a = b$ 时发生失效。该模型对用户提供的 b 值高度敏感。在多数情况下， b 值可通过实验数据确定，或根据所模拟实验中已知的失效情况进行拟合。若 b 值未知或存在不确定性，也可采用短时失效模拟中使用的短时 CDF 模型。

裂纹半径增长率 \dot{a} 与空腔体积增长率 \dot{V} 的关系为：

$$\dot{a} = \frac{\dot{V}}{4\pi a^2 h(\psi)} \quad (2-133)$$

其中 $h(\psi)$ 的定义：

$$h(\psi) = \frac{1}{\sin \psi} \left[\frac{1}{1 + \cos \psi} - \frac{\cos \psi}{2} \right] \quad (2-134)$$

其中 $\cos \phi = \gamma_b / 2\gamma_s$ 是晶粒边界自由能与两倍晶粒表面自由能之比。

对于 $a/L \leq 10$ 的情况，体积增长率 \dot{V} 是刚性晶粒增长率 \dot{V}_1 与幂律蠕变材料增长率 \dot{V}_2 之和。

$$\dot{V}_1 = 4\pi D \frac{\sigma_n - (1-f)\sigma_s}{\ln(1/f) - (3-f)(1-f)/2}$$

$$\dot{V}_2 = \begin{cases} \pm 2\pi \dot{\epsilon}_e^C a^3 h(\psi) \left[\alpha_n \left| \frac{\sigma_m}{\sigma_e} \right| + \beta_n \right]^n, & \text{for } \pm \frac{\sigma_m}{\sigma_e} > 1 \\ 2\pi \dot{\epsilon}_e^C a^3 h(\psi) [\alpha_n + \beta_n]^n \frac{\sigma_m}{\sigma_e}, & \text{for } \left| \frac{\sigma_m}{\sigma_e} \right| \leq 1 \end{cases} \quad (2-135)$$

其中 σ_n 是平均法向应力。烧结应力可通过 $\sigma_s = 2\gamma_s(\sin \psi)/a$ 计算。晶界扩散参数为 $D = D_B \delta_B \Omega / RT$, 其中 $D_B \delta_B$ 为晶界扩散系数, Ω 为原子体积, R 为玻尔兹曼常数, T 为以开尔文为单位的绝对温度。晶界面面积分数 f 由下式确定:

$$f = \max \left\{ \left(\frac{a}{b} \right)^2, \left(\frac{a}{a + 1.5L} \right)^2 \right\} \quad (2-136)$$

其中 $L = (D\sigma_e/\dot{\epsilon}_e^C)^{1/3}$ 。冯·米塞斯应力为 σ_e , 静水压(平均)应力为 σ_m , 有效蠕变应变速率为 $\dot{\epsilon}_e^C$ 。假设材料遵循幂律蠕变规律, 则 n 为幂指数, $\alpha_n = 3/2n$, $\beta_n = (n - 1)(n + 0.4319)/n^2$ 。

假定裂纹长度起始于一个最小值, 且不允许低于该值。裂纹在扩展后仍可能收缩, 但一旦发生失效, 便视为永久性裂纹, 不再缩短。裂纹长度的计算方法是: 将当前时间步长乘以所计算的扩展速率 \dot{a} 。

2.6.8 蠕变

蠕变包含热蠕变 $\bar{\varepsilon}_T$ 和辐照蠕变 $\bar{\varepsilon}_I$ 。总蠕变是两者之和 $\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}_T + \bar{\varepsilon}_I$ 。

1) SS316

在文章^[68]中提到了 SS316 的蠕变模型, 蠕变率模型满足 $t_r = B\sigma^{-n}$ 。具体的模型是:

$$\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-28} \sigma^9 \quad (2-137)$$

其中 $\dot{\varepsilon}$ 的单位是 $1/s$, 应力单位是 MPa 。

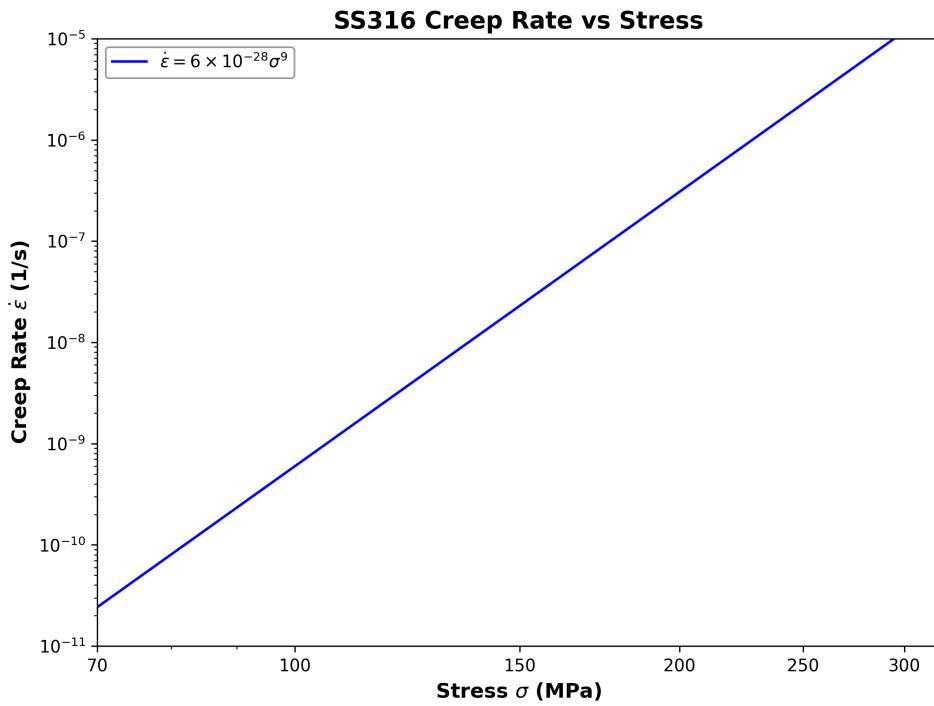


图 2-16 SS316 蠕变速率和应力关系曲线

此外最小的蠕变速率和失效时间的关系 Monkman Grant relationship(MGR) $\dot{\varepsilon}_m^a t_r = C$ 。此外 Dobes 和 Millicka 提出了一种蠕变速率和断裂寿命之间的关系, $(\dot{\varepsilon}_m^a t_r) / \varepsilon_t = C'$, 称为修正后的蒙克曼关系 (MMGR)。

MGR 的 SS316 模型:

$$\varepsilon^{-0.66} t_r = 0.839 \quad (2-138)$$

MMGR 的 SS316 模型:

$$(\dot{\varepsilon}_m^{-0.97} t_r) / \varepsilon_t = 0.306 \quad (2-139)$$

在文章^[75]中提到了 FFTF 堆芯内的 20% 冷加工的 SS316 辐照蠕变和热蠕变模型。同时该蠕变模型也用在 FEAST 程序^[76]。模型具体形式如下:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon} = & \left(3a_1 \varphi \exp(-3\varphi t) \sigma + 26.36 a_2 \left(\frac{\varphi t}{\varphi} \right)^{-0.5} \sigma^{4.5} \right. \\ & + 2.78 \times 10^3 \cdot 3a_3 \left(\sinh \left(\frac{\sigma}{\sigma_1 H} \right) \right)^2 \left(\frac{2.78 \times 10^3 \varphi t}{\varphi} \right)^2 \\ & \times \left[\sinh \left(\frac{\sigma}{\sigma_1 H} \right) - \frac{\sigma}{\sigma_1} \frac{1}{2H} \left(\frac{\varphi}{\sqrt{\varphi_t} + \varphi t} \right) \cosh \left(\frac{\sigma}{\sigma_1 H} \right) \right] \times 10^{-7} \\ & \left. + a_4 \varphi \sigma + \frac{a_5}{a_6} 2.20 \tanh \left(\frac{\varphi t}{\Omega} \right) \sigma \right] \times 10^{-7} \quad (2-140) \end{aligned}$$

其中

$\Omega : 9$

$$a_1 = 134 \exp\left(-\frac{188000}{RT}\right)$$

$$a_2 = \exp\left(1.41 - \frac{24000}{T}\right)$$

$$a_3 = \exp\left(77.84 - \frac{95000}{T}\right)$$

$$a_4 = 7.25 \times 10^{-4}$$

$$a_5 = \exp\left(2.91 - \frac{16000}{RT}\right)$$

$$a_6 = 1 + \exp\left(45 - \frac{80000}{RT}\right)$$

$$\varphi : \text{Neutrons/cm}^2/\text{s}/10^{15}$$

$$\varphi : \text{Neutrons/cm}^2/10^{22}$$

$$\sigma : \text{Equivalent stress (MPa)}$$

$$T : \text{Temperature (K)}$$

$$\dot{\epsilon} : \text{creep rate}(\%/\text{s})$$

FEAST 程序中省略了第三项，同时如果使用文献^[75]的积分形式进行推导，修改了部分第三项的组成，包含原文献中 $1 - \frac{1}{H}$ 和第三项系数的问题。最终蠕变率随等效应力的关系如下图所示。

2) D9

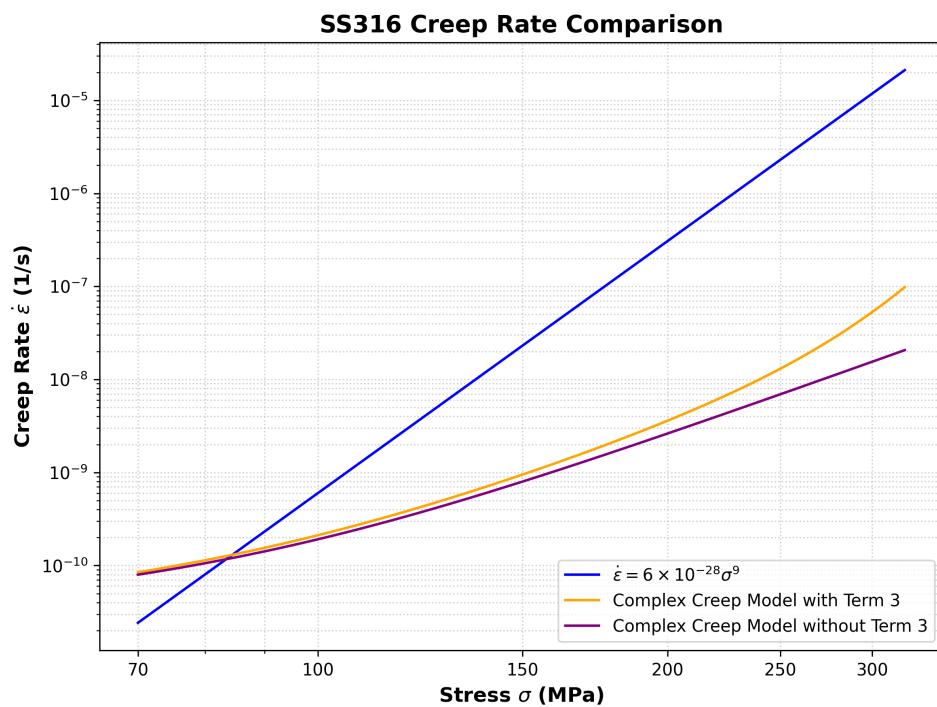
D9 的堆内辐照蠕变模型^[77]如下：

积分形式：

$$\bar{\varepsilon} = A_1 \exp\left(-\frac{A_2}{T}\right) [1 - \exp(-3\Phi)] \bar{\sigma} + A_3 \Phi \bar{\sigma} + A_6 t \left(\frac{\bar{\sigma}}{Y}\right)^4 \exp\left(-\frac{A_7}{T}\right) + 2.2R(T) (\Omega)^2 \bar{\sigma} \log_e \left[\cosh\left(\frac{\Phi}{\Omega}\right)\right] + A_8 \quad (2-141)$$

需要注意， A_6 和 A_4 开头的代表热蠕变。

蠕变率形式：



$$\dot{\bar{\varepsilon}} = \left[3A_1 \exp\left(-\frac{A_2}{T}\right) \exp(-3\Phi) \bar{\sigma} + A_3 \bar{\sigma} + 2.2R(T)\Omega \bar{\sigma} \tanh\left(\frac{\Phi}{\Omega}\right) \right] \phi \times 10^{-7} + A_6 \left(\frac{\bar{\sigma}}{Y}\right)^4 \exp\left(-\frac{A_7}{T}\right) + A_4 \bar{\sigma} \exp\left(-\frac{A_8}{T}\right) \quad (2-142)$$

其中

$$R(T) = c_0 \exp[-c_1(T - c_2)^2]$$

t = time in units of s

T = temperature in units of K

$Y = 223000 - 79.29T$ = Young's Modulus in units of MPa

Φ = 中子注量 fluence in units of 10^{22} n/cm² [$E > 0.1$ MeV]

ϕ = 中子注量率 flux in units of 10^{15} n/cm² · s [$E > 0.1$ MeV]

$\bar{\sigma}$ = 有效应力 effective stress in units of MPa

$\bar{\varepsilon}$ = 有效应变 effective strain in units of %

$\dot{\bar{\varepsilon}}$ = 有效应变速率 effective strain rate in units of %/s

其中的常数：

$$A_1 = 67$$

$$A_2 = 9461$$

$$A_3 = 1.0 \times 10^{-4}$$

$$A_4 = 3955$$

$$A_5 = 27680$$

$$A_6 = 6.14 \times 10^{13}$$

$$A_7 = 17111$$

$$\Omega = 9, \text{ expressed in units of } 10^{22} \text{ n/cm}^2$$

$$c_0 = 1.9 \times 10^{-4}$$

$$c_1 = 3.0 \times 10^{-5}$$

$$c_2 = 823$$

使用范围：1. 温度范围 $350 - 750^\circ\text{C}$ 。2. 应变小于 10^{-5}s^{-1} 。3. 中子注量率的量级在 $2 \times 10^{15} \text{ n/cm}^2 \cdot \text{s}$ 。

在^[68]中，文章侧重于 973K 热蠕变对失效的实验，提到了另一个关于 D9 的蠕变模型。

$$\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-30} \sigma^{9.2} \quad (2-143)$$

其中 $\dot{\varepsilon}$ 的单位是 $1/\text{s}$ ，应力单位是 MPa 。

此外最小的蠕变速率和失效时间的关系 Monkman Grant relationship(MGR) $\varepsilon_m^a t_r = C$ 。此外 Dobes 和 Millicka 提出了一种蠕变速率和断裂寿命之间的关系， $(\dot{\varepsilon}_m^{al} t_r) / \varepsilon_t = C'$ ，称为修正后的蒙克曼关系 (MMGR)。

MGR 的 D9 模型：

$$\varepsilon^{-0.722} t_r = 0.276 \quad (2-144)$$

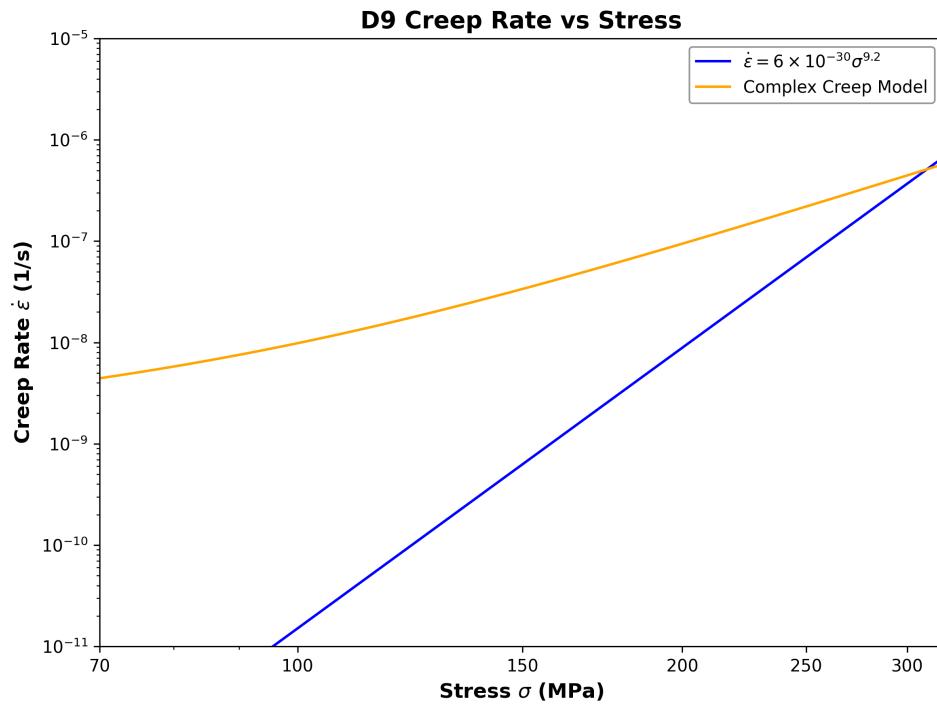
MMGR 的 D9 模型：

$$(\dot{\varepsilon}_m^{-0.85} t_r) / \varepsilon_t = 1.77 \quad (2-145)$$

3) HT9

HT9 的蠕变^[77]比 D9 要简单一些，主要原因是没有冷加工水平移动位错导致的瞬态项。基于堆外数据开发的热蠕变模型，适用超过 600 摄氏度。在 750 摄氏度以上，热蠕变占主导。

辐照导致的蠕变 $\bar{\varepsilon}_I$



$$\bar{\varepsilon}_I = \left[B_0 + A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \right] \phi t \bar{\sigma}^{1.3} \quad (2-146)$$

其中

$\bar{\varepsilon}_I$ = 等效应变 effective strain, %

$\bar{\sigma}$ = 等效应力 effective stress, MPa

$B_0 = 1.83 \times 10^{-4}$

ϕt = 中子注量 neutron fluence 10^{22} n/cm² ($E > 0.1$ MeV)

$A = 2.59 \times 10^{14}$

$Q = 73000$

T = 温度 temperature, K

$R = 1.987$

如果是转化为蠕变率的形式，辐照蠕变的速率是：

$$\dot{\varepsilon}_I = \left[B_0 + A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \right] \phi \bar{\sigma}^{1.3} \quad (2-147)$$

其中 $\dot{\varepsilon}_I$ 是辐照蠕变速率, %/s。

热蠕变使用下面的表达式

$$\bar{\varepsilon}_T = \bar{\varepsilon}_{TP}(\text{Primary}) + \bar{\varepsilon}_{TS}(\text{Steady-State}) + \bar{\varepsilon}_{TT}(\text{Tertiary}) \quad (2-148)$$

其中

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon}_{TP} &= \left[C_1 \exp\left(-\frac{Q_1}{RT}\right) \bar{\sigma} + C_2 \exp\left(-\frac{Q_2}{RT}\right) \bar{\sigma}^4 + C_3 \exp\left(-\frac{Q_3}{RT}\right) \bar{\sigma}^{0.5} \right] \times (1 - \exp(-C_4 t)) \\ \bar{\varepsilon}_{TS} &= \left[C_5 \exp\left(-\frac{Q_4}{RT}\right) \bar{\sigma}^2 + C_6 \exp\left(-\frac{Q_5}{RT}\right) \bar{\sigma}^5 \right] t \\ \bar{\varepsilon}_{TT} &= C_7 \exp\left(-\frac{Q_6}{RT}\right) \bar{\sigma}^{10} t^4\end{aligned}$$

热蠕变率的形式:

$$\dot{\varepsilon}_T = \dot{\varepsilon}_{TP} + \dot{\varepsilon}_{TS} + \dot{\varepsilon}_{TT} \quad (2-149)$$

各个部分分别是:

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_{TP} &= \left[C_1 \exp\left(-\frac{Q_1}{RT}\right) \bar{\sigma} + C_2 \exp\left(-\frac{Q_2}{RT}\right) \bar{\sigma}^4 + C_3 \exp\left(-\frac{Q_3}{RT}\right) \bar{\sigma}^{0.5} \right] C_4 \exp(-C_4 t), \\ \dot{\varepsilon}_{TS} &= C_5 \exp\left(-\frac{Q_4}{RT}\right) \bar{\sigma}^2 + C_6 \exp\left(-\frac{Q_5}{RT}\right) \bar{\sigma}^5 \\ \dot{\varepsilon}_{TT} &= 4C_7 \exp\left(-\frac{Q_6}{RT}\right) \bar{\sigma}^{10} t^3.\end{aligned}$$

以上公式中使用的常数如下:

$$C_1 = 13.4$$

$$C_2 = 8.43 \times 10^{-3}$$

$$C_3 = 4.08 \times 10^{18}$$

$$C_4 = 1.6 \times 10^{-6}$$

$$C_5 = 1.17 \times 10^9$$

$$C_6 = 8.33 \times 10^9$$

$$C_7 = 9.53 \times 10^{21}$$

$$Q_1 = 15027$$

$$Q_2 = 26451$$

$$Q_3 = 89167$$

$$Q_4 = 83142$$

$$Q_5 = 108276$$

$$Q_6 = 282700$$

$\bar{\varepsilon}_T$ = 有效热蠕变 effective thermal creep strain, %

R = 气体常数 gas constant = 1.987

t = 时间 time, seconds

T = 温度 temperature, K

$\bar{\sigma}$ = 有效应力 effective stress, MPa

$\dot{\varepsilon}_T$ = 有效热蠕变速率 effective thermal creep strain rate, %/s

模型的使用范围是：温度 350-750°C。应力范围 0-250MPa。

在 Bison^[78]中也有 HT9 的蠕变模型，其参考文献也说明来自^[77]，但是只有上面蠕变模型的部分。

$$\dot{\varepsilon}_{cr} = C_5 \exp\left(-\frac{Q_4}{RT}\right) \bar{\sigma}^2 + C_6 \exp\left(-\frac{Q_5}{RT}\right) \bar{\sigma}^5 + \left[B_o + A \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \right] \phi \bar{\sigma}^{1.3} \quad (2-150)$$

其中各参数定义及取值如下：

$$C_5 = 1.17 \times 10^9$$

$$C_6 = 8.33 \times 10^9$$

$$Q_4 = 83142 \text{ cal/g-mol}$$

$$Q_5 = 108276 \text{ cal/g-mol}$$

$$B_o = 1.83 \times 10^{-4}$$

$$A = 2.59 \times 10^{14}$$

$$Q = 73000 \text{ cal/g-mol}$$

$$R = 1.987 \text{ cal/(g-mol}\cdot\text{K)}$$

$$T = \text{Temperature (K)}$$

$$\phi = \text{Neutron Flux } (10^{22} \text{ n}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s}))$$

$$\bar{\sigma} = \text{Effective stress (MPa)}$$

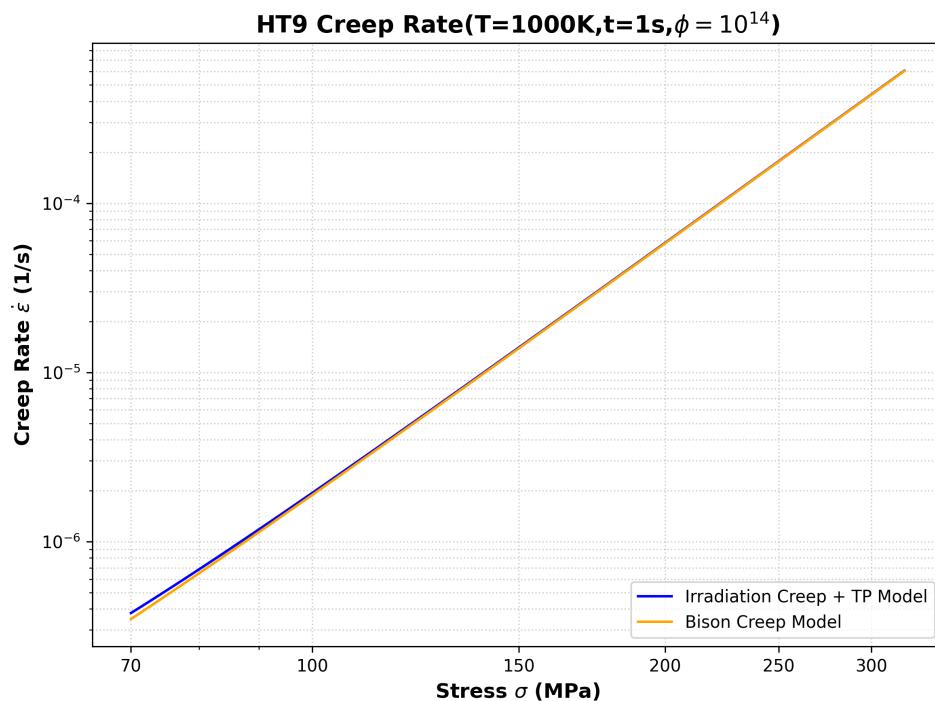


图 2-17 HT9 蠕变速率和应力关系曲线

$$\dot{\varepsilon}_{cr} = \text{Creep rate } (\%/\text{s})$$

在参考文献^[79]中也存在另一种形式的蠕变模型，模型包含一阶蠕变和二阶蠕变。具体的形式是：

$$\dot{\varepsilon}_{xy,rky} = 0.01 \left(10^{0.52 - 2647.31/T} \sigma^{1.09 + 31.48/T} \right) m \exp(-mt) \quad (2-151)$$

其中 T 是温度，单位为 K，σ 是冯米塞斯应力，单位为 MPa，m 是时间，单位为 s。
 $m = -2.11 \times 10^{-6}$ 1/s。

$$\dot{\varepsilon}_{xy,rky} = 10^{-5.58 - 5562.28/T} \sigma^{1.5} \quad (2-152)$$

其中 T 是温度，单位为 K，σ 是冯米塞斯应力，单位为 MPa。

2.6.9 屈服应力

1) SS316

V. Karthik 做了高剂量下的 SS316 力学性能测试，根据实验结果总结如下：

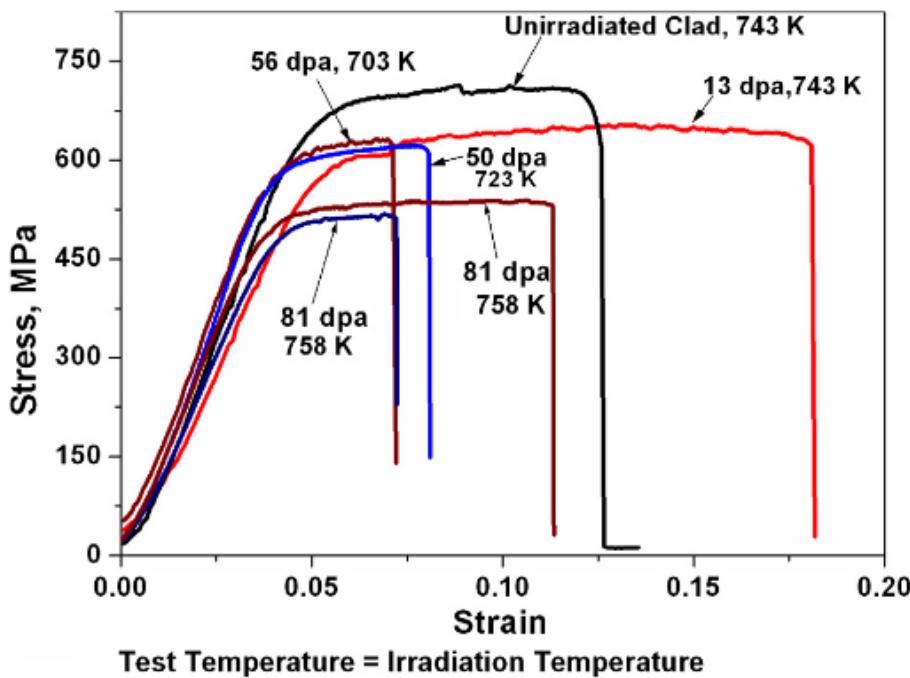


图 2-18 SS316 辐照下的应力应变曲线

在对应于低 dpa (10 dpa) 的第一阶段，当照射温度约为 723 K 时，机械性能迅速变化至接近饱和。冷加工钢在低于 723 K 的温度下，这种变化表现为硬化和延展性下降，而在 723 K 以上则表现为软化。在第二阶段 ($10 < \text{dpa} < 60$)，拉伸性能随着 dpa 缓慢变化。当辐照温度和 dpa 使空洞膨胀显著时，空洞膨胀对力学性能产生最强的影响。已观察到延展性和膨胀之间的直接相关性，这要么是由于空洞促进脆性断裂的直接作用，要么是由于辐照诱导的偏析在空洞存在下产生的间接作用。强度降低可归因于高空洞密度和大量析出物导致的高应力集中，从而引起软化、流动局部化和相应的延展性损失。第三种状态对应于高于 873 K 的照射温度，这会导致在与氦脆相关的高温下延展性降低。

文章没有给出具体的模型，需要后面进行拟合。

2) D9

D9-C1 的屈服应力会根据批次和热处会不同，存在大约 10% 的误差。对 D9-C1P 的屈服应力了解不够充分，和 D9-C1 相比，高温下的差异会变的明显，但是没有足够的数据。此处使用统一的模型。

对于辐照或者未辐照条件下的 D9 的屈服强度 (0.2% 应变) 模型：

$$\ln \left(\frac{F\sigma^*}{\sigma_y} \right) = A \left[\frac{\left(\frac{\sigma^*}{G} \right)^M}{\dot{\varepsilon} \exp \left(\frac{Q}{RT_k} \right)} \right]^\lambda \quad (2-153)$$

其中

$$\begin{aligned}
 \sigma^* &= 450 - 240 \tanh\left(\frac{T_T - 760}{300}\right) & E &= 0.15 + 0.15 \tanh\left(\frac{T_i - 630}{10}\right) \\
 G &= 78600 - 38.41 T_T & \sigma_y &= \text{屈服强度(0.2% offset yield strength, MPa)} \\
 A &= 30000 & G &= \text{剪切模量(Shear modulus, MPa)} \\
 M &= 5.5 & T_T &= T_k - 273 \\
 \lambda &= 0.22 & T_k &= \text{测试温度, K} \quad (273 \text{ K} \leq T_k \leq 1133 \text{ K}) \\
 Q &= 70000 & T_i &= T_I - 273 \quad (273 \text{ K} \leq T_1 \leq 1023 \text{ K}) \\
 R &= 1.98726 & T_I &= \text{辐照温度, K} \quad (273 \text{ K} \leq T_1 \leq 1023 \text{ K}) \\
 F^\oplus &= B - C \tanh\left(\frac{T_i - D}{170}\right) - E & \phi t &= \text{Fast fluence, } 10^{22} \text{ n/cm}^2 \quad (\phi t \leq 12 \times 10^{22} \text{ n/cm}^2) \\
 B &= 1.495 \pm 0.03 \phi t & \dot{\varepsilon} &= \text{Strain rate, s}^{-1} \quad (10^{-5} \text{ s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 10^{-2} \text{ s}^{-1}) \\
 C &= 0.776 + 0.046 \phi t \\
 D &= 384 - 4.4 \phi t
 \end{aligned}$$

3) HT9

未辐照和辐照之后的 HT9 的模型是 NSMH 提出的。对于辐照影响的使用范围：快中子通量要小于 $11 \times 10^{22} \text{ n/cm}^2$ ，辐照温度尽量小于 600°C 。在 600°C 之后屈服应力会减弱，可能是因为过度加热。

$$\ln\left(\frac{\sigma^* F}{\sigma_y}\right) = A \left[\frac{\left(\frac{\sigma^*}{G}\right)^M}{\dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q}{RT_k}\right)} \right]^\lambda \quad (2-154)$$

其中

$$F^{\textcircled{1}} = B \left[1 - 0.5 \tanh \left(\frac{T_i - D}{90} \right) \right]^{0.5} + C \quad \sigma_y = 0.2\% \text{ 屈服应力 (offset yield strength, MPa)}$$

$$G = \text{剪切模量 (Shear modulus, MPa)}$$

$$A = 20000$$

$$T_t = T_k - 273$$

$$M = 5$$

$$T_i = T_1 - 273$$

$$\lambda = 0.172$$

$$T_1 = \text{辐照温度 (Irradiation temperature, K) } (723 \text{ K} < T_1 <$$

$$Q = 82000$$

$$T_k = \text{测试温度 (Test temperature, K)}$$

$$R = 1.98726$$

$$\phi t = 10^{22} \text{ n/cm}^2, E > 0.1 \text{ MeV}$$

$$\sigma^* = 430 - 190 \tanh \left(\frac{T_t - 640}{225} \right)$$

$$\dot{\varepsilon} = \text{应变率 (Strain rate, s)}^{-1}$$

$$G = 89640 - 53.78 T_t$$

$$\phi t < 11 \times 10^{22} \text{ n/cm}^2$$

$$B = 1 - 0.02 \phi t$$

$$C = 0.02 \phi t$$

$$D = 425 + 10 \phi t$$

2.6.10 极限拉伸强度

极限拉伸强度 (ultimate tensile strength), 简称为 UTS。

1) D9

D9 的极限拉伸强度是温度、辐照温度和辐照暴露。此外还需要用到之前提到的屈服应力。

$$\sigma_{\text{UTS}} = \sigma_{\text{YS}} \left[0.295 \left(1 - 0.9 \tanh \frac{\Delta T + 400}{150} \right) + 1.055 \right] \quad (2-155)$$

其中：

$$\sigma_{\text{UTS}} = \text{极限拉伸强度, MPa}$$

$$\sigma_{\text{YS}} = \text{屈服强度, MPa}$$

$$\Delta T = T_T - T_i$$

$$T_T = \text{测试温度, T}$$

$$T_i = \text{辐照温度, T}$$

^① 未辐照条件下 $F = 1$

中子通量，温度和应变率通过影响屈服强度进而影响极限拉伸强度。在计算非辐照的极限拉伸强度时，设置 $F = 1$ ，同时 $\Delta T = 0$ 。

模型的使用条件是辐照温度 640-1010K，应变率 $\geq 10^{-5}/s$ 。

2) HT9

未辐照的 HT9 的极限拉伸强度模型，应变率、温度、和中子是通过影响屈服应力进而影响极限拉伸强度。

$$\sigma_u = \sigma_y \left[1.1 - 0.1 \tanh \left(\frac{\Delta T - 200}{200} \right) \right] \quad (2-156)$$

其中

$$\Delta T = T_t - T_i$$

σ_u = 极限拉伸强度 (Ultimate tensile strength, MPa)

σ_y = 屈服强度 (Yield strength, MPa)

T_t = 测试温度 (Test temperature, K)

T_i = 辐照温度 (Irradiation temperature,) $723 < T_i < 933$ K

要计算未辐照的极限拉伸强度，设置 $\Delta T = T_t - 848$ ，同时屈服强度 σ_y 使用未辐照的。

2.6.11 总伸长量

1) D9

D9-C1 在辐照和未辐照，应变率小于 10^{-5} 条件下，总伸长率 (total Elongation) 的模型：

$$\varepsilon_t = -2.22 + 1.64 \times 10^{-2} T_1 + 2.17 \times 10^{-4} \exp \left(\frac{T_1}{100} \right) - 6.3 \times 10^{-3} T_t \quad (2-157)$$

其中：

ε_t = 总伸长量，%

T_t = 测试温度，K

T_i = 辐照温度，K $640 < T_i < 1010$ K

注意，模型的使用条件是 $T_t = T_i$ ，或者是 $T_t = T_i + 110\text{K}$ 。此外，该方程适用于 $T_t = T_i$ 或 $T_t = T_i + 110\text{K}$ 的条件。此外，辐照硬化或软化取决于辐照温度，因此在 T_i 和 T_t 之间存在其他关系的情况下，不应使用该方程进行建模。

2) HT9

未辐照的辐照之后的 HT9 的延展性基本类似，所以总伸长量不包含辐照累计项。

$$\varepsilon_t = 9.97 + 1.34 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{T_t}{100}\right) \quad (2-158)$$

其中

ε_t = 总伸长量 (total elongation, %)

T_t = 测试温度 (Test temperature,) $273 < T_t < 973\text{ K}$

2.6.12 弹性模量和泊松比

1) D9

杨氏模量^[77] (E), 剪切模量^[77] (G), 和泊松比 (μ) 均是温度的函数：

$$E = 2.01 \times 10^5 - 79.29T \quad (2-159)$$

$$G = 7.86 \times 10^4 - 38.41T \quad (2-160)$$

$$\nu = \frac{E}{2G} - 1 \quad (2-161)$$

其中：

E, G 单位是 MPa

T 单位是 $^{\circ}\text{C}$

使用范围是 $0 < T \leq 800\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。

2) HT9

杨氏模量^[77] (E), 剪切模量^[77] (G), 和泊松比 (μ) 均是温度的函数：

$$E = 2.137 \times 10^5 - 102.74T \quad (2-162)$$

$$G = 8.964 \times 10^4 - 53.78T \quad (2-163)$$

$$\nu = \frac{E}{2G} - 1 \quad (2-164)$$

其中：

E, G 单位是 MPa

T 单位是 $^{\circ}\text{C}$

使用范围是 $0 < T \leq 800^{\circ}\text{C}$ 。

3) SS316

两种 SS316 的杨氏模量和泊松比的模型，一个是来源^[80](ORNL)，另一个来源根据 Bison 网站描述已经不可查证(LEGACY_IFR)。

第一个模型是基于静态条件下的动态测量。将 304 不锈钢的动态测试杨氏模量与静态值进行比较，发现两者相似。此外，还比较了 304 和 316 不锈钢的动态杨氏模量值，发现他们相似。因此该模型使用动态测试数据来近似稳态值。杨氏模量的拟合结果：

$$E = 198.0 \left(1 - 3.93625 \times 10^{-4} T_C - 8.37648 \times 10^{-8} T_C^2 + 9.26214 \times 10^{-11} T_C^3 \right) \quad (2-165)$$

其中 E 单位是 GPa， $T_C = T - 273.15 - 24$ ， T 是开氏温度，泊松比表达式：

$$\nu = 0.29015 \left(1 + 3.55518 \times 10^{-4} T_C - 2.20321 \times 10^{-7} T_C^2 + 1.18177 \times 10^{-10} T_C^3 \right) \quad (2-166)$$

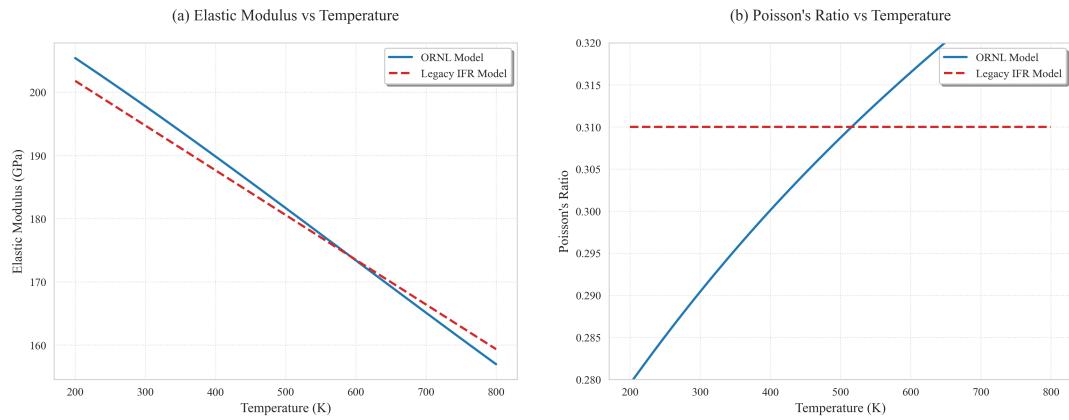
LEGACY_IFR 的模型是源自整体式快堆手册的旧模型，原始的参考文献已经找不到，模型如下：

$$E = 2.15946 \times 10^{11} - 7.07727 \times 10^7 T \quad \text{Pa} \quad (2-167)$$

$$\nu = 0.31 \quad (2-168)$$

2.6.13 损伤

处列出常见的五种损伤模型，希望之后在 MOOSE 中实现。在损伤模型中总是用寿命周期 (N) 来表示，这是因为 N 总是通过实验获取，一次循环中带来的损伤因子可以认为是 $\frac{1}{N}$ ，当满足 $D = 1$ 的时候，材料破損。



1) 线性损伤模型

线性损伤模型应该是最简单使用最广的预测损伤的模型，通常使用下式：

$$D_f + D_c = 1 \text{ (at failure)} \quad (2-169)$$

其中 D_f 和 D_c 分别是疲劳和蠕变损伤。在美国机械工程师协会中采用周期和时间的比表示：

$$\sum \frac{n}{N_f} + \sum \frac{t}{t_r} \leq D \quad (2-170)$$

其中，D 是总蠕变-疲劳损伤，n 是特定加载下的循环次数， N_f 是特定应变范围内的失效的循环次数。t 是特定加载下的持续时间， t_r 是给定加载条件下的等温应力断裂曲线得到的断裂时间。

这种简单的相加的方法，在很多情况下是不合适的，原因如下。

- 在蠕变的损伤中，压缩和拉伸的损伤都是通过拉伸的应力数据进行等价的。
- 一些材料比如不锈钢 304 和合金 800H，D 远小于 1，并且随应力减少而减少和随维持的时间增加而增加，例如在合金 800H 中，D 的值范围 0.1 ~ 0.5。因此对于低应变长维持时间的情况，给出一个符合要求的 D 值是非常困难的。
- 环境相互作用能够影响裂纹的形核和扩展，但这种方法并没有直接考虑到这一点。因此，当表明存在明显的真正蠕变-疲劳相互作用时，它实际上可能是由于环境效应造成的，比如在空气中测试 2 · 25Cr-1Mo 钢时发生的情况。
- 这些材料可能循环硬化或软化，这取决于材料、热处理和应变范围，因此由原始材料确定的持久性能可能不合适。如果有循环蠕变数据，可以利用循环蠕变数据对这一问题进行修正。

2) 延性耗竭

这种方法中，疲劳和蠕变被视为独立的损伤过程，它们相互竞争导致失效。在最少的循环次数内达到其临界延性的机制主导了破坏模式（即沿晶蠕变或穿晶疲劳）。如果是蠕变导致的失效，模型表示为：

$$N_c \Delta \varepsilon_c = \phi_c \quad (2-171)$$

其中 N_c 是蠕变损伤占主导地位时的寿命， $\Delta \varepsilon_c$ 是每一个载荷维持阶段蠕变应变的累积量， ϕ_c 是断裂实验得到的蠕变断裂延性。纯疲劳主导的寿命 N_p （频率无关）也可以使用类似的方程表示：

$$N_p = \left(\frac{2\Delta \varepsilon_p}{\phi_p} \right)^{-\text{constant}} \quad (2-172)$$

其中 $\Delta \varepsilon_p$ 是塑形应变， ϕ_p 是疲劳延性。对于蠕变-疲劳交互作用，两种损伤机制采用线性求和：

$$\frac{1}{N_c} + \frac{1}{N_p} = \frac{1}{N_{\text{predicted}}} \quad (2-173)$$

或者是

$$\frac{\Delta \varepsilon_c}{\phi_c} + \frac{\Delta \varepsilon_p}{\phi_p} = \frac{1}{N_{\text{predicted}}} \quad (2-174)$$

简化的方法

$$\text{damage} = \int_{\text{histogram}} \frac{\dot{\varepsilon}}{\phi(\dot{\varepsilon})} dt \quad (2-175)$$

其中的 $\phi(\dot{\varepsilon})$ 是由蠕变试验（低应变速率 $\dot{\varepsilon}$ ）和拉伸试验（高应变速率 $\dot{\varepsilon}$ ）得到的延性。这个方法也存在一些限制。

- 蠕变延展性表现出从热到热的高度可变性，在所需的时间或在适当的冶金条件下（即循环硬化或软化状态，与焊件相关的热影响区和焊缝金属，由于其微观结构可以显示出低于变形材料的延展性），材料可能无法使用。
- 由于方程 (7) 在较宽的循环寿命范围内可能是双线性的，因此在低应变范围内的疲劳延性可以表现出高度的分散性。
- 在压缩持时的情况下，拉伸蠕变延性并不明显合适。
- 为了充分验证外推方法，需要从低应变范围的长保持时间试验中获得额外的数据。

3) 频率修正法

这个方法是修改原来的 Coffin-Manson 和 Basquin 定律中的塑形（非弹性）应变的范围 $\Delta \varepsilon_p$ 和失效循环次数 N_f 之间的关系，并引入一个频率因子 ν ，使得总应变 $\Delta \varepsilon_t$ 的

塑形 $\Delta\varepsilon_p$ 和弹性 $\Delta\varepsilon_e$ 分量可以表示为如下形式：

$$\begin{aligned}\Delta\varepsilon_p &= C_2 \left(N_f \nu^{k-1} \right)^{-\beta}, \\ \Delta\varepsilon_e &= A' N_f^{-\beta'} \nu^{k'_i},\end{aligned}$$

其中的 $C_2, k, \beta, A', \beta'$ 和 k'_i 都是材料参数，通常通过实验拟合获取。关于塑形的公式可以转化为

$$N_f = \left(\frac{C_2}{\Delta\varepsilon_p} \right)^{\frac{1}{\beta}} \nu^{1-k} \quad (2-176)$$

考虑到波形影响，上式扩展为下面的

$$N_f = \left(\frac{C_2}{\Delta\varepsilon_p} \right)^{\frac{1}{\beta}} \nu^{\frac{1}{k}} \left(\frac{\nu_c}{\nu_t} \right)^c \quad (2-177)$$

其中， N_f 表示疲劳寿命， C_2 是一个常数， $\Delta\varepsilon_p$ 表示塑性应变范围， β 是与材料疲劳行为相关的指数， $\nu = 1/(1/\nu_t + 1/\nu_c)$ 是频率， k 是与材料特性相关的指数， ν_c 和 ν_t 分别是压缩和拉伸的频率参数， c 是一个指数，可能与材料的频率响应有关。

这个方法被广泛使用，仍存在下面几个诟病的地方。首先没有包含平均应力的修正项，其次，随着频率的降低或拉伸保载时间的延长，该方法预测的疲劳寿命降低，但并不是所有的都满足，最后，等持续时间的拉伸保持时间被视为是同等损坏的，而不管它们发生在磁滞回线的哪个地方，这并不总是如此。

4) 应变范围划分法

应变范围划分法 (Strain Range Partitioning, SRP) 是一种用于预测材料在高温下蠕变-疲劳寿命的方法。在这个方法中，将应变范围划分为四个部分， $\Delta\varepsilon_{pp}$ 拉伸塑性应变、压缩塑性应变、拉伸蠕变和压缩蠕变

- $\Delta\varepsilon_{pp}$ (Plastic-Plastic): 在拉伸和压缩过程中都由塑性变形引起的应变范围。
- $\Delta\varepsilon_{pc}$ (Plastic-Creep): 在拉伸过程中由塑性变形引起，在压缩过程中由蠕变引起的应变范围。
- $\Delta\varepsilon_{cp}$ (Creep-Plastic): 在拉伸过程中由蠕变引起，在压缩过程中由塑性变形引起的应变范围。
- $\Delta\varepsilon_{cc}$ (Creep-Creep): 在拉伸和压缩过程中都由蠕变引起的应变范围。

这些分量的下标中，第一个字母代表拉伸 (Tensile) 变形，第二个字母代表压缩 (Compressive) 变形。通过实验，可以为每个应变范围分量建立寿命关系，通常采用 Manson-Coffin 方程的形式，该方程是一个经验公式，用于描述应变范围与疲劳寿命之间的关

系。

$$N_{jk} = A_{jk} \Delta \varepsilon_{jk}^{\theta_{jk}} \quad (2-178)$$

其中 jk 分别表示 p 或者 c 。损伤因子 F 可以是相互作用损伤求和,

$$\frac{F_{pp}}{N_{pp}} + \frac{F_{pc}}{N_{pc}} + \frac{F_{cp}}{N_{cp}} + \frac{F_{cc}}{N_{cc}} = \frac{1}{N} \quad (2-179)$$

其中

$$\frac{\Delta \varepsilon_{pp}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{pp}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{pc}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{pc}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{cp}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{cp}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{cc}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{cc} \quad (2-180)$$

$$\frac{\Delta \varepsilon_{pp}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{pp}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{pc}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{pc}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{cp}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{cp}, \quad \frac{\Delta \varepsilon_{cc}}{\Delta \varepsilon_{in}} = F_{cc} \quad (2-181)$$

$\Delta \varepsilon_{in}$ 是非弹性应变范围。

$$\Delta \varepsilon_{in} = \Delta \varepsilon_{pp} + \Delta \varepsilon_{pc} + \Delta \varepsilon_{cp} + \Delta \varepsilon_{cc} \quad (2-182)$$

这个方法在预测长周期的蠕变上也非常成功，非常容易实现。该方法也存在以下问题。

- 可能很难定义迟滞回线和准确地将非弹性应变范围划分为各个组成部分，特别是在低应变范围。
- 在主要破坏机制是环境而不是变形类型的情况下，该方法可能是不准确的。

5) 损伤率模型

损伤率模型 (Damage-rate model) 是一种用于预测材料在疲劳和蠕变交互作用下寿命的方法。该模型假设在低周疲劳状态下，疲劳寿命的大部分时间用于空洞的扩展和裂纹的扩展。它基于损伤随时间变化的微分形式，并采用了多个方程来描述不同波形下空穴和裂纹增长的特性。

该方法的开发基于对 304 型不锈钢行为的观察。这些增长规律通过对试样寿命的积分来计算，临界裂纹和空穴尺寸则由一种交互损伤规则确定。为简洁起见，未详细阐述具体方程。

3 强耦合演化模型：多组分迁移与微观重构的影响

3.1 引言

3.2 气孔迁移与燃料重构动力学模型

3.2.1 蒸发-冷凝机制与孔隙迁移速率

3.3 氧与钚的热扩散与重分布模型

3.4 裂变产物行为演化模型

3.4.1 惰性气体行为

3.4.2 挥发性产物迁移

3.4.3 固体产物导致的集总肿胀

4 基于隐式积分算法的多物理场耦合程序开发与实验验证

4.1 基于 MOOSE 的多物理场求解框架

4.2 隐式力学本构积分算法

4.2.1 弹塑性-蠕变本构离散化

4.2.2 径向返回算法的推导与实现

4.3 多物理场耦合策略

4.3.1 全局耦合逻辑

4.3.2 时间步长的自适应控制

4.4 程序验证与确认

4.5 本章小结

5 考虑微观重构效应的燃料元件服役行为演化机理研究

5.1 组分重分布对热工性能的影响

分析 O/Pu 重分布前后，中心温度和熔化裕度的变化（突出创新点 2 的价值）。(Analyze changes in central temperature and melting margin before and after O/Pu redistribution, highlighting the value of Innovation Point 2.)

5.2 裂变气体与间隙传热的互馈机制

分析高燃耗下 FGR 对间隙热导率的恶化效应。(Analyze the degradation effect of Fission Gas Release (FGR) on gap thermal conductivity under high burnup conditions.)

5.3 典型瞬态工况下的 PCMI 行为

模拟超功率瞬变，分析 Cs 存在下的包壳应力与失效风险。(Simulate an overpower transient and analyze cladding stress and failure risk in the presence of Cesium (Cs).)

5.4 本章小结

6 基于物理信息驱动的快速预测代理模型

6.1 数据集构建与预处理

6.2 代理模型架构设计

(神经网络/高斯过程)

6.3 模型训练与精度评估

毫秒级实时预测演示 (对比有限元计算时间)。

6.4 本章小结

致 谢

致谢中主要感谢导师和对论文工作有直接贡献和帮助的人士和单位。

一般致谢的内容有：

- (一) 对指导或协助指导完成论文的导师；
- (二) 对国家科学基金、资助研究工作的奖学金基金、合同单位、资助或支持的企业、组织或个人；
- (三) 对协助完成研究工作和提供便利条件的组织或个人；
- (四) 对在研究工作中提出建议和提供帮助的人；
- (五) 对给予转载和引用权的资料、图片、文献、研究思想和设想的所有者；
- (六) 对其他应感谢的组织和个人。

致谢言语应谦虚诚恳，实事求是。字数不超过 1000 汉字

用于双盲评审的论文，此页内容全部隐去。

参考文献

- [1] INOUE M, MAEDA K, KATSUYAMA K, et al. Fuel-to-cladding gap evolution and its impact on thermal performance of high burnup fast reactor type uranium-plutonium oxide fuel pins[J]. Journal of Nuclear Materials, 2004, 326(1): 59-73.
- [2] BRUCKLACHER D, DIENST W, THUMMLER F. Creep Behavior of Oxide Fuels Under Neutron Irradiation, Paper 251[C]//Proceedings REAKTORTAGUNG 1973 des Deutschen Atomforums/KTG held in Karlsruhe. 1973: 413-416.
- [3] BRUCKLACHER D, DIENST W. Creep behavior of ceramic nuclear fuels under neutron irradiation[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1972, 42(3): 285-296. DOI: 10.1016/0022-3115(72)90079-7.
- [4] PERRIN J S. Effect of irradiation on creep of UO₂-PuO₂[J]. Journal of Nuclear Materials, 1972, 42: 101-104.
- [5] SOLOMON A A. Radiation induced creep of UO₂[J/OL]. American Ceramic Society, 1973, 56(3): 164-171. DOI: 10.1111/j.1151-2916.1973.tb15435.x.
- [6] DIENST W. Irradiation induced creep of ceramic materials[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1977, 65: 1-8. DOI: 10.1016/0022-3115(77)90035-6.
- [7] SAKAI K, HANAKAWA H, TVERBERG T. Investigation of fission induced creep of UO₂ and Cr-doped fuel in IFA-701[R]. HWR-1006. OECD Halden Reactor Project, 2011.
- [8] SAKAI K. The fuel creep test IFA-701: results after four irradiation cycles[R]. HWR-1039. OECD Halden Reactor Project, 2013.
- [9] SZOKE R, TVERBERG T. Update on in-pile results from the fuel creep test IFA-701[R]. HWR-1092. OECD Halden Reactor Project, 2014.
- [10] HALES J D, WILLIAMSON R L, NOVASCONE S R, et al. BISON Theory Manual The Equations behind Nuclear Fuel Analysis[R/OL]. INL/EXT-13-29930, 1374503. 2016: INL/EXT-13-29930, 1374503. DOI: 10.2172/1374503.
- [11] MILET C, PICONI C. Fluage en pile de l'oxyde mixte UO₂-PuO₂[J]. Journal of Nuclear Materials, 1983, 116: 196-199.
- [12] CAZADO M E, DENIS A C. Model of Nuclear Fuel Pellets Densification under Irradiation and Isothermal Conditions: Application to UO₂ Fuels[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 510: 585-595 [2024-12-03]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311518307700>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.08.029.
- [13] TURNBULL J A, WHITE R J, WISE C. The Diffusion Coefficient for Fission Gas Atoms in Uranium Dioxide[G/OL]//Water Reactor Fuel Element Computer Modelling in Steady State, Transient and Accident Conditions: IWGFPT-32. 1989: 174-181 [2026-01-12]. <https://inis.iaea.org/records/p0nd1-d5c88>.
- [14] MATZKE H J. Gas Release Mechanisms in UO₂ —a Critical Review[J/OL]. Radiation Effects, 1980, 53(3-4): 219-242 [2026-01-12]. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00337578008>

207118. DOI: 10.1080/00337578008207118.
- [15] HAM F S. Theory of Diffusion-Limited Precipitation[J/OL]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1958, 6(4): 335-351 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022369758900532>. DOI: 10.1016/0022-3697(58)90053-2.
- [16] LÖSÖNEN P. Modelling Intragranular Fission Gas Release in Irradiation of Sintered LWR UO₂ Fuel[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2002, 304(1): 29-49 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311502008565>. DOI: 10.1016/S0022-3115(02)00856-5.
- [17] VAN BRUTZEL L, CHARTIER A. A New Equation of State for Helium Nanobubbles Embedded in UO₂ Matrix Calculated via Molecular Dynamics Simulations[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2019, 518: 431-439 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311518315514>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2019.02.015.
- [18] COGNINI L, PIZZOCRI D, BARANI T, et al. Helium Solubility in Oxide Nuclear Fuel: Derivation of New Correlations for Henry's Constant[J/OL]. Nuclear Engineering and Design, 2018, 340: 240-244 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549318304606>. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2018.09.024.
- [19] WHITE R, TUCKER M. A New Fission-Gas Release Model[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1983, 118(1): 1-38 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022311583901769>. DOI: 10.1016/0022-3115(83)90176-9.
- [20] OLANDER D, WONGSAWAENG D. Re-Solution of Fission Gas ■A Review: Part I. Intragranular Bubbles[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2006, 354(1–3): 94-109 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S002231150600198X>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2006.03.010.
- [21] BAKER C. The Fission Gas Bubble Distribution in Uranium Dioxide from High Temperature Irradiated Sghwr Fuel Pins[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1977, 66(3): 283-291 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022311577901179>. DOI: 10.1016/0022-3115(77)90117-9.
- [22] WHITE R. The Development of Grain-Face Porosity in Irradiated Oxide Fuel[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2004, 325(1): 61-77 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311503004616>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2003.10.008.
- [23] SPEIGHT M V, BEERE W. Vacancy Potential and Void Growth on Grain Boundaries[J/OL]. Metal Science, 1975, 9(1): 190-191(1975-01-01) [2026-01-12]. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1179/030634575790445161>. DOI: 10.1179/030634575790445161.
- [24] REYNOLDS G, BURTON B. Grain-Boundary Diffusion in Uranium Dioxide: The Correlation between Sintering and Creep and a Reinterpretation of Creep Mechanism[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1979, 82(1): 22-25 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022311579900357>. DOI: 10.1016/0022-3115(79)90035-7.
- [25] PASTORE G, SWILER L P, HALES J D, et al. Uncertainty and Sensitivity Analysis of Fission Gas Behavior in Engineering-Scale Fuel Modeling[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 456: 398-408(2015-01-01) [2024-11-08]. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311514006771>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2014.09.077.

- [26] BARANI T, BRUSCHI E, PIZZOCRI D, et al. Analysis of Transient Fission Gas Behaviour in Oxide Fuel Using BISON and TRANSURANUS[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2017, 486: 96-110 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S002231151630544X>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.10.051.
- [27] PASTORE G, PIZZOCRI D, HALES J D, et al. Modelling of Transient Fission Gas Behaviour in Oxide Fuel and Application to the BISON Code: Enlarged Halden Programme Group Meeting (EHPG 2014)[C/OL]//. 2014 [2026-01-12]. https://www.researchgate.net/publication/266615909_Modelling_of_Transient_Fission_Gas_Behaviour_in_Oxide_Fuel_and_Application_to_the_BISON_Code.
- [28] TONKS M, ANDERSSON D, DEVANATHAN R, et al. Unit Mechanisms of Fission Gas Release: Current Understanding and Future Needs[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 504: 300-317 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311517313405>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.03.016.
- [29] NOTLEY M J F, MACEWAN J R. Stepwise Release of Fission Gas from UO₂ Fuel[J/OL]. Nuclear Applications, 1966, 2(6): 477-480 [2026-01-12]. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.13182/NT66-A27540>. DOI: 10.13182/NT66-A27540.
- [30] CARROLL R M, MORGAN J G, PEREZ R B, et al. Fission Density, Burnup, and Temperature Effects on Fission-Gas Release From UO₂[J/OL]. Nuclear Science and Engineering, 1969, 38(2): 143-155 [2026-01-12]. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.13182/NSE69-A19519>. DOI: 10.13182/NSE69-A19519.
- [31] UNE K, KASHIBE S. Fission Gas Release during Post Irradiation Annealing of BWR Fuels[J/OL]. Journal of Nuclear Science and Technology, 1990, 27(11): 1002-1016 [2026-01-12]. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/18811248.1990.9731285>. DOI: 10.1080/18811248.1990.9731285.
- [32] DUCROS G, PONTILLON Y, MALGOUYRES P. Synthesis of the VERCORS Experimental Programme: Separate-Effect Experiments on Fission Product Release, in Support of the PHEBUS-FP Programme[J/OL]. Annals of Nuclear Energy, 2013, 61: 75-87 [2026-01-12]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0306454913001710>. DOI: 10.1016/j.anucene.2013.02.033.
- [33] HERING W. The Kwu Fission Gas Release Model for Lwr Fuel Rods[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1983, 114(1): 41-49 [2026-01-13]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022311583900715>. DOI: 10.1016/0022-3115(83)90071-5.
- [34] MOTTA A T, OLANDER D R, WIRTH B. Light water reactor materials[M]. 2017, 2017.
- [35] REST J, COOPER M, SPINO J, et al. Fission Gas Release from UO₂ Nuclear Fuel: A Review [J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2019, 513: 310-345 [2026-01-13]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311518309449>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.08.019.
- [36] HARGREAVES R, COLLINS D A. A Quantitative Model for Fission Gas Release and Swelling in Irradiated Uranium Dioxide[J/OL]. 1976, 15(4): 311-318 [2026-01-13]. <https://inis.iaea.org/records/g33yh-p2w86>.
- [37] NOTLEY M, HASTINGS I. A Microstructure-Dependent Model for Fission Product Gas Release and Swelling in UO₂ Fuel[J/OL]. Nuclear Engineering and Design, 1980, 56(1): 163-175 [2026-01-

- [33]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0029549380901806>. DOI: 10.1016/0029-5493(80)90180-6.
- [38] KOGAI T. Modelling of Fission Gas Release and Gaseous Swelling of Light Water Reactor Fuels [J/OL]. *Journal of Nuclear Materials*, 1997, 244(2): 131-140 [2026-01-13]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311596007313>. DOI: 10.1016/S0022-3115(96)00731-3.
- [39] HILLERT M. On the Theory of Normal and Abnormal Grain Growth[J/OL]. *Acta Metallurgica*, 1965, 13(3): 227-238 [2026-01-13]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0001616065902002>. DOI: 10.1016/0001-6160(65)90200-2.
- [40] AINSCOUGH J, OLDFIELD B, WARE J. Isothermal Grain Growth Kinetics in Sintered UO₂ Pellets[J/OL]. *Journal of Nuclear Materials*, 1973, 49(2): 117-128 [2026-01-13]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0022311573900019>. DOI: 10.1016/0022-3115(73)90001-9.
- [41] COGNINI L, CECHET A, BARANI T, et al. Towards a Physics-Based Description of Intra-Granular Helium Behaviour in Oxide Fuel for Application in Fuel Performance Codes[J/OL]. *Nuclear Engineering and Technology*, 2021, 53(2): 562-571 [2026-01-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1738573320303557>. DOI: 10.1016/j.net.2020.07.009.
- [42] RUFEH F, OLANDER D R, PIGFORD T H. The Solubility of Helium in Uranium Dioxide[J/OL]. *Nuclear Science and Engineering*, 1965, 23(4): 335-338 [2026-01-14]. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.13182/NSE65-A21069>. DOI: 10.13182/NSE65-A21069.
- [43] NAKAJIMA K, SERIZAWA H, SHIRASU N, et al. The Solubility and Diffusion Coefficient of Helium in Uranium Dioxide[J/OL]. *Journal of Nuclear Materials*, 2011, 419(1-3): 272-280 [2026-01-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311511008257>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2011.08.045.
- [44] TALIP Z, WISS T, DI MARCELLO V, et al. Thermal Diffusion of Helium in 238Pu-Doped UO₂ [J/OL]. *Journal of Nuclear Materials*, 2014, 445(1-3): 117-127 [2026-01-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311513012336>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2013.10.066.
- [45] SPEIGHT M V. A Calculation on the Migration of Fission Gas in Material Exhibiting Precipitation and Re-Solution of Gas Atoms Under Irradiation[J/OL]. *Nuclear Science and Engineering*, 1969, 37(2): 180-185 [2026-01-14]. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.13182/NSE69-A20676>. DOI: 10.13182/NSE69-A20676.
- [46] LUZZI L, COGNINI L, PIZZOCRI D, et al. Helium Diffusivity in Oxide Nuclear Fuel: Critical Data Analysis and New Correlations[J/OL]. *Nuclear Engineering and Design*, 2018, 330: 265-271 [2026-01-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549318300578>. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2018.01.044.
- [47] ZULLO G, PIZZOCRI D, LUZZI L. On the Use of Spectral Algorithms for the Prediction of Short-Lived Volatile Fission Product Release: Methodology for Bounding Numerical Error[J/OL]. *Nuclear Engineering and Technology*, 2022, 54(4): 1195-1205 [2026-01-14]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1738573321006148>. DOI: 10.1016/j.net.2021.10.028.
- [48] ZULLO G, PIZZOCRI D, MAGNI A, et al. Towards Grain-Scale Modelling of the Release of Radioactive Fission Gas from Oxide Fuel. Part I: SCIANTIX[J/OL]. *Nuclear Engineering and Tech-*

- nology, 2022, 54(8): 2771-2782 [2024-11-04]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1738573322000833>. DOI: 10.1016/j.net.2022.02.011.
- [49] USDOE, USNRC, Pacific Northwest National Laboratory (PNNL), Richland, WA (United States), et al. Background and Derivation of ANS-5.4 Standard Fission Product Release Model: 401001060, PNNL-18490, NUREG/CR-7003[R/OL]. (2010-01-01) [2026-01-14]. <https://www.osti.gov/servlets/purl/1033086/>.
- [50] MILLS K C. Recommended Values of Thermophysical Properties for Selected Commercial Alloys [M/OL]. Woodhead Publishing, 2002. <http://app.knovel.com/mlink/toc/id:kpRVTPSCA1/recommended-values-thermophysical/recommended-values-thermophysical>.
- [51] MATOLICH JR J. Thermal conductivity and electrical resistivity of type 316 stainless steel from 0 to 1800F[R]. 1965.
- [52] WATSON T W, ROBINSON H E. Thermal conductivity of a sample of type 316 stainless steel [C/OL]//. 1963. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:139688757>.
- [53] HOFMAN G L, BILLONE M C, KOENIG J F, et al. Metallic Fuels Handbook[R]. ANL-NSE-3. Argonne National Laboratory, 2019.
- [54] BANERJEE A, RAJU S, DIVAKAR R, et al. High Temperature Heat Capacity of Alloy D9 Using Drop Calorimetry Based Enthalpy Increment Measurements[J/OL]. International Journal of Thermophysics, 2007, 28(1): 97-108. <https://doi.org/10.1007/s10765-006-0136-0>. DOI: 10.1007/s10765-006-0136-0.
- [55] YAMANOUCHI N, TAMURA M, HAYAKAWA H, et al. Accumulation of engineering data for practical use of reduced activation ferritic steel: 8%Cr-2%W-0.2%V-0.04%Ta-Fe[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1992: 822-826. DOI: 10.1016/0022-3115(92)90587-B.
- [56] LEIBOWITZ L, BLOMQUIST R. Thermal conductivity and thermal expansion of stainless steels D9 and HT9[J/OL]. International Journal of Thermophysics, 1988, 9(5): 873-883. DOI: 10.1007/bf00503252.
- [57] BRIGGS L L, CHANG L K, HILL D J. Safety Analysis and Technical Basis for Establishing an Interim Burnup Limit for Mark-V and Mark-VA Fueled Subassemblies in EBR-II[R]. ANL-NSE-1. Argonne National Laboratory, 1995.
- [58] MEGAHED M, PONTER A R S, MORRISON C J. An Experimental and Theoretical Investigation into the Creep Properties of a Simple Structure of 316 Stainless Steel[J/OL]. International Journal of Mechanical Sciences, 1984, 26(3): 149-164 [2024-10-30]. DOI: 10.1016/0020-7403(84)90050-X.
- [59] SCHAPPEL D, TERRANI K. Key Material Properties for Thermo-Structural Analysis of Transformational Challenge Reactor Core Components[R/OL]. ORNL/SPR-2019/1277, 1558508. 2019: ORNL/SPR-2019/1277, 1558508 [2025-04-27]. DOI: 10.2172/1558508.
- [60] YUE X, ZHOU J. Implementation of ABAQUS User Subroutines for Viscoplasticity of 316 Stainless Steel and Zircaloy-4[J/OL]. Metals, 2023, 13(9): 1554 [2025-04-24]. DOI: 10.3390/met13091554.
- [61] ZHANG Q, MENG W, LUO Y. Hardening Behavior and Model of a 316L Sheet Considering Macro and Micro Size Effects[J/OL]. Metals, 2023, 13(12): 1926 [2025-04-27]. DOI: 10.3390/met131219

- 26.
- [62] MIAO Y, OAKS A, YACOUT A M, et al. FY22 Progress Report on BISON Metallic Fuel Model Development and V&V Using EBR-II Legacy Data[R/OL]. ANL/CFCT-22/28. Argonne National Laboratory (ANL), Argonne, IL (United States), 2022 [2025-04-27]. DOI: 10.2172/1907952.
- [63] FANNING T H, BRUNETT A J, SUMNER T. The SAS4A/SASSYS-1 Safety Analysis Code System, Version 5[R/OL]. ANL/NE-16/19, 1352187. 2017: ANL/NE-16/19, 1352187. DOI: 10.2172/1352187.
- [64] DIMELFI R, KRAMER J. Modeling the Effects of Fast-Neutron Irradiation on the Subsequent Mechanical Behaviour of Type 316 Stainless Steel[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1980, 89(2–3): 338-346. DOI: 10.1016/0022-3115(80)90065-3.
- [65] KRAMER J, DIMELFI R. Modeling Deformation and Failure of Fast Reactor Cladding during Simulated Accident Transients[J/OL]. Nuclear Engineering and Design, 1981, 63(1): 47-54. DOI: 10.1016/0029-5493(81)90016-9.
- [66] BRINKMAN C R. Elevated-Temperature Mechanical Properties of an Advanced-Type 316 Stainless Steel[J/OL]. Journal of Pressure Vessel Technology, 2001, 123(1): 75-80. DOI: 10.1115/1.1343911.
- [67] ONIZAWA T, HASHIDATE R. Development of Creep Property Equations of 316FR Stainless Steel and Mod.9Cr-1Mo Steel for Sodium-Cooled Fast Reactor to Achieve 60-Year Design Life[J/OL]. Mechanical Engineering Journal, 2019, 6(1): 18-00477-18-00477. DOI: 10.1299/mej.18-00477.
- [68] LATHA S, MATHEW M, PARAMESWARAN P, et al. Thermal Creep Properties of Alloy D9 Stainless Steel and 316 Stainless Steel Fuel Clad Tubes[J/OL]. International Journal of Pressure Vessels and Piping, 2008, 85(12): 866-870 [2024-11-20]. DOI: 10.1016/j.ijpvp.2008.07.002.
- [69] KARAHAN A, BUONGIORNO J. A new code for predicting the thermo-mechanical and irradiation behavior of metallic fuels in sodium fast reactors[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2010, 396(2): 283-293. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2009.11.022.
- [70] NAM C, HWANG W, SOHN D S. Statistical failure analysis of metallic U-10Zr/HT9 fast reactor fuel pin by considering the weibull distribution and cumulative damage fraction[J/OL]. Annals of Nuclear Energy, 1998, 25(17): 1441-1453. DOI: 10.1016/S0306-4549(98)00043-7.
- [71] NAM C, HWANG W, SOHN D S. Statistical Failure Analysis of Metallic U-10zr/HT9 Fast Reactor Fuel Pin by Considering the Weibull Distribution and Cumulative Damage Fraction[J/OL]. Annals of Nuclear Energy, 1998, 25(17): 1441-1453. DOI: 10.1016/S0306-4549(98)00043-7.
- [72] DIMELFI R J, GRUBER E E, KRAMER J M, et al. Strength and Rupture-life Transitions Caused by Secondary Carbide Precipitation in HT-9 During High-temperature Low-rate Mechanical Testing [R]. ANL/RE/CP-75828. Argonne National Laboratory, 1993.
- [73] HUANG F. Transient Failure Behavior of HT9[R/OL]. WHC-SA-2513, 10173288. 1994: WHC-SA-2513, 10173288. DOI: 10.2172/10173288.
- [74] TVERGAARD V. Effect of grain boundary sliding on creep constrained diffusive cavitation[J/OL]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1985, 33(5): 447-469. DOI: 10.1016/0022-5096(85)90009-2.

- [75] BATES J F. Design Equations for Stress-Free Swelling of 20% Cold Worked D9[R/OL]. DOE/TIC-11086, 5582686. 1979: DOE/TIC-11086, 5582686. DOI: 10.2172/5582686.
- [76] KARAHAN A. Modeling of Thermo-Mechanical and Irradiation Behavior of Metallic and Oxide Fuels for Sodium Fast Reactors[D]. United States: Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [77] HOFMAN G, BILLONE M, KOENIG J, et al. Metallic Fuels Handbook[R/OL]. ANL-NSE-3, 1506477, 151709. 2019: ANL-NSE-3, 1506477, 151709 [2024-11-15]. DOI: 10.2172/1506477.
- [78] HALES J D, WILLIAMSON R L, NOVASCONE S R, et al. BISON Theory Manual The Equations behind Nuclear Fuel Analysis[R/OL]. INL/EXT-13-29930, 1374503. 2016: INL/EXT-13-29930, 1374503 [2024-05-28]. DOI: 10.2172/1374503.
- [79] RYU H J, KIM Y S, YACOUT A M. Thermal creep modeling of HT9 steel for fast reactor applications[J]. Journal of Nuclear Materials, 2011, 409(3): 207-213.
- [80] HAMMOND J P, RATCLIFF L T, BRINKMAN C R, et al. Dynamic and static measurements of elastic constants with data on 2 1/4 Cr-1 Mo steel, types 304 and 316 stainless steels, and alloy 800H: ORNL-5442[R/OL]. Oak Ridge National Laboratory. 1979. <https://www.osti.gov/biblio/6216499>.
- [81] 王永华, 张, 李, 等. 现代电气控制及 PLC 应用技术[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2013.
- [82] 刘海龙. 浅谈电气自动化的现状与发展方向[J]. 黑龙江科技信息, 2010, 6(5).
- [83] 陈众励, 赵济安, 邵民杰. 建筑电气节能技术综述[J]. 低压电器, 2007, 4: 1-5.
- [84] 张燕. 电气自动化在电气工程中的应用探讨[J]. 电子技术与软件工程, 2013, 17: 199-199.
- [85] 王磊, 薛双苓. 电气自动化控制设备可靠性探究[J]. 科技传播, 2011, 19: 51-62.
- [86] 黄雪芳. 探讨电气工程中自动化技术的应用[D]. 某地: 某大学, 2012.
- [87] SACHDEVA B, KAUSHIK R, ARORA S, et al. Effect of processing conditions on the stability of native vitamin A and fortified retinol acetate in milk[J/OL]. International Journal for Vitamin and Nutrition Research, 2021, 91(1-2): 133-142. DOI: 10.1024/0300-9831/a000617.
- [88] BARELLA M, VIOLI I L, GARGIULO J, et al. In Situ Photothermal Response of Single Gold Nanoparticles through Hyperspectral Imaging Anti-Stokes Thermometry[J/OL]. ACS Nano, 2021, 15(2): 2458-2467. DOI: 10.1021/acsnano.0c06185.
- [89] WU L, DING X, ZHENG Z, et al. Doubly-doped Mg-Al-Ce-V₂O₇- LDH composite film on magnesium alloy AZ31 for anticorrosion[J/OL]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 64: 66-72. DOI: 10.1016/j.jmst.2019.09.031.
- [90] LUO J, GAO S, LUO H, et al. Superhydrophobic and breathable smart MXene-based textile for multifunctional wearable sensing electronics[J/OL]. Chemical Engineering Journal, 2021, 406: 126898. DOI: 10.1016/j.cej.2020.126898.
- [91] HU Z, LI S, WANG S, et al. Encapsulation of menthol into cyclodextrin metal-organic frameworks: Preparation, structure characterization and evaluation of complexing capacity[J/OL]. Food Chemistry, 2021, 338: 127839. DOI: 10.1016/j.foodchem.2020.127839.
- [92] QIAN C, YIN J, ZHAO J, et al. Facile preparation and highly efficient photodegradation performances of self-assembled Artemia eggshell-ZnO nanocomposites for wastewater treatment[J/OL]. Colloids and Surfaces a-Physicochemical and Engineering Aspects, 2021, 610: 125752. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2020.125752.

- [93] EVANS J D, KRAUSE S, FERINGA B L. Cooperative and synchronized rotation in motorized porous frameworks: impact on local and global transport properties of confined fluids[J/OL]. Faraday Discussions, 2021, 225(0): 286-300. DOI: 10.1039/d0fd00016g.
- [94] ATTA A. Enhanced dielectric properties of flexible Cu/polymer nanocomposite films[J/OL]. Surface Innovations, 2021, 9(1): 17-24. DOI: 10.1680/jsuin.20.00020.
- [95] MAI A T, LYON W F, MONTGOMERY R O, et al. An Evaluation of the MATPRO Fuel Creep Model Using the FALCON Fuel Analysis Code[J]. Trans. Am. Nucl. Soc., 2010, 102: 888-889.
- [96] PIZZOCRI D, BARANI T, LUZZI L. SCIANTIX: A New Open Source Multi-Scale Code for Fission Gas Behaviour Modelling Designed for Nuclear Fuel Performance Codes[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2020, 532: 152042 [2024-10-31]. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0022311519313868>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2020.152042.
- [97] ZULLO G, PIZZOCRI D, LUZZI L. The SCIANTIX Code for Fission Gas Behaviour: Status, Upgrades, Separate-Effect Validation, and Future Developments[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 2023, 587: 154744(2023-12-15) [2026-01-10]. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022311523005111>. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2023.154744.
- [98] FOSTER J P, PORTER D L, HARROD D, et al. 316 Stainless Steel Cavity Swelling in a PWR [J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1995, 224(3): 207-215 [2024-10-30]. DOI: 10.1016/0022-3115(95)00086-0.
- [99] FINK J K, LEIBOWITZ L. Thermal conductivity of zirconium[J/OL]. Journal of Nuclear Materials, 1995, 226(1-2): 44-50. DOI: 10.1016/0022-3115(95)00110-7.
- [100] RABIN B, MEYER M, COLE J, et al. Preliminary Report on U-Mo Monolithic Fuel for Research Reactors[R]. INL EXT-17-40975. Idaho National Laboratory, 2020.

附录 A Sciantix 耦合接口说明

A.1 引言

在本研究的工作中，为准确模拟核燃料中裂变气体和氦气的行为，我们选择将国际上广泛验证的开源燃料性能模块 Sciantix 动态链接到自主开发的多物理耦合框架中。Sciantix 由欧洲联合研究中心（JRC）开发，基于物理机理描述了裂变气体的产生、扩散、气泡成核、生长与释放全过程，特别适用于高燃耗条件下的燃料性能分析。本章节详细介绍 Sciantix 接口的设计、调用方法及关键数据结构。

A.2 接口框架与调用流程

为实现 Sciantix 与 MOOSE 多物理耦合框架的无缝集成，本研究设计并实现了一个专门的封装类 SciantixWrapper。该封装器作为 MOOSE 中的材料属性（Material）对象，在每个有限元积分点上独立管理裂变气体和氦气的行为演化。整体架构体现了数据驱动、线程安全、状态保持的核心设计理念。

A.2.1 设计原则

1. **模块化封装：** 将 Sciantix 的 C 语言接口封装为 C++ 类，提供面向对象的使用方式。
2. **线程安全：** 通过互斥锁机制处理 Sciantix 内部状态变量的并发访问。
3. **状态保持：** 利用 MOOSE 的状态变量特性，在时间步间持久化存储裂变气体状态。
4. **单位转换：** 自动完成 MOOSE 物理量（SI 单位）与 Sciantix 内部单位间的转换。

1) 类结构设计

SciantixWrapper 类继承自 MOOSE 的 Material 基类，其主要成员函数和变量如表 1 所示。

A.3 关键参数映射

A.3.1 历史变量映射

MOOSE 传递给 Sciantix 的驱动变量存储在 Sciantix_history 数组中。接口程序在传递前进行了必要的单位转换，具体映射关系如表 2 所示。

附录 A-表 1 SciantixWrapper 类核心成员

成员类别	名称	类型	功能描述
构造函数	SciantixWrapper	-	初始化所有模型参数、初始条件和缩放因子
初始化函数	initQpStatefulProperties	void	初始化状态变量数组，设置初始条件
计算函数	computeQpProperties	void	执行单个时间步的 Sciantix 计算
辅助函数	initializeDiffusionModes	void	初始化扩散模式投影系数
状态变量	_sciantix_data	std::vector<Real>	存储所有状态变量和扩散模式
输出属性	_fission_gas_release	Real	裂变气体释放率
	_gaseous_swelling	Real	气体肿胀应变
线程安全	sciantix_library_mutex	std::mutex	全局互斥锁，确保线程安全

附录 A-表 2 MOOSE 植合变量至 Sciantix 历史变量的映射关系

Sciantix 索引	物理含义	MOOSE 变量来源	单位转换
0	上一时间步温度	_temperature_old	K
1	当前时间步温度	_temperature	K
2	上一时间步裂变率	_fission_rate_old	fiss/m ³ s
3	当前时间步裂变率	_fission_rate	fiss/m ³ s
4	上一时间步静水应力	_hydrostatic_stress_old	Pa → MPa
5	当前时间步静水应力	_hydrostatic_stress	Pa → MPa
6	时间步长	_dt	s
7	累积辐照时间	_t	s → h
9	上一时间步蒸汽压	_steampress_old	Pa → atm
10	当前时间步蒸汽压	_steampress	Pa → atm

A.3.2 模型选项配置

接口通过输入文件参数 (Input Parameters) 灵活控制 Sciantix 内部物理模型的开启与关闭。主要模型选项及其对应的数组索引如表3所示。

附录 A-表 3 Sciantix 物理模型选项完整配置说明

参数名称(MOOSE)	物理模型含义	Sciantix Options 索引
sciantix_iGrainGrowth	晶粒生长模型	0
sciantix_iFissionGasDiffusivity	裂变气体扩散系数模型	1
sciantix_iDiffusionSolver	扩散方程求解器	2
sciantix_iIntraGranularBubbleBehavior	晶内气泡演化模型	3
sciantix_iResolution	辐照重溶模型	4
sciantix_iTrapping	晶内气泡捕获模型	5
sciantix_iNucleation	气泡成核模型	6
sciantix_iOutput	输出信息详细程度	7
sciantix_iGrainBoundaryVacancyDiffusivity	晶界空位扩散模型	8
sciantix_iGrainBoundaryBehaviour	晶界气泡行为模型	9
sciantix_iMicroCracking	晶界微裂纹模型	10
sciantix_iFuelThermochemistry	燃料基体/热化学模型	11
sciantix_iVenting	晶界气体排气 (Venting) 模型	12
sciantix_iFissionGasRelease	放射性气体释放模型	13
sciantix_iHelium	氦气行为模型	14
sciantix_iHeDiffusivity	氦气扩散系数模型	15
sciantix_iSweeping	晶界扫气 (Sweeping) 模型	16
sciantix_iHighBurnupStructureFormation	高燃耗结构 (HBS) 形成模型	17
sciantix_iHighBurnupStructurePorosity	高燃耗结构孔隙度演化	18
sciantix_iHeliumProductionRate	氦气产生率模型	19
sciantix_iStoichiometryDeviation	化学计量比偏差模型	20
sciantix_iBubbleDiffusivity	气泡扩散模型	21

A.3.3 输出变量计算

计算完成后，Wrapper 从 Sciantix_variables 数组中提取宏观感兴趣的量。裂变气体释放份额 (FGR) 和气态肿胀 (Swelling) 的计算逻辑如代码清单1所示。

附录 A-源码 1 输出变量的提取与计算

```

1 // 提取释放量与产生量 (单位: atoms/m3)
2 double Xe_released = Sciantix_variables[6];
3 double Kr_released = Sciantix_variables[12];
4 double Xe_produced = Sciantix_variables[1];
5 double Kr_produced = Sciantix_variables[7];
6
7 // 计算裂变气体释放份额 (防止分母为0)
8 _fission_gas_release[_qp] = (Xe_released + Kr_released) /

```

```
9 (Xe_produced + Kr_produced + 1e-30);  
10  
11 // 提取并汇总气态肿胀 (分数形式)  
12 double intra_swelling = Sciantix_variables[24]; // 晶内气泡肿胀  
13 double inter_swelling = Sciantix_variables[36]; // 晶界气泡肿胀  
14 double intra_solution_swelling = Sciantix_variables[68]; // 固溶肿胀  
15  
16 _gaseous_swelling[_qp] = intra_swelling + inter_swelling +  
    intra_solution_swelling;
```

附录 B 附录图表

附录 B-表 1 这是一个左对齐的表格示例

Symptom	Metric
Class that has many accessor methods and accesses a lot of external data	ATFD is more than a few
Class that is large and complex	WMC is high
Class that has a lot of methods that only operate on a proper subset of the instance variable set	TCC is low



(a) 红色校徽



(b) 蓝色校徽

附录 B-图 1 校徽

附录 B-表 2 这是一个居中的表格示例

Symptom	Metric
Class	ATFD
Class	WMC
Class	TCC

攻读学位期间取得的研究成果

- [1] Wei ZY, Tang YP, Zhao WH, et al. Rapid development technique for drip irrigation emitters[J]. RP Journal, UK., 2003, 9(2):104-110 (SCI: 000350930600051; EI: 03187452127).
- [2] 魏正英, 唐一平, 卢秉恒. 滴灌管内嵌管状滴头的快速制造方法研究 [J]. 农业工程学报, 2001, 17(2):55-58 (EI: 01226526279, 01416684777).
- [3] 姜锡洲. 一种温热外敷药制备方案: 中国, 88105607.3[P]. 1989-07-26.
- [4]
- [5]
- [6]
- [7]

用于双盲评审的论文, 只列出已发表的学术论文的篇名、发表刊物名称, 必须隐去各类论文检索号、期号、卷号、页码; 专利号; 日期等。

答辩委员会会议决议

论文取得的主要创新性成果包括：

论文工作表明作者在xxxxx具有xxxxx知识,具有xxxxx能力,论文xxxxxxxxxx,
答辩xxxxxxxxxxxx。

答辩委员会表决, (×票/一致)同意通过论文答辩, 并建议授予×××(姓名)×××(门类)学博士/硕士学位。

常规评阅人名单

本学位论文共接受 7 位专家评阅，其中常规评阅人 5 名，名单如下：

王 XX 教授 西安交通大学

李 XX 教授 XXXXXX 大学

田 XX 教授 XXXXXX 大学

学位论文独创性声明（1）

本人声明：所呈交的学位论文系在导师指导下本人独立完成的研究成果。文中依法引用他人的成果，均已做出明确标注或得到许可。论文内容未包含法律意义上已属于他人的任何形式的研究成果，也不包含本人已用于其他学位申请的论文或成果。

本人如违反上述声明，愿意承担以下责任和后果：

1. 交回学校授予的学位证书；
2. 学校可在相关媒体上对作者本人的行为进行通报；
3. 本人按照学校规定的方式，对因不当取得学位给学校造成的名誉损害，进行公开道歉。
4. 本人负责因论文成果不实产生的法律纠纷。

论文作者（签名）： 日期： 年 月 日

学位论文独创性声明（2）

本人声明：研究生 所提交的本篇学位论文已经本人审阅，确系在本人指导下由该生独立完成的研究成果。

本人如违反上述声明，愿意承担以下责任和后果：

1. 学校可在相关媒体上对本人的失察行为进行通报；
2. 本人按照学校规定的方式，对因失察给学校造成的名誉损害，进行公开道歉。
3. 本人接受学校按照有关规定做出的任何处理。

指导教师（签名）： 日期： 年 月 日

学位论文知识产权权属声明

我们声明，我们提交的学位论文及相关的职务作品，知识产权归属学校。学校享有以任何方式发表、复制、公开阅览、借阅以及申请专利等权利。学位论文作者离校后，或学位论文导师因故离校后，发表或使用学位论文或与该论文直接相关的学术论文或成果时，署名单位仍然为西安交通大学。

论文作者（签名）： 日期： 年 月 日

指导教师（签名）： 日期： 年 月 日

（本声明的版权归西安交通大学所有，未经许可，任何单位及任何个人不得擅自使用）