

Cr₂O₃ 掺杂 UO₂-锆合金包壳燃料稳态服役性能研究

尹春雨^{1,2}, 王耀锋¹, 张坤², 何梁², 刘欣悦¹,

贺亚男¹, 巫英伟^{1*}, 章静¹, 肖忠^{2*}, 苏光辉¹

(1. 西安交通大学 陕西省先进核电技术重点实验室, 西安 710049)

(2. 中国核动力研究设计院先进核能技术全国重点实验室, 成都 610213)

摘 要: Cr₂O₃掺杂 UO₂芯块可促进晶粒长大, 并具有提高裂变气体滞留能力和缓解芯块-包壳相互作用 (pellet-cladding interaction, PCI) 的潜力。针对燃料棒尺度与晶粒尺度裂变气体行为难以统一描述的问题, 本文在燃料性能分析程序 BEEs 中耦合裂变气体行为程序 SCIENTIX; BEEs 向积分点处的晶粒尺度模型传递局部温度、燃耗、裂变率和晶粒尺寸, SCIENTIX 返回裂变气体释放 (fission gas release, FGR)、气体肿胀等状态量并参与燃料棒内压与自由体积计算。采用 BR-3 反应堆 36i8 燃料棒终点数据进行验证, 耦合模型预测 FGR 为 28.49%, 较实验值 33.80%低 15.7%; 预测空腔体积为 $5.890 \times 10^{-7} \text{ m}^3$, 较实验值 $8.046 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ 低 26.8%。由于仅有单棒终点实验值, 该结果用于检验量级与变化趋势, 尚不足以证明模型具有普遍预测精度。进一步的 10~50 μm 晶粒尺寸敏感性计算表明, 在其余模型和边界条件不变时, 晶粒增大可延缓晶内气体向晶界迁移并降低连通释放贡献, 但会增加滞留气体肿胀。

关键词: 掺杂燃料; 大晶粒; 裂变气体释放; 燃料性能

中图分类号: TL146.21 **文献标志码:** A **文章编号:**

1 引言

2011 年福岛核事故后, 耐事故燃料 (accident tolerant fuel, ATF) 成为核燃料研发的重要方向^[1]。在多种 ATF 方案中, Cr₂O₃掺杂 UO₂可通过烧结促进晶粒长大并改善裂变气体滞留, 是现役 UO₂燃料的渐进式改进方案^[2-5]。相较 U₃Si₂、UN 等替代燃料, Cr₂O₃掺杂 UO₂与现有材料体系和制造工艺的兼容性较高, 但其堆内行为仍需通过多尺度模型和更多辐照数据验证。

实验与模型研究表明, 晶粒长大可增加裂变气体由晶内扩散至晶界的特征距离; 与此同时, Cr 价态、氧势、溶解度和缺陷浓度也会影响扩散系数及晶界气泡演化^[6-10]。因此, 裂变气体释放率 (fission gas release, FGR) 受晶粒尺寸、局部温度、燃耗、裂变率和自由体积反馈共同控制, 并呈非线性耦合特征^[11-16]。仅比较终点 FGR 难以判断误差究竟来自气体扩散、晶界连通释放, 还是燃料棒尺度的自由体积计算。

为处理上述问题, 本文在西安交通大学基于 MOOSE 开发的燃料性能分析程序 BEEs 中建立

与开源晶粒尺度裂变气体行为程序 SCIENTIX 的耦合接口^[17-23]。BEEs 负责燃料棒尺度热传导、力学、燃耗、间隙传热和内压求解; SCIENTIX 负责积分点处晶内扩散、晶界气泡演化、FGR 与气体肿胀计算。本文采用 BR-3 反应堆 36i8 高燃耗燃料棒进行单算例验证, 并分析晶粒尺寸对长期稳态响应的影响。

本文的创新点凝练为三方面: (1) 建立 BEEs-SCIENTIX 双尺度耦合接口, 并将其用于 Cr₂O₃掺杂 UO₂燃料棒的 FGR 分析, 使燃料棒积分点热工状态与晶粒尺度气体库存、释放和肿胀实现双向传递; (2) 将晶界气泡连通释放由单一饱和判据改为气泡相对尺度与晶界覆盖率共同触发, 并通过保留体积和累计释放分数限幅, 使高燃耗阶段的 FGR 跃升具有可追踪的几何与库存依据;

(3) 定量揭示晶粒尺寸对 FGR-间隙压力-气体肿胀协同关系的调控规律, 并用相邻区间差分识别晶粒长大收益递减的边际效应。上述贡献限定于本文采用的稳态功率历史、材料模型和单棒验证数据。

与同类研究相比, Cooper 等^[7]由原子尺度缺

收稿日期: 2026-?-? ; 修回日期: 2026-?-?

基金项目: 科工局核技术研发项目 (项目编号: HNKF202211(36)), 国家自然科学基金资助项目 (批准号: 12205230)

作者简介: 尹春雨, 男, 1982 年生, 硕士, 研究员级高级工程师, 中国核动力研究设计院先进核能技术全国重点实验室, 四川 成都 610213, E-mail: yinchunyu@npic.ac.cn

***通讯作者:** 巫英伟, 男, 1983 年生, 博士, 教授, 西安交通大学陕西省先进核电技术重点实验室, 陕西 西安 710049, E-mail: wYW810@mail.xjtu.edu.cn; 肖忠, E-mail: xz85903249@163.com

陷计算出建立 Cr 掺杂 UO_2 裂变气体扩散模型，并在 BISON 燃料性能框架中检验 FGR 响应；Nicodemo 等^[6]进一步把 Cr 溶解度、氧势和裂变气体扩散系数归并为适合工程程序调用的模型；Cleveland 等^[3]从材料制备、Cr 赋存状态、晶粒长大和服役性能角度总结了该体系的证据与不确定性。本文不重复建立 Cr 扩散系数，而以 Nicodemo 模型为晶粒尺度输入，重点贡献在于：将其嵌入 BEEs 积分点求解流程，增加经物理化改进的晶界连通释放准则，并同时考察 FGR、自由体积、间隙压力和气体肿胀的反馈及晶粒尺寸边际效应。

同时，近年来，围绕核燃料与锆合金包壳材料也有相关进展，如王瑶等总结 Cr 涂层锆合金在高温蒸汽中的氧化行为；朱利安等研究 Zr 合金表面 Ni/Cr 涂层的高温氧化；魏雅璇等评估充氢锆合金的拉伸性能；任啟森等开展 ZrC-SiC 基体弥散包覆颗粒模拟核燃料芯块的 SPS 制备^[27-30]。这些工作从包壳防护、氢致损伤和燃料芯块制备三个方面补充了燃料—包壳体系的材料学基础。

2 大晶粒 UO_2 行为分析

2.1 模型处理范围

Cr_2O_3 掺杂会同时改变 UO_2 显微组织和部分热物性。Terricabras 等^[2]在室温至 1200 °C (约 1473 K) 范围内测得高掺杂量样品的热导率可比未掺杂 UO_2 低约 15%，但该差异随掺杂量、密度、晶粒尺寸和温度而变化。本文沿用 BEEs 中的传统 UO_2 热导率模型；在 Cr 含量较低、温度不超过现有实验覆盖范围且仅比较相对 FGR 趋势时，这一简化尚可接受。本算例中心温度约 2132~2142 K，已超出上述公开测量上限，现有数据不足以给出可靠的高温误差界限。若真实热导率偏低，模型将低估温度及其对扩散系数和 FGR 的促进作用，本文晶粒尺寸敏感性结果不能代表掺杂热导率效应。

对比热和弹性参数，本文同样采用未掺杂 UO_2 模型。对于蠕变，尤堯等汇总的 Dugay 和 Massih 数据表明， Cr_2O_3 掺杂 UO_2 的高温蠕变参数目前主要覆盖 1773 K 和约 20~65 MPa 应力范围，且掺杂后蠕变速率明显提高^[26]。本算例局部温度约 584~2149 K、应力状态随空间和时间变化，直接用该窄工况参数外推会引入新的不确定性，故本文未将其写入本构模型，也未给出缺乏数据支撑的定量修正。蠕变增强首先影响芯块形变、间隙闭合、接触压力和自由体积，进而影响间隙压力；对由 SCIENTIX 扩散和连通释放直接控制的 FGR—晶粒尺寸趋势，其影响预计小于对空腔体积和 PCMI 的影响，这一判断仍需专门的敏感性算例验证。因此，本文不据当前结果评价掺杂对 PCMI 的净改善。

本文对 Cr_2O_3 掺杂效应的显式处理仅包括两项：一是将晶粒直径作为 SCIENTIX 输入，以改变晶内扩散特征尺度；二是采用 Nicodemo 等提

出的工程模型，使有效扩散系数随温度、氧势和溶解 Cr 含量变化^[6-7]。晶界释放阈值采用本文的连通释放工程算法修正，完整掺杂材料模型未参与该阈值推导。掺杂对导热率、蠕变率及晶界参数的独立影响未被系统纳入。

Cr_2O_3 通过多种材料机制促进晶粒长大。现有研究表明，烧结氧势决定 Cr 的价态、溶解度及第二相形成，Cr 可在晶格和晶界间重新分配；晶界处的 Cr 富集或含 Cr 瞬态相会改变缺陷化学与晶界迁移率，从而影响致密化和晶粒长大^[2-5]。但上述机制对烧结温度、氧势和初始掺杂量高度敏感。本文缺少 SEM/EBSD 和晶界化学数据，因此采用实测或设定的晶粒直径作为模型参数。10~50 μm 算例用于晶粒尺寸敏感性分析，其结果不对应特定掺杂量或确定的晶界偏聚机制。

2.2 燃料性能分析程序 BEEs

BEEs 是西安交通大学基于开源多物理场平台 MOOSE 开发的燃料性能分析程序，用于压水堆 UO_2 -Zr-4 棒状燃料的稳态、瞬态与事故行为计算。程序在燃料棒尺度求解热传导、力学变形、燃烧、间隙传热和内压，并包含芯块密实化、热膨胀、重定位、蠕变、裂变气体肿胀与释放，以及锆合金包壳热膨胀、辐照生长、蠕变和腐蚀等模型^[17-19]。本文仅使用其长期稳态分析功能。

BEEs 此前通过若干燃料棒算例和独立效应试验检验温度、包壳氧化、FGR 及事故响应；相关计算框架亦与 BISON 等程序进行过基准对比。这些工作表明程序具备开展燃料棒多物理场计算的基础，但不能替代本文对新耦合模块的独立验证。

2.3 裂变气体行为分析程序 SCIENTIX

SCIENTIX 是由米兰理工大学与欧盟联合研究中心开发的开源零维晶粒尺度裂变气体行为程序^[21-23]，采用速率理论描述气体生成、晶内扩散、晶界吸收、气泡成核与长大、连通释放和气体肿胀，并以分离效应与燃料棒积分实验进行验证。Nicodemo 等在该框架中建立了溶解 Cr 和氧势对裂变气体有效扩散系数的工程修正^[6-7]。本文将 SCIENTIX 作为 BEEs 积分点处的材料行为模块，其计算范围限定于晶粒尺度裂变气体行为。

SCIENTIX 将裂变气体行为分解为晶内气体生成与扩散、晶界吸收、晶界气泡成核与长大、气泡连通释放以及气体肿胀等环节^[21-23]。其中，晶内扩散控制气体从晶粒内部向晶界迁移的速率，晶界气泡覆盖率和饱和覆盖率决定连通释放通道形成的可能性，气体肿胀则反映未释放气体在芯块内部的体积效应。对于 Cr_2O_3 掺杂 UO_2 燃料，本文采用 Nicodemo 模型描述 Cr 溶解度和氧势对裂变气体扩散系数的影响^[6-7]，使晶粒尺寸、掺杂效应和局部热工状态能够共同进入裂变气行为计算。

SCIENTIX 裂变气行为控制方程的表达为式 (1)。式中， r 为晶粒径向坐标， R_g 为晶粒半径， C 为晶内可迁移裂变气体浓度， β 为局部裂变气生成率， D_{eff} 为考虑 Cr 溶解度和氧势修正后

的有效扩散系数, N_{gb} 、 N_{rel} 和 N_{prod} 分别为晶界气体库存、已释放气体量和稳定裂变气生成量。晶内气体扩散采用球形晶粒近似, 其控制方程为式 (1), 该式描述裂变气在晶内由生成项和扩散项共同控制, 晶界通量由式 (2) 给出, 并作为晶界气泡模型的气体源项。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_{eff} \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \beta, 0 < r < R_g \quad (1)$$

$$J_{gb} = -D_{eff} \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R_g}, \frac{dN_{gb,in}}{dt} = 4\pi R_g^2 J_{gb} \quad (2)$$

进入晶界的气体首先增加晶界库存, 并通过再释放、捕获和连通释放等过程重新分配。在本文的工程实现中, 晶界气体库存演化和气泡状态可用式 (3) 和式 (4) 表示。

$$\frac{dN_{gb}}{dt} = \frac{dN_{gb,in}}{dt} - \frac{dN_{res}}{dt} - \frac{dN_{conn}}{dt} \quad (3)$$

$$F_{gb} = \frac{N_{gb} A_b}{A_{gb}}, V_b = \frac{4\pi R_b^3}{3}, P_b V_b = n_b R T \quad (4)$$

连通释放采用几何尺度与覆盖率共同触发。若晶界气泡相对半径超过阈值, 或晶界气泡覆盖率达到饱和覆盖率, 则连通释放被触发; 触发后释放量还受到本步保留体积和累计连通释放分数限制, 见式 (5) 和式 (6)。

$$I_{conn} = 1, R_b / R_g \geq \eta_R, F_{gb} \geq F_{sat}, I_{conn} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{dN_{conn}}{dt} = I_{conn} (1 - f_{keep}) \frac{N_{gb}}{\Delta t}, f_{conn,cum} = \frac{N_{conn,cum}}{N_{prod}} \leq f_{lim} \quad (6)$$

未释放气体以晶内气泡和晶界气泡形式滞留时, 会贡献气体肿胀。本文将 SCIENTIX 返回的局部释放量和局部肿胀量体积加权到燃料棒尺度, 形

成 BEEs 内压、间隙传热和变形计算的输入, 见式 (7) 和式 (8)。

$$\epsilon_{gas} = \frac{V_{intra} + V_{inter}}{V_{fuel}} \quad (7)$$

$$FGR_{rod} = \frac{\sum_k \Delta N_{rel,k}}{\sum_k \Delta N_{prod,k}}, \epsilon_{gas,rod} = \frac{\sum_k V_k \epsilon_{gas,k}}{\sum_k V_k} \quad (8)$$

其中, Nicodemo 掺 Cr UO₂ 扩散修正通过 Deff 进入式 (1) 和式 (2)。式 (9) 将该修正表示为由温度、氧势和溶解 Cr 含量共同决定的局部材料参数。

$$D_{eff} = D_{UO_2}(T) f_{Cr}(C_{Cr}^{sol}, T) f_o(\Delta G_{O_2}, T)$$

$$C_{Cr}^{sol} = \min(C_{Cr}^{tot}, C_{Cr}^{sol,*}(T, \Delta G_{O_2})) \quad (9)$$

式中, J_{gb} 为晶内气体进入晶界的通量, A_b 为单个晶界气泡投影面积, A_{gb} 为晶界面积, F_{gb} 和 F_{sat} 分别为晶界气泡覆盖率和饱和覆盖率, I_{conn} 为连通释放触发函数, f_{lim} 为累计连通释放分数上限, ϵ_{gas} 为局部气体肿胀, V_k 为第 k 个积分点对应的体积, ΔG_{O_2} 为氧势相关变量。上述公式给出本文耦合计算采用的状态量关系, 具体速率系数和材料参数取自 SCIENTIX 及掺 Cr UO₂ 扩散模型。

3 裂变气体模块开发与验证

3.1 裂变气体分析模块设计与开发

本文开发了 BEEs 与 SCIENTIX 耦合接口, 用于分析掺杂燃料芯块的裂变气体释放行为, 接口如图 1 所示。

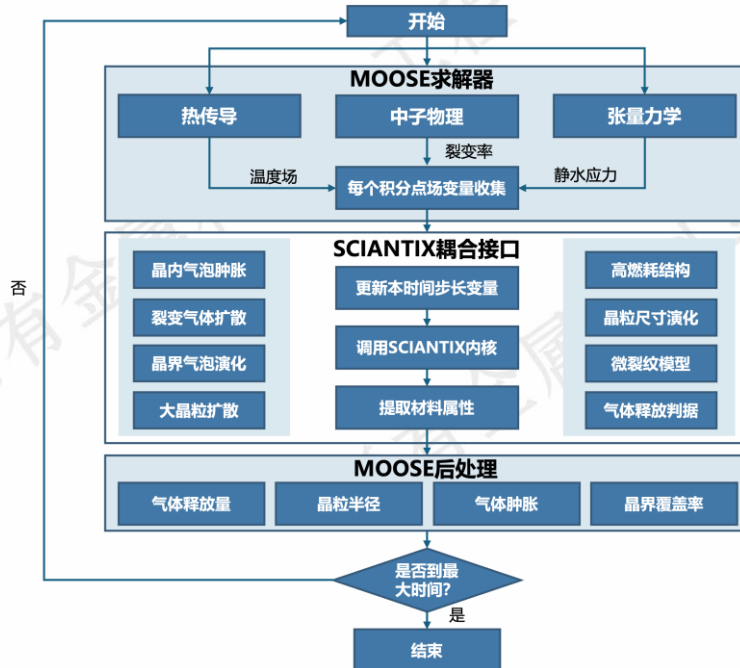


图 1 BEEs 程序和 SCIENTIX 程序耦合接口

Fig. 1 Interface design between BEEs and SCIENTIX

每个时间步内, BEEs 先在有限元积分点更新局部温度、裂变率、燃耗和力学状态, 并向 SCIENTIX 传递时间步长、晶粒尺寸等输入;

SCIENTIX 更新晶内/晶界气体库存、晶界气泡状态、FGR 和气体肿胀, 再将局部结果返回 BEEs。BEEs 对各积分点释放量和肿胀量按代表体积加

权，用于更新全棒 FGR、自由体积、间隙传热和内压。该接口的输入、输出与求解顺序见图 1。

该耦合以有限元积分点代表局部均匀材料体积，使燃料棒轴向和径向非均匀状态能够进入晶粒尺度计算；其代价是未显式解析单个积分点内部的晶粒分布、裂纹网络和孔洞连通。

3.2 模块验证

本文采用比利时 BR-3 反应堆压水堆高燃耗燃料棒 24i6 和 36i8 的公开数据建立算例^[24-25]，设计参数见表 1；其中，新耦合模块的定量验证仅使用 36i8 燃料棒的终点 FGR 与空腔体积。因实验样本为单棒、单终点，本文报告相对误差，不进行不具备数据基础的显著性检验或置信区间估计。

表 1 24i6 和 36i8 燃料棒设计参数

设计参数	24i6	36i8
包壳类型	Zr-4	Zr-4
包壳外径 (mm)	10.719	10.719
包壳内径 (mm)	9.4844	9.4793
燃料外径 (mm)	9.2939	9.2888
燃料长度 (mm)	975.36	975.36
充气压力 (MPa)	1.38	1.48
燃料富集度 (% U-235)	6.42	8.53
燃料密度 (% TD)	94.77	94.77
芯块粗糙度 (μm)	0.6	0.6
包壳粗糙度 (μm)	0.56	0.56
空腔长度 (mm)	101.97	101.97

为减少网格数量并保持径向分辨率，模型将燃料、包壳及空腔轴向长度等比例缩短至原长的 1/10，同时对轴向坐标和功率分布作相同缩放。燃料采用轴向 30×径向 25 个单元，包壳采用轴向 30×径向 4 个单元，网格形式见图 2。该等效处理假定轴向缩放不改变局部线功率、体积加权关系和端部效应；由此带来的不确定性未单独量化。

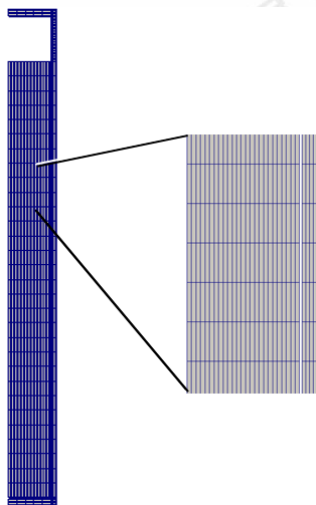


图 2 模拟计算时网格划分形式

Fig. 2 Mesh discretization used in the simulation
采用上述接口后，本文以 36i8 燃料棒比较耦

合肿胀、不耦合肿胀及 Forsberg-Massih 经验模型^[14]。耦合模型保留局部温度、燃耗和裂变率的空间差异，并输出晶内/晶界库存、FGR、气体肿胀、自由体积和内压；相较仅给出 FGR 的经验相关式，该耦合计算还提供多类状态量；其预测准确性仍需根据各可观测量的误差分别判断。

模型实现中，本文修正了 SCIENTIX 晶界气泡行为模型中的连通释放触发准则。原模型中晶界气体释放主要由晶界气泡饱和及连通状态控制，在高燃耗算例中容易出现连通释放过早或过强的问题。为此，本文将触发条件改写为由晶界气泡几何尺度和晶界面积覆盖状态共同判定：每一时间步计算晶界气泡半径、晶粒半径、晶界气泡面积覆盖率及其饱和覆盖率，当气泡相对半径超过给定阈值，或晶界覆盖率达到饱和覆盖率时，认为晶界气泡已形成连通通道并触发释放。

$$R_b / R_g > 0.2 \text{ 或 } F_{gb} > F_{sat} \quad (10)$$

其中， R_b 为晶界气泡半径， R_g 为晶粒半径， F_{gb} 为晶界气泡面积覆盖率， F_{sat} 为饱和覆盖率。该准则的物理基础是：当晶界气泡相对晶粒尺度已经足够大，或晶界面积覆盖率达到饱和状态时，晶界气泡之间具备连通并向外部释放的条件。若两个条件均不满足，则本时间步不发生连通释放。

触发后，模型先根据半径阈值和覆盖率饱和条件确定允许保留的等效气泡半径，再由允许保留体积与当前气泡体积之比计算本步保留分数。相应地，本步释放分数等于 1 减去保留分数。该处理使连通释放同时受到几何触发条件和库存保留比例的约束，避免晶界气体在单个时间步内无控制地全部转化为释放气体。

三组计算均稳定积分至终点，未出现明显非物理突变。表 2 给出寿期末结果：数值稳定仅说明求解过程可完成，并不等同于模型已经获得实验验证。

表 2 36i8 燃料棒验证结果

Table 2 Validation results of the 36i8 fuel rod				
对象	FGR,%	空腔体总气体肿间隙压 积,10 ⁻⁷ m ³ 胀,% 力,MPa		
实验	33.80	8.046	-	-
耦合肿胀	28.49	5.890	2.23	19.09
不耦合肿胀	30.03	5.732	1.42	23.63
Forsberg-Massih	41.23	6.112	-	25.32

耦合肿胀模型预测 FGR 为 28.49%，较实验值 33.80% 低 5.31 个百分点，相对误差为 -15.7%；预测空腔体积为 $5.890 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ ，较实验值 $8.046 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ 低 $2.156 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ ，相对误差为 -26.8%。不耦合肿胀模型的 FGR 为 30.03%（相对误差 -11.2%），但空腔体积仍偏低；Forsberg-Massih 模型的 FGR 为 41.23%（相对误差 +22.0%），空腔体积为 $6.112 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ （相对误差 -24.0%）。因此，各模型在 FGR 和空腔体积上的优劣并不一致。

该结果表明，BEEs-SCIENTIX 耦合能够在

同一框架内提供多物理量响应，但当前算例仍系统低估空腔体积。具体比较中，耦合与不耦合气体肿胀时空腔体积分别为 5.890×10^{-7} 和 $5.732 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ ，差异仅 2.8%，明显小于耦合结果相对实验值 26.8% 的低估。因此，气体肿胀反馈仅解释小部分空腔体积偏差。剩余偏差更可能来自三类因素：轴向等效缩短及端部自由体积映射

误差；芯块重定位、开裂、蠕变和包壳约束等力学反馈误差；气泡体积向宏观肿胀应变的尺度转换误差。现有单终点数据无法进一步分离三者，后续应分别通过全长几何对比、力学模型开关试验及独立肿胀数据校核。FGR 相对误差仍为 15.7%，据此只能认为模型复现了 FGR 量级，不能表述为已达到工程预测精度。

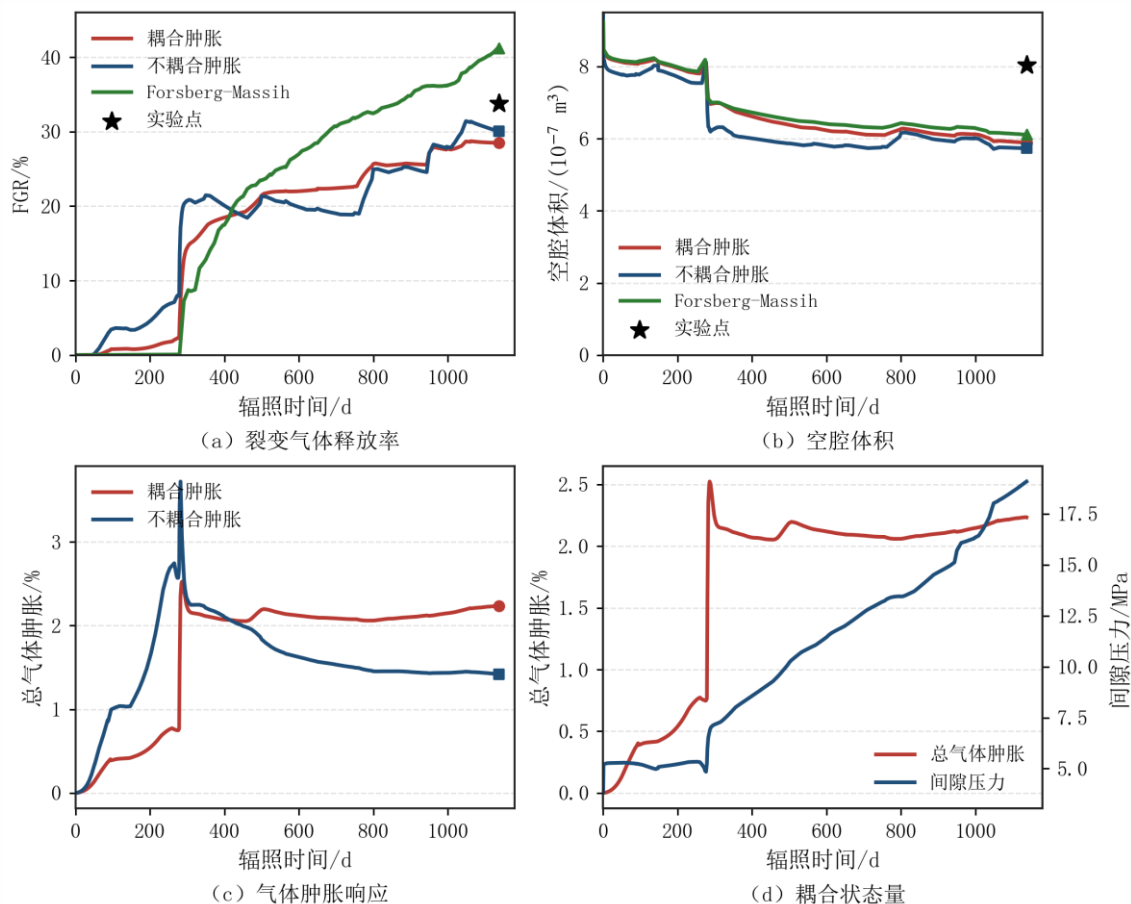


图 3 36i8 燃料棒裂变气体释放、空腔体积及耦合状态量验证结果

Fig. 3 Validation results of fission gas release, void volume and coupled state variables for 36i8 fuel rod

如图 3(a)所示，耦合肿胀与不耦合肿胀结果在约 280 d 附近均出现 FGR 快速上升，随后缓慢累积；该跃升与晶界气泡覆盖率达到连通释放条件相对应。图 3(b)中的空腔体积低估反映自由体积映射或芯块-包壳力学反馈仍有偏差；图 3(c)、图 3(d)表明气体肿胀反馈会改变间隙压力和空腔体积，但对终点 FGR 的影响小于连通释放处理。

本节以 FGR 和空腔体积的相对误差评价终点一致性，并以气体肿胀和间隙压力曲线检查模型内部响应。受限于单棒、单终点实验数据，尚不能分离参数不确定性、模型形式误差和实验误差，也不能给出统计意义上的精度结论。

4 大晶粒 UO_2 稳态服役性能分析

4.1 计算对象和输入条件

基于前述 36i8 燃料棒验证算例，本章考察晶

粒尺寸对大晶粒掺杂燃料稳态服役行为的影响。计算对象仍为 BR-3 反应堆 36i8 高燃耗燃料棒，辐照时间为 1137 d，终点燃耗约 61.6 MWd/kgU。为形成从常规晶粒到大晶粒燃料的对比，本文设置 10 μm 、20 μm 、30 μm 、40 μm 和 50 μm 五组晶粒直径工况，其中 10 μm 代表常规 UO_2 晶粒尺度，50 μm 代表大晶粒掺杂燃料尺度。

五组工况除晶粒直径外保持相同功率历史、边界条件和模型设置。晶内扩散采用 Turnbull 模型^[15]；大于 10 μm 的工况同时启用 Nicodemo 模型对 Cr 溶解度及有效扩散系数的修正^[6]。因此，这组计算同时包含晶粒尺寸和扩散模型开关两项变化。10 μm 基准与其余工况之间存在扩散模型开关差异，所得变化反映本文设定下“大晶粒+Cr 扩散修正”的联合敏感性。

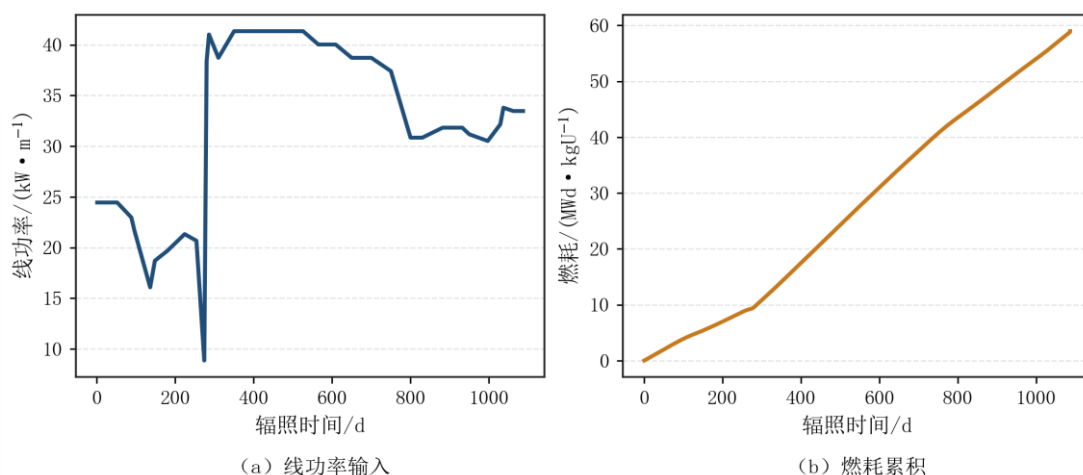


图 4 36i8 燃料棒线功率与燃耗输入

Fig. 4 Linear power and burnup input of the 36i8 fuel rod

图 4 给出了本章敏感性分析的共同输入。36i8 燃料棒在约 280 d 前后进入较高功率平台，随后燃耗随辐照时间持续累积。由于五组晶粒尺寸工况采用相同线功率和燃耗历史，后续 FGR、间隙压力、气体肿胀和空腔体积差异不应归因于外部功率输入，而应从晶粒尺度扩散距离、晶界气体积累和连通释放过程解释。

4.2 晶粒尺度气体滞留与晶界积累机制

图 5 从晶粒尺度给出气体迁移的直接证据。随着晶粒尺寸增大，晶内稳定气体滞留份额整体升高，说明裂变气体从晶内扩散至晶界的特征距离增加后，晶界气体源项受到抑制。与 10 μm 工况相比，50 μm 工况在寿期末仍保持更高晶内滞留能力，表明大晶粒设计主要延缓裂变气体从晶内向晶界和释放通道转移。

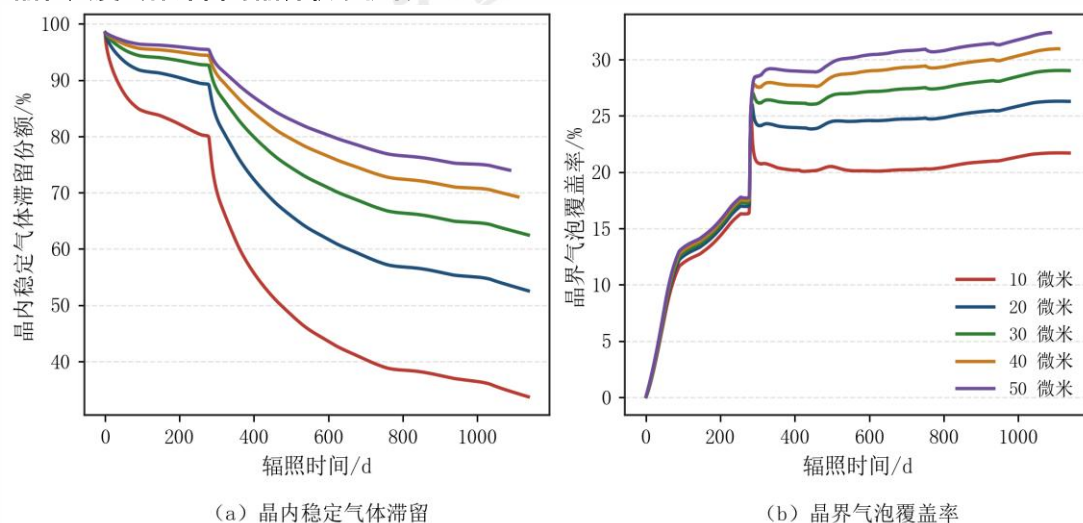


图 5 不同晶粒尺寸下晶粒尺度裂变气体行为

Fig. 5 Grain-scale fission gas behavior under different grain sizes

晶界气泡覆盖率反映了连通释放条件的形成过程。小晶粒工况中，晶界气泡覆盖率和连通释放相关量更早升高，表明晶界气体更容易达到释放触发条件；大晶粒工况虽然单位体积晶界面积减少，但更关键的是晶内向晶界的供气流量降低，因此晶界气泡连通释放被推迟并削弱。这一过程表明，晶粒增大先改变晶内扩散和晶界积累，再影响后续 FGR 和内压响应。

4.3 燃料棒尺度响应及终端指标比较

图 6 给出了晶粒尺度差异对应的燃料棒尺度响应。不同晶粒尺寸下燃料中心温度差异较小，说明当前稳态工况中晶粒尺寸并未改变热输入，整体温度水平差异较小。相比之下，FGR、间隙

压力和空腔体积对晶粒尺寸更敏感。FGR 曲线在约 280 d 附近均出现快速上升，对应晶界连通释放触发和释放通道形成；晶粒尺寸越大，跃升后的 FGR 水平越低，后期增长也越缓慢。

FGR 差异也体现在间隙压力上。10 μm 工况释放气体量最高，寿期末间隙压力也最高；50 μm 工况 FGR 最低，间隙压力增长最慢。空腔体积随辐照时间整体降低，但其变化幅度小于 FGR 和间隙压力，说明自由体积同时受热膨胀、气体肿胀、包壳约束和间隙闭合影响，不能简单等同于释放气体量。燃料棒尺度评价因而需要同时考察 FGR、间隙压力、空腔体积和气体肿胀。

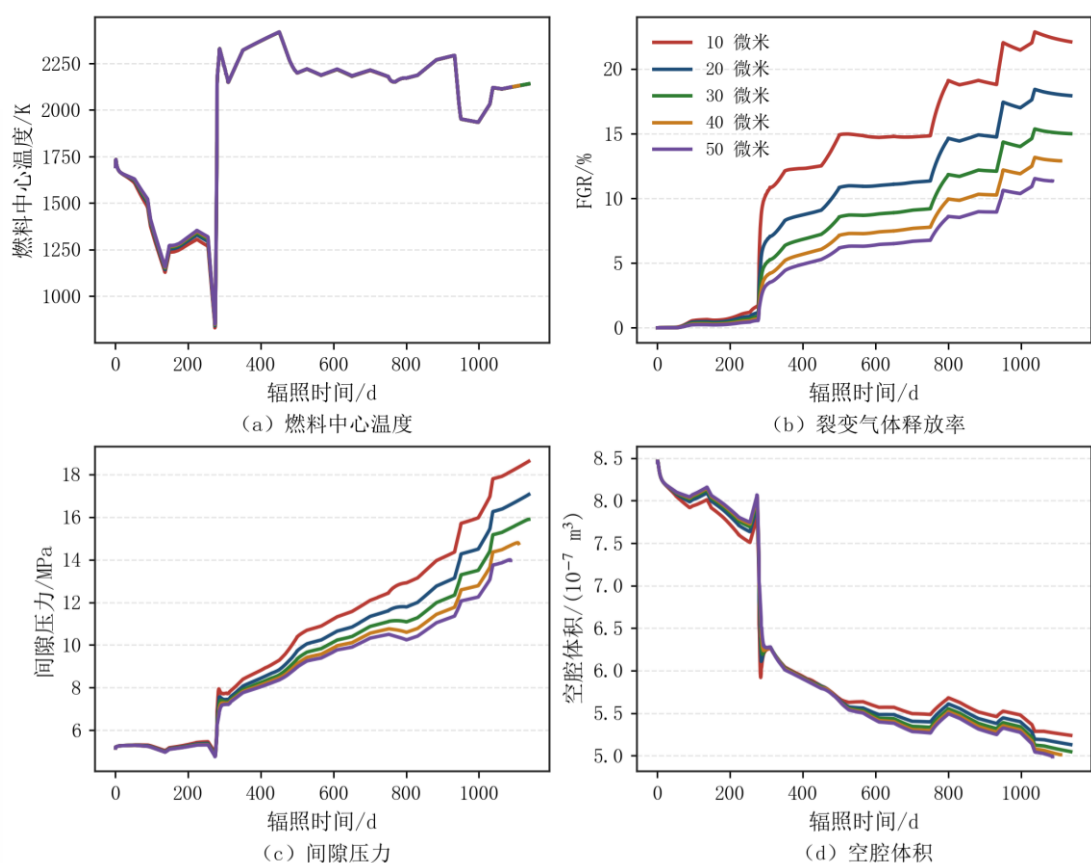


图 6 不同晶粒尺寸下燃料棒热-气状态响应

Fig. 6 Rod-scale thermal and gas-state responses under different grain sizes

图 7 汇总终点结果：晶粒直径由 10 μm 增至 50 μm 时，FGR 由 22.10% 降至 11.30%，间隙压力由 18.62 MPa 降至 14.49 MPa，累计连通释放分数由 1.127% 降至 0.746%，总气体肿胀则由 2.07% 升至 2.36%。这些数值是确定性算例输出，不包含材料参数、功率历史或数值离散不确定度。

在本组设定中，晶粒越大，进入自由体积的气体越少，FGR 与间隙压力越低；与此同时，更多气体滞留在芯块内部，气体肿胀略有增加。因此，“性能改善”仅适用于 FGR 和内压指标，不能扩展为所有服役指标均改善。

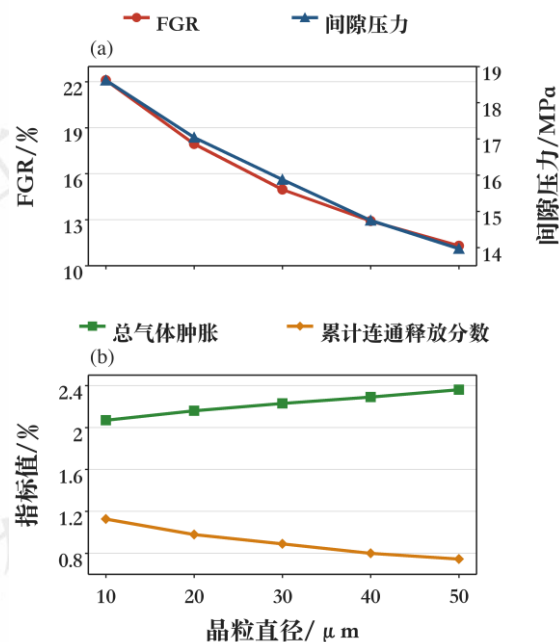


图 7 晶粒尺寸对末期关键指标的影响

Fig. 7 Effect of grain size on end-of-life key indicators

由图 5 至图 7 可知，晶粒增大降低晶界供气 and 累计连通释放，使 FGR 下降；FGR 下降减少进入间隙自由体积的气体量，使间隙压力降低；与此同时，未释放气体更多以晶内或晶界气泡形式滞留，使气体肿胀响应增强。

4.4 多指标定量综合

以 50 μm 相对 10 μm 工况计算, FGR 降低 48.8%, 间隙压力降低 22.2%, 累计连通释放分数降低 33.8%, 总气体肿胀增加 14.1%。这些相对变化用于描述所选五个确定性工况的敏感性幅度, 不代表实验统计分布, 也不支持显著性判断。

温度结果为上述比较提供了可比性约束。10 μm 至 50 μm 各工况最终输出点的燃料中心温度均处于约 2132-2142 K, 整体温度水平相近。各工况采用相同的热边界条件, FGR 和间隙压力差异主要来自晶粒尺度气体迁移和连通释放过程。

空腔体积提供了另一类约束。10 μm 至 50 μm 工况的空腔体积由 $5.238 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ 降低至 $4.928 \times 10^{-7} \text{ m}^3$, 变化约为-5.9%; 而 FGR 和间隙压力分别降低 48.8% 和 22.2%。自由体积演化具有较强的热-力耦合特征, 不能只用裂变气体释放量解释。模型验证阶段还需把空腔体积作为独立约束, 不能只用 FGR 拟合实验结果。

现有稳态结果显示, 大晶粒掺杂燃料在高燃耗稳态条件下主要通过降低晶界连通释放贡献来降低 FGR 和燃料棒内压, 但代价是气体滞留和气体肿胀响应增强。

4.5 边际敏感性分析

为检验上述趋势能否线性外推, 本文对 10 μm 、20 μm 、30 μm 、40 μm 和 50 μm 工况进行区间差分分析, 用相邻晶粒尺寸之间每增加 10 μm 晶粒直径引起的关键指标变化评价边际效应。

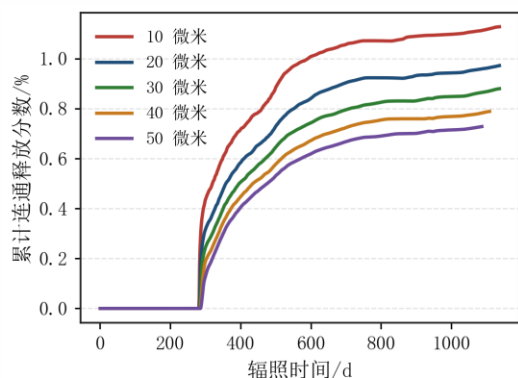
区间差分结果显示, 晶粒长大对 FGR 和间隙压力的边际收益递减: 晶粒直径每增加 10 μm , FGR 在 10~20、20~30、30~40 和 40~50 μm 区间分别降低 4.16、2.94、2.08 和 1.61 个百分点;

间隙压力的对应降幅也逐步减小。若仅从本算例的性能增益看, 30~40 μm 可视为“工程拐点”候选区间: 此后继续增大晶粒仍可降低 FGR, 但单位晶粒增量的收益明显下降, 且气体肿胀继续增加。

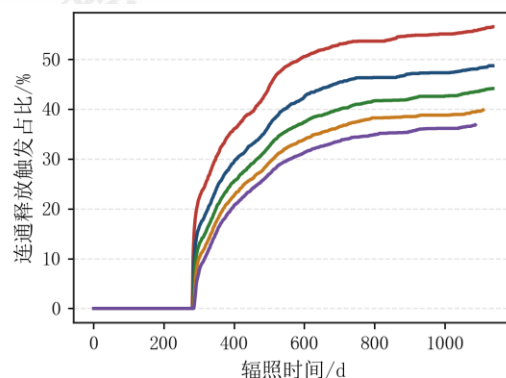
气体肿胀的边际增量同样随晶粒尺寸增大而减小, 但始终为正值。晶粒长大降低释放气体对间隙压力的贡献, 但滞留气体仍会以晶内气体或晶界气泡形式参与气体肿胀和局部体积响应。仅以 FGR 或内压评价大晶粒燃料, 可能会高估其综合收益: 将气体肿胀和空腔体积纳入评价后, 评价结果更完整。

五个工况的终点指标随晶粒尺寸呈单调趋势, 可作为模型内部机理一致性检查。但“经济最优晶粒尺寸”还取决于掺杂剂用量、烧结温度与时间、成品率、晶粒均匀性、热导率、蠕变/开裂和安全裕量等成本与约束; 本文未建立这些目标函数, 故不能宣称 30~40 μm 为经济最优值, 只能将其作为后续多目标优化的候选范围。由于样本点少、输入非随机且 10 μm 工况与其余工况存在扩散模型开关差异, 本文也不计算相关显著性或作区间外推。

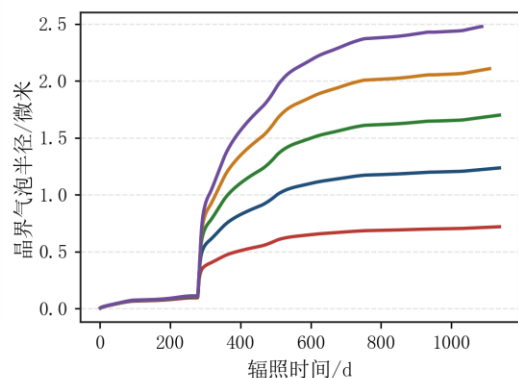
在上述适用范围内, 接口能够连接积分点热工状态与晶粒尺度裂变气行为; 修改后的连通释放处理可解释 36i8 算例中的 FGR 跃升; 在给定模型设置下, 大晶粒工况的 FGR 和间隙压力降低而气体肿胀增加。当前模型及验证仅针对长期稳态功率历史, 不适用于功率跃升、反应性引入事故或失水事故等瞬态/事故工况; 对这些工况, 裂纹网络、快速温变、释放通道重构、高温蠕变和包壳瞬态响应均需重新建模与验证。



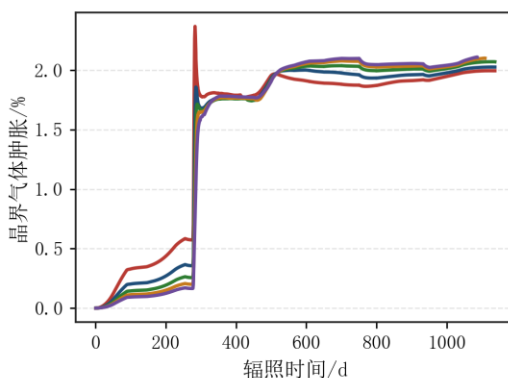
(a) 累计连通释放分数



(b) 连通释放触发占比



(c) 晶界气泡半径



(d) 晶界气体肿胀

图 8 不同晶粒尺寸下连通释放诊断量演化

Fig. 8 Evolution of connected-release diagnostic variables under different grain sizes

除终端指标外，SCIANTIX 还输出连通释放诊断量、晶界气泡半径、晶界气体肿胀和稳定气体库存分配等时间序列。这些变量用于检验前述终端结论是否能在中间状态量上得到支持，避免把复杂辐照过程压缩为单一寿期末数值。

图 8 给出了连通释放相关诊断量。随着晶粒尺寸增大，累计连通释放分数和连通释放触发占

比整体降低，说明大晶粒工况不仅降低终端 FGR，也削弱整个辐照历程中的连通释放贡献。晶界气泡半径和晶界气体肿胀进一步反映了晶界气体积累状态：小晶粒工况更快形成较高晶界气体库存并触发释放，而大晶粒工况晶界气体演化更缓慢，释放通道形成被推迟。

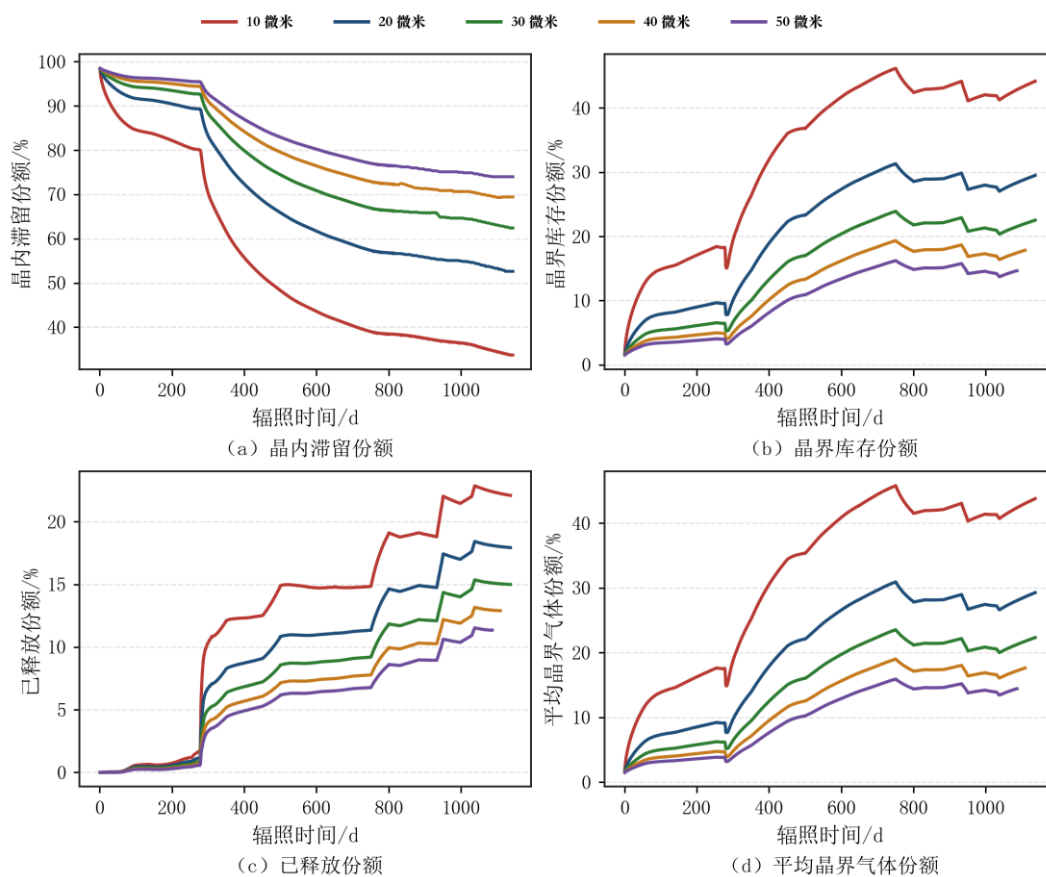


图 9 不同晶粒尺寸下稳定裂变气体库存分配

Fig. 9 Stable fission-gas inventory partition under different grain sizes

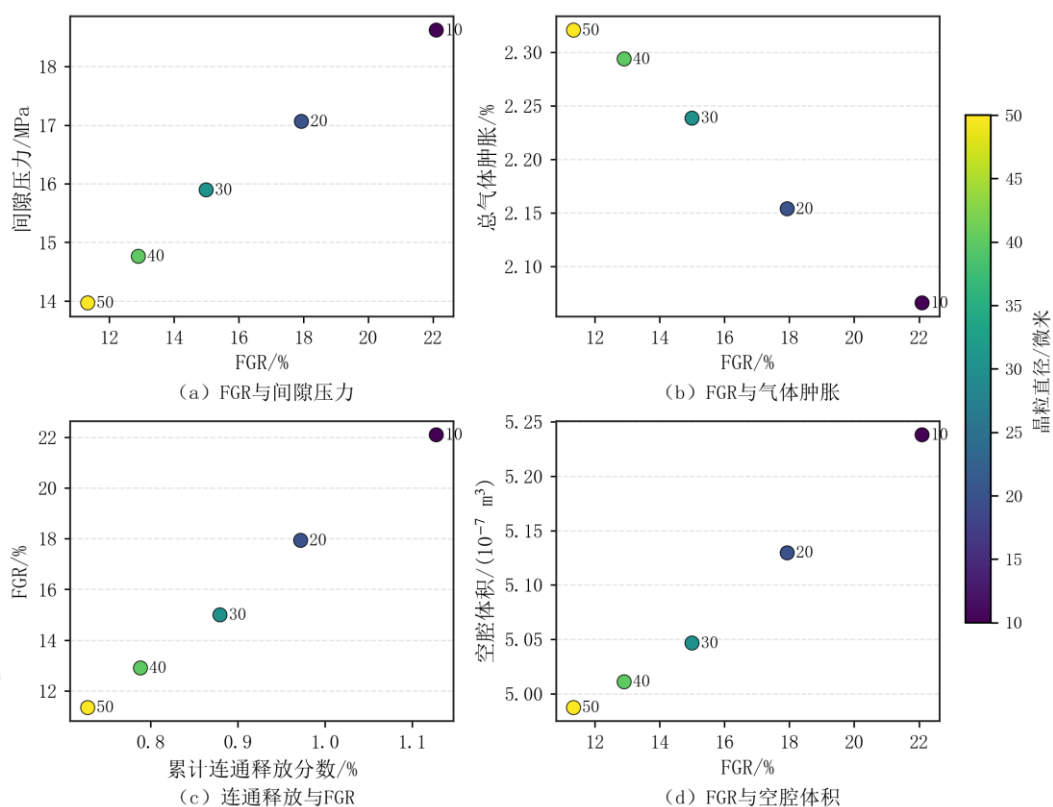


图 10 晶粒尺寸敏感性终点指标关联

Fig. 10 Correlations among end-of-life indicators in the grain-size sensitivity analysis

图9从稳定裂变气体库存分配角度检验上述机理。小晶粒工况中，已释放气体份额和晶界库存更早增加；大晶粒工况中，晶内滞留份额更高、晶界库存更低，与图5的晶粒尺度响应及图6的FGR、间隙压力变化相一致。

图10集中展示终点指标之间的关系：FGR与间隙压力同向变化，累计连通释放分数较高的

工况通常具有较高FGR，而总气体肿胀随FGR降低而增加。该图用于展示五个确定性工况的权衡关系，不作统计相关性推断。

本文还提取50 μm 工况寿期末结果，绘制温度、局部燃耗、局部FGR、总气体肿胀和晶界气泡覆盖率云图，如图11所示。

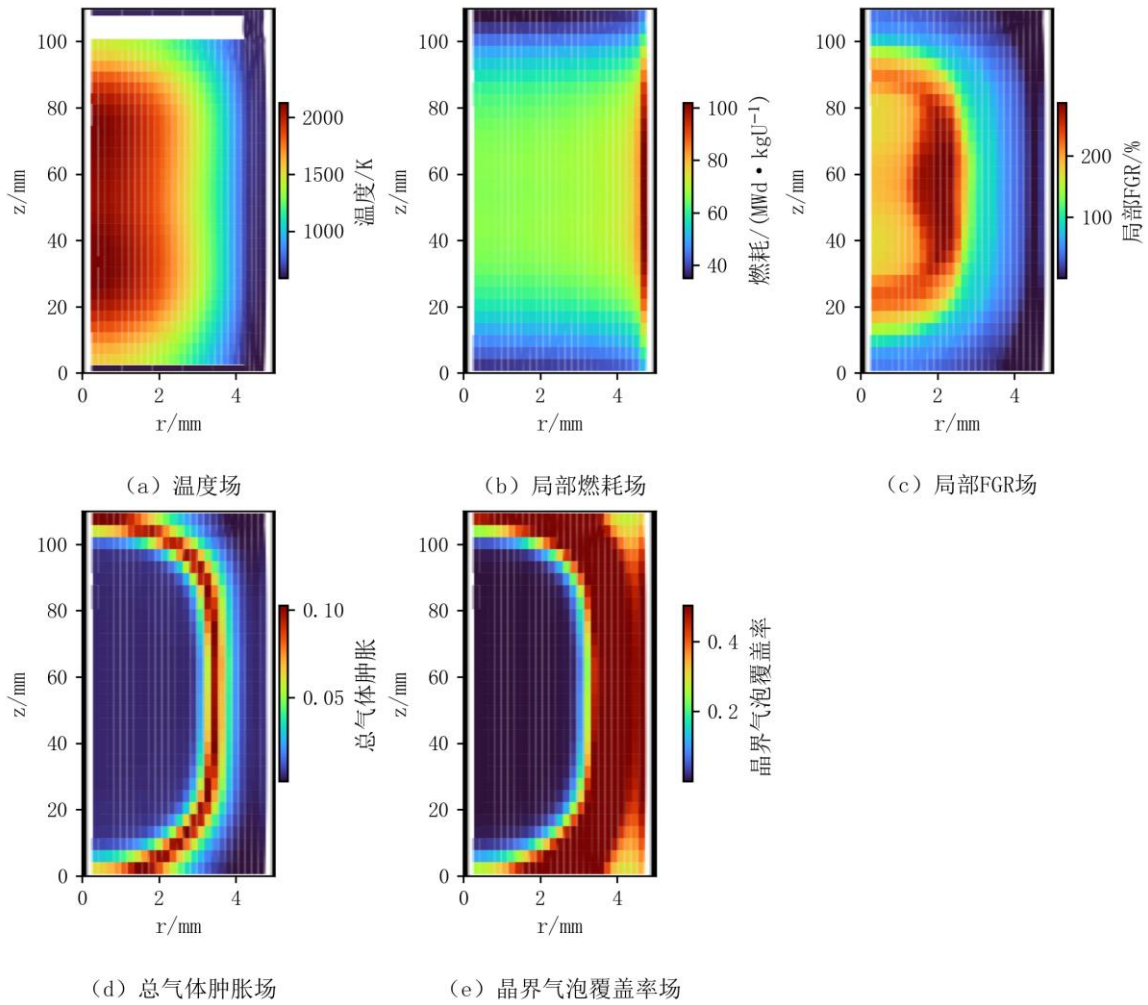


图 11 50 μm 工况寿期末场变量空间分布

Fig. 11 Spatial distributions of key field variables at end of life for the 50 μm case

图 11(a)、图 11(b)给出 50 μm 工况寿期末温度场和局部燃料场，范围分别约为 584~2149 K 和 34.6~102.9 MWd/kgU。二者均呈轴向和径向非均匀分布；全棒 FGR 和肿胀曲线来自积分点局部响应的体积加权，代表空间非均匀状态。

图 11(c)的局部 FGR 场呈非均匀分布，并与温度和燃料场存在空间对应关系。高温区域具有更高扩散能力，高燃料区域具有更多裂变气体源项，二者叠加后局部释放响应相对较高。

图 11(d)显示气体肿胀具有空间非均匀性，局部最大值约为 0.108。该分布与图 7 中 50 μm 工况终点总气体肿胀最高的趋势一致：释放量降低的同时，局部滞留气体体积响应增强。

图 11(e)给出的晶界气泡覆盖率场用于表征连通释放触发机制。覆盖率局部可达到约 0.50；即使在 50 μm 大晶粒工况下，部分高温高燃料区域仍可能接近晶界气泡连通或饱和状态。相较图 9 和图 10 的时间序列，云图给出了连通释放诊断量的空间来源：时间曲线中的累计连通释放和晶界气体库存变化，实际上来自燃料芯块内部不同位置的非均匀贡献。连通释放在全棒范围内具有空间非同步特征，其局部响应由温度、燃料、晶界气体积累和气泡覆盖率共同控制。

5 结论

本文在 BEEs 中耦合 SCIANTIX 裂变气体行为模块，并以 BR-3 反应堆 36i8 燃料棒终点数据进行验证；随后开展晶粒尺寸敏感性计算。在本文模型、参数和边界条件范围内，得到以下结论：

(1) BEEs-SCIANTIX 接口可在有限元积分点传递局部温度、燃料、裂变率与晶粒尺寸，并将 SCIANTIX 计算的 FGR 和气体肿胀反馈至燃料棒自由体积与内压求解，从而同时输出微观库存和宏观响应。

(2) 36i8 算例中，耦合模型预测 FGR 为 28.49%，相对实验值低 15.7%；预测空腔体积为 $5.890 \times 10^{-7} \text{ m}^3$ ，相对实验值低 26.8%。模型复现了 FGR 量级并提供了时间响应，但空腔体积偏差较大；单棒终点数据不足以证明普适预测精度。

(3) 在给定设置下，晶粒直径由 10 μm 增至 50 μm 时，FGR 由 22.10%降至 11.30%，累计连通释放分数由 1.127%降至 0.746%。该趋势与晶内滞留增加、晶界供气和连通释放减弱一致，但 10 μm 与其余工况之间还包含 Cr 扩散修正开关的影响。

(4) 同一组工况中，终点间隙压力由 18.62 MPa 降至 14.49 MPa，而总气体肿胀由 2.07%升

至 2.36%。因此,大晶粒工况在 FGR 和内压方面表现出有利趋势,但伴随气体滞留和肿胀增加,不能概括为整体服役性能无条件改善。

(5) FGR 对晶粒尺寸的区间变化幅度由 10~20 μm 间的 4.16 个百分点降至 40~50 μm 间的 1.61 个百分点,提示边际效应减弱。由于仅计算五个确定性工况,且未传播输入不确定度,该结果不用于统计显著性判断或区间外外推。

本研究仍有四项主要局限:(1)仅以 36i8 单棒终点 FGR 和空腔体积验证,24i6 虽用于建模参数整理,但尚未形成可报告的独立计算结果,验证工况单一;(2)缺少与本文算例对应的 SEM/EBSD 晶粒形貌、晶界偏聚和辐照后微观组织证据,晶粒尺寸采用参数化输入;(3)未系统纳入掺杂热导率、高温蠕变、裂纹网络和晶界参数变化,对空腔体积仍有明显低估;(4)模型仅经稳态功率历史检验,不适用于瞬态和事故外推。后续应补充 24i6 或其他功率/燃料历史算例,开展全长几何、网格/时间步、蠕变和热导率敏感性分析,并用多棒宏观数据及 SEM/EBSD 等微观证据进行分层校核。

参考文献 References

- [1] TERRANI K A. *Journal of Nuclear Materials*, 2018, 501: 13-30.
- [2] TERRICABRAS A J, DREWRY S M, CAMPBELL K, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2024, 594: 155022.
- [3] CLEVELAND M W, NELSON A, JOSSOU E. *Nuclear Engineering and Design*, 2026, 446: 114631.
- [4] SMITH H, TOWNSEND L T, MOHUN R, et al. *Communications Chemistry*, 2022, 5: 163.
- [5] MURPHY G L, GERICKE R, GILSON S, et al. *Nature Communications*, 2023, 14: 2375.
- [6] NICODEMO G, ZULLO G, CAPPIA F, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2024, 601: 155301.
- [7] COOPER M W D, PASTORE G, CHE Y, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2021, 545: 152590.
- [8] KILLEEN J C. *Journal of Nuclear Materials*, 1980, 88(2-3): 177-184.
- [9] KASHIBE S, UNE K. *Journal of Nuclear Materials*, 1998, 254(2-3): 234-242.
- [10] REST J, COOPER M W D, SPINO J, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 513: 310-345.
- [11] 刘东昆,王庆宇,张田,等. *物理学报*, 2024, 73(6): 066102.
- [12] 郑新海,魏国良,尹邦跃. *原子能科学技术*. DOI: 10.7538/yzk.2018.youxian.0122.
- [13] PERES V, FAVERGEON L, ANDRIEU M, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2012, 423(1-3): 93-101.
- [14] FORSBERG K, MASSIH A R. *Journal of Nuclear Materials*, 1985, 135(2-3): 140-148.
- [15] TURNBULL J A, WHITE R J, WISE C. *Vienna: International Atomic Energy Agency*, 1987.
- [16] 周毅,刘振海,肖忠,等. *稀有金属材料与工程*, 2025, 54(7): 1777-1784.
- [17] GASTON D, NEWMAN C, HANSEN G, et al. *Nuclear Engineering and Design*, 2009, 239(10): 1768-1778.
- [18] PERMANN C J, GASTON D R, ANDREWS S R, et al. *SoftwareX*, 2020, 11: 100430.
- [19] WILLIAMSON R L, HALES J D, NOVASCONE S R, et al. *Nuclear Technology*, 2021, 207(7): 954-980.
- [20] LASSMANN K. *Journal of Nuclear Materials*, 1992, 188: 295-302.
- [21] PIZZOCRI D, BARANI T, LUZZI L. *Journal of Nuclear Materials*, 2020, 532: 152042.
- [22] ZULLO G, PIZZOCRI D, LUZZI L. *Journal of Nuclear Materials*, 2023, 587: 154744.
- [23] ZULLO G, PIZZOCRI D, SCOLARO A, et al. *Journal of Nuclear Materials*, 2024, 601: 155305.
- [24] YAGNIK S K, MACHIELS A J, YANG R L. *Journal of Nuclear Materials*, 1999, 270(1-2): 65-73.
- [25] *OECD Nuclear Energy Agency*. IFPE/NFIR-1, clad creepdown, power history effect on fission product distribution: 6 PWR rods 40-64 MWd/kg in BR-3[DB/OL]. NEA-1758.
- [26] 尤葵,龚辛,李聪. *核技术*, 2021, 44(11): 110603. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.110603.
- [27] 王瑶,李金山,陈波,等. *稀有金属材料与工程*, 2024, 53(11): 3271-3280. DOI: 10.12442/j.issn.1002-185X.20230625.
- [28] 朱利安,袁伟超,王淑祥,等. *稀有金属材料与工程*, 2024, 53(10): 2805-2822. DOI: 10.12442/j.issn.1002-185X.20240037.
- [29] 魏雅璇,王鼎渠,李正操,等. *稀有金属材料与工程*, 2024, 53(6): 1601-1607. DOI: 10.12442/j.issn.1002-185X.20230178.
- [30] 任啟森,吴利翔,刘洋,等. *稀有金属材料与工程*, 2025, 54(12): 3123-3127. DOI: 10.12442/j.issn.1002-185X.20240518.

Investigation of Steady-State Operating Performance of Cr₂O₃-Doped UO₂-Zircaloy Nuclear Fuel

Yin Chunyu^{1,2}, Wang Yaofeng¹, Zhang Kun², He Liang², Liu Xinyue¹,
He Yanan¹, Wu Yingwei^{1*}, Zhang Jingl¹, Xiao Zhong^{2*}, Su Guanghui¹

(1. Shaanxi Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(2. National Key Laboratory of Nuclear Reactor Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610213, China)

Abstract: Cr₂O₃-doped UO₂ pellets can promote grain growth and may improve fission-gas retention. This study coupled the fuel-performance code BEEs with the grain-scale fission-gas code SCIANTIX. BEEs transfers local temperature, burnup, fission rate, and grain size to SCIANTIX, while fission gas release (FGR) and gas swelling are returned to the rod-scale calculation. For the BR-3 36i8 rod, the coupled model predicted an end-of-life FGR of 28.49%, 15.7% below the measured value of 33.80%, and a void volume of $5.890 \times 10^{-7} \text{ m}^3$, 26.8% below the measured value of $8.046 \times 10^{-7} \text{ m}^3$. Because only one rod and endpoint measurements were available, this comparison establishes neither statistical significance nor general predictive accuracy. Deterministic sensitivity calculations for grain sizes of 10–50 μm showed lower FGR and gap pressure but higher retained-gas swelling at larger grain sizes under the adopted model settings.

Key words: doped fuel; large grain; fission gas release; fuel performance

Corresponding author: Wu Yingwei, Ph. D., Professor, School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China, E-mail: wyw810@mail.xjtu.edu.cn; Xiao Zhong, Senior Engineer, National Key Laboratory of Nuclear Reactor Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610213, China E-mail: xz85903249@163.com.