JAEA-Data/Code 2021-007 DOI:10.11484/jaea-data-code-2021-007



燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の 燃料結晶粒内ガス移行モデル改良

Improvement of Intragranular Fission Gas Behavior Model for Fuel Performance Code FEMAXI-8

> 宇田川 豊 田崎 雄大 Yutaka UDAGAWA and Yudai TASAKI

安全研究・防災支援部門 安全研究センター 原子炉安全研究ディビジョン

Reactor Safety Research Division Nuclear Safety Research Center Sector of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness

July 2021

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。 本レポートの成果(データを含む)に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の 条件で利用してください。(<u>https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja</u>) なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト(<u>https://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課 〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地 4 電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency. This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en).

Even if the results of this report (include data) are not copyrighted, they must be used under the same terms and conditions as CC-BY.

For inquiries regarding this report, please contact Intellectual Resources Section,

Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,

Japan Atomic Energy Agency.

2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan

Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2021

燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の燃料結晶粒内ガス移行モデル改良

日本原子力研究開発機構 安全研究・防災支援部門 安全研究センター 原子炉安全研究ディビジョン 宇田川 豊、田崎 雄大

(2021年5月18日 受理)

FEMAXI-8 は、軽水炉燃料の通常運転時及び過渡条件下の挙動解析を目的として日本原子力 研究開発機構が開発・整備を進めてきた FEMAXI コードの最新バージョンとして、2019年3 月に公開された。本報告では、公開以降新たに整備を進めた、燃料結晶粒内核分裂生成物(FP) ガスバブルの多群/非平衡モデルについてまとめた。結晶粒内で様々なサイズを持って分布して いる FP ガスバブルを単一の大きさのガスバブルにより近似していた従来のモデルに対し、こ のモデルでは、バブルサイズに関する2群以上の群構造と非平衡な挙動の双方を表現すること が出来る。これによって、妥当なオーダーのガスバブル圧力算定が可能となるなど、主に過渡 的な挙動の再現性改善が見込めると共に、粒内 FP ガスバブル挙動についてより厳密な記述が 可能となり、FP 挙動モデリング全体としての高度化余地が拡大している。今回のモデル整備 では、まず、任意の群数や空間分割に対応する粒内 FP 挙動解析モジュールを開発した。次に、 FEMAXI-8 上で容易に運用可能な2群モデルとして扱うため、同モジュールと FEMAXI-8 間 のインタフェースを開発し、両者を接続した。これにより FEMAXI-8 から利用可能となった2 群モデルについては改めて検証解析を実施した。多群/非平衡モデル適用時にも一定の性能を確 保できるモデルパラメータを決定し、公開パッケージ向けに整備した。

Improvement of Intragranular Fission Gas Behavior Model for Fuel Performance Code FEMAXI-8

Yutaka UDAGAWA and Yudai TASAKI

Reactor Safety Research Division, Nuclear Safety Research Center, Sector of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness, Japan Atomic Energy Agency Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received May 18, 2021)

Japan Atomic Energy Agency (JAEA) has released FEMAXI-8 in 2019 as the latest version of the fuel performance code FEMAXI, which has been developed to analyze thermal and mechanical behaviors of a single fuel rod in mainly normal operation conditions and anticipated transient conditions. This report summarizes a newly developed model to analyze intragranular fission gas behaviors considering size distribution of gas bubbles and their dynamics. While the intragranular fission gas behavior models implemented in the previous FEMAXI versions have supported only treating single bubble size for a given fuel element, the new model supports multiple gas groups according to their size and treats their dynamic behaviors, making the code more versatile. The model was first implemented as a general module that takes arbitrary number of bubble groups and spatial mesh division for a given fuel grain system. An interface module to connect the model to FEMAXI-8 was then developed so that it works as a 2 bubble groups model, which is the minimum configuration of the multi-grouped model to be operated with FEMAXI-8 at the minimum calculation cost. FEMAXI-8 with the new intragranular model was subjected to a systematic validation calculation against 144 irradiation test cases and recommended values for model parameters were determined so that the code makes reasonable predictions in terms of fuel center temperature, fission gas release, etc. under steady-state and power ramp conditions.

Keywords: Fuel Performance Code, Light Water Reactor, LWR Fuel, Safety Evaluation, High Burnup, High Burnup Structure, UO₂, MOX, Fuel, PCMI, Fission Gas Release, FEM 目 次

1. 月	 新言			
2. 养	吉晶粒	内FPガスバブルの多群/非平衡モデルの開発	4	
2.1	し モデ	ル開発環境とFEMAXIバージョン	4	
2.2	2 結晶	粒内FPガスバブルの多群/非平衡モデル	4	
2.3	3 多群	/非平衡モデルのFEMAXI-8への結合と追加モデリング要素		
2.	3.1.	バブルの群数		
2.	3.2.	結晶粒の空間分割(球殻メッシュ)数		
2.	3.3.	バブル核形成モデル		
2.	3.4.	格子間原子濃度の扱い		
2.	3.5.	FPガス単原子の拡散係数		
2.	3.6.	バブルグループ間のバブル辺りガス原子数差		
2.	3.7.	バブル/原子の衝突による結合モデル		
2.	3.8.	再溶解モデル		
2.	3.9.	ガスバブルの拡散係数		
2.	3.10.	空孔収支を伴わないバブル(ソリッドバブル)の挙動		
2.	3.11.	中央メッシュで評価されたバブル径の全メッシュに対する適用		
2.	3.12.	ソリッドバブルの拡散係数補正		
2.	3.13.	粒成長に伴う結晶粒界へのFPガス掃き出しの考慮		
2.	3.14.	指向性を伴う拡散移行の扱い		
3. 柞	贠証解	析		
3.1	└検証	解析の対象照射試験ケース	15	
3.2	2 モデ	ルパラメータの決定(推奨パラメータセットの更新)	15	
3.5	3 検証	解析結果		
4. 养	4. 結言31			
参考	;文献 ·		32	
App	endix	モデルパラメータセット00029wnZuhGの構成ネームリスト	33	

Contents

1. Introduction	1
2. Development of Multi-group/dynamic Model for Intragranular Fission Gas Bub	obles4
2.1 Developer's Environment and Corresponding FEMAXI Version	4
2.2 Multi-group/dynamic Model for Intragranular Fission Gas Behavior	4
2.3 Model Connection to FEMAXI-8 and Related Code Modifications	10
2.3.1. Number of Bubble Group	10
2.3.2. Number of Mesh Division for Fuel Grain System	10
2.3.3. Bubble Nucleation Model	10
2.3.4. Treatment of Interstitials	10
2.3.5. Diffusion Coefficient of Fission Gas Atom	10
2.3.6. Number of Gas Atoms Belonging to Gas Bubbles	11
2.3.7. Coalescence of Gas Atoms and Gas Bubbles	11
2.3.8. Resolution of Gas Atoms from Gas Bubbles to Fuel Matrix	11
2.3.9. Diffusion Coefficient of Gas Bubbles	11
2.3.10. Solid Bubbles	11
2.3.11. Sharing Bubble State at Center Region of Fuel Grain	
2.3.12. Correction of Diffusion Rate of Solid Bubbles	12
2.3.13. Gas Migration to Grain Boundary Associated with Fuel Grain Growth	12
2.3.14. Biased Migration of Gas Bubbles to Grain Boundary	
3. Validation Analysis	
3.1 Validation Cases	15
3.2 Calculation Conditions Adopted: Recommended Parameters for FEMAXI-8	15
3.3 Results	
4. Summary	31
References	32
Appendix Recommended Parameters: 00029wnZuhG	33

1. 序言

日本原子力研究開発機構(以下、「原子力機構」という。)安全研究センターでは、原子炉の 通常運転時件及び過渡条件下に置かれた燃料棒の温度、応力、核分裂ガスの移行といった熱的、 力学的挙動の解析ツールとして FEMAXI コードを開発してきた^{1,2)}。2019 年 3 月に、同コー ドとして初めて体系的な検証を経たバージョンである FEMAXI-8 を一般に公開し^{2,3)}、これま でに原子力規制庁、研究機関、大学、燃料メーカー、電力会社等へ提供を行っている。

FEMAXIの様な燃料挙動解析コード(以下、「燃料コード」という。)の主要な構成要素として、核分裂生成物ガス(FPガス)の生成から燃料ペレット外への放出までの移行過程を追跡するモデル(以下、「FPガス移行モデル」という。)があり、コードが予測する燃料棒の熱的及び力学的挙動全体を決定づけている。Figure 1 に FEMAXIの FPガス移行モデルの全体像及びモデルが表現する現象/要素間のつながりを示す。なお同図はあくまで現在の FEMAXI における代表的なモデルのふるまいを一定程度代表する概念を図解するためのもので、具体的なモデル選定によっては、個々の要素について簡素化または無視、あるいは異なる方法で取り扱うこととなる点に注意が必要である。



Fig. 1 Phenomena treated in fission gas behavior models of FEMAXI-8

FP ガス1は最初、核分裂密度に比例する生成率をもって、単原子の状態で燃料結晶粒内(同 図左)に生成する。FP ガス原子は粒内に形成した FP ガスバブルと相互作用しつつも、拡散 (熱拡散、照射誘起拡散)により、濃度勾配に応じた速度で結晶粒の境界(粒界)に向け移行 する。ここに相互作用とは燃料結晶粒内マトリクス中に分布する FP ガスバブルによるガス原 子のトラップや、核分裂片によるガスバブルからのガス原子の(マトリクス中への)はじき出 し(再溶解)のことで、実効的な移行速度に影響する。また過渡時の挙動を再現するためのモ

¹ Xe 及び Kr。FEMAXIの移行モデルでは移行上同じ性質を持つものとして取り扱う。

デリング要素として、温度勾配に比例し、バブル自身が指向性を伴って粒界へ移行する過程(図 中"Biased migration")を取り入れている。粒内から粒界(同図中央)に移行した FP ガスは粒 界面上のバブル(フェースバブル)に取り込まれる。空孔の吸収、放出により成長、連結、伸 長したフェースバブルは、徐々に粒界の辺上のバブル(エッジバブル)へ連結して行き、また エッジバブルの成長が進むとその一部は燃料棒内自由体積に連結して行く。自由体積への連結 とは即ち燃料ペレット外への FP ガス放出(FGR)に相当するので、解析上はこの時点で FGR というイベントが発生することになる。比較的低い温度の下で燃焼が進んだ領域では、高燃焼 度組織(HBS)の形成が進み、粒内から移行する FP ガスの一部はこの HBS 領域(同図右)内 ガスバブル(リムポア)に分配される。バブル成長に伴い一部がやはり自由体積に連結し、FGR に寄与する。

上記の内、近年のコード整備においては、FGR 評価への影響が大きい粒界モデル、及び、特 に高燃焼度燃料のスウェリング挙動評価への影響が大きい HBS モデルの開発を優先的に進め てきた所である^{2:4)}。一方粒内 FP 挙動モデルについては、FEMAXI-7 から基本的な枠組みの 変更を伴うモデル開発は進んでいなかった。基本的なモデルの枠組みとは、結晶粒内で実際に は様々なサイズをもって分布しているガスバブルを、単一のサイズをもったガスバブルで代表 させて取り扱うこと、及び、バブル状態の時間発展については陽に扱わない(平衡モデル)か、 非平衡モデルでも数値安定性の悪化を回避するため極めて近似的な時間積分の実装になってい ること、を指す。

粒界や HBS バブルに比べて粒内バブルは一般にサイズが小さく、温度や照射場に応じた平 衡に達するまでの時間が短いことから、平衡モデルで扱うことが妥当と考えられる条件範囲は 相対的に大きい。また、現象を記述する上バブルサイズの分布を扱うモデルの枠組みがより厳 密であるとしても、バブルサイズの分布を陽に扱えば拡散係数等各群バブルの特性をそれぞれ 決定する必要が生じるため、モデルパラメータ設定上の自由度が増え、近似度合いの大きいモ デルとは別の形で経験要素を追加、導入することにもなる。即ち、バブルサイズ分布の取り扱 いの精緻化が、直ちにモデル全体の性能や外挿性向上をもたらすものではない。

一方、反応度事故に代表される速い過渡条件下の燃料挙動を解析する上では、平衡モデルや これに準じた時間発展の扱いでは明らかに現象と乖離する。また、軽水炉の通常運転条件範囲 に相当する照射条件に関しても、照射後の燃料ペレット中にはµmオーダーに近いサイズの粒 内バブル群が観察されるケースも存在するところ、単一バブルサイズのモデルによってこれを 取り扱おうとした場合、他の制約を受け入れる必要が生じる。例えば、文献2のモデルセット 適用時には、粒内バブルについては常に核分裂片による FP ガス原子のはじき出しの効果が優 勢で、燃焼が進行してもバブルサイズはナノオーダーから実質的に増大せず、これが単一群モ デルで非平衡な扱いを試みた際の典型的な挙動となる。FEMAXIでは多くのコードと同様、バ ブルサイズの増大によりはじき出しの効率が低下する性質のモデルを従来備えており ¹⁾、照射 開始時点あるいはバブルの析出開始ではじき出しの寄与が十分小さくなる程度にバブルサイズ を大きく取れば、観察されているようなサイズの大きい(µm オーダー)バブルを計算上は維 持できる。しかしこれでは非平衡モデルで扱おうとする現象、過程自体を省略していることに 他ならず、平衡モデルでの解析と大差なくなる。また、バブル挙動の時定数は、ナノオーダー サイズでは極めて短く、従ってナノオーダーサイズのバブルのみ存在する系は計算上非平衡を 扱ったとしても瞬時に平衡に達してしまう。結局、粒内 FP 挙動モデルが非平衡モデルとして 機能するためには、バブルサイズについて多群での扱いも同時に導入する必要があることとな る。

上記を踏まえ、継続的な燃料挙動モデル高度化の一環として、特に、通常運転条件から過渡 的な条件までをシームレス且つ厳密に取り扱い可能な FP 移行モデルの整備を念頭に、燃料結 晶粒内ガスバブルの挙動を対象として、多群/非平衡モデルを整備した。このモデルにより、バ ブルサイズに関する2群以上の群構造と非平衡な挙動の双方を表現することが出来るようにな り、現象記述上の自由度が向上している。今回の整備では、まず任意の群数に対応するモジュ ールを開発した上で、FEMAXI上で容易に運用可能な2群モデルとして同モジュール/FEMAXI 間のインタフェースを設け接続し、この2群モデルについては改めて検証解析を実施して、一 定の性能が確認されたモデルパラメータを決定した。

2. 結晶粒内 FP ガスバブルの多群/非平衡モデルの開発

2.1 モデル開発環境と FEMAXI バージョン

本報告に述べるモデルの開発及び次章に示す検証解析は全て Linux (Ubuntu 18.04LTS) と gfortran-4.8 の環境で実施した。当該モデルの開発及び検証完了時点での FEMAXI バージョ ンは 8.1.162r であり、このバージョン以降でサポートされる。

2.2 結晶粒内 FP ガスバブルの多群/非平衡モデル

開発した多群/非平衡モデルは、基本的に Griesmeyer らの提案によるモデル概念、定式化 ⁵⁾ を採用し、一部修正、拡張を加えたものである。Khvostov らが開発、改良を続けている FALCON コードの FP ガス移行モデルでも、同様の定式化が採用されている ⁶⁾。このタイプのモデルで は、あるガスバブルに属するガス原子数は変数にとらず、代わりに、複数のグループのバブル が存在するものとし、各グループに対応するガス原子数を固定値として予め設定する。例えば グループ1に属するガス原子数は1であり、即ちグループ1のガスバブルとは単原子状態で存 在するガス原子に相当する。グループ2以降に対応するガスバブルに属するガス原子数の数は 2以上で、グループが上がる毎にガス原子数の数が大きくなる。このように複数のグループを 設ける(多群)ことでバブルサイズ分布の表現に対応しつつ、ガスバブルが実空間に占める体 積やバブル密度については変数とし、常微分方程式(ODE)ソルバーにより時間発展を扱う。 モデリングの詳細は異なるものの、この様な枠組みの下で対比を試みると、FEMAXI-7以前よ りコードでサポートされていた粒内ガスバブルモデルとは、総グループ数が2、つまりグルー プ1の単原子ガスと、グループ2のある大きさを持ったガスバブルの構成のみサポートするモ デルに相当するものであったと言える。

同モデルでは、下記の定義を持つバブル数密度BとバブルモーメントMの二種類の ODE 変数 が骨格となっている。以降の記述では、特に注釈の無い限り、全ての変数は燃料ペレット結晶 粒を同心球状の一次元体系でモデル化した内の、あるメッシュ(球殻)を代表する量である。

$$B_k(t) = \sum_N \int_0^\infty B_N(r, t) \mathrm{d}r \tag{1}$$

$$M_k(t) = \sum_N \int_0^\infty r B_N(r, t) \mathrm{d}r$$
⁽²⁾

ここにtは時間、Nはあるバブルに属するガス原子の数、rはガスバブル半径である。モーメント とはこのように、半径と数密度の積として定義される。実際に ODE 変数として扱われるのは 右辺の積分によりバブル半径や個々のバブルのガス原子数が一旦消えた形の左辺値である。左 辺において、kが、上述のバブルのグループを表す整数となる。あるグループに属するバブルの 実効的、平均的な半径は、

$$r_k = M_k / B_k \tag{3}$$

によって決定する。

バブル数密度BとバブルモーメントMは次式により更新する。

$$\frac{\mathrm{d}B_k}{\mathrm{d}t} = \sum_j \{G_{kj}\} - \sum_j L_{kj} \tag{4}$$

$$\frac{\mathrm{d}M_k}{\mathrm{d}t} = \sum_j Gm_{kj} - r_k \sum_j L_{kj} + \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} \Big|_{r_k} B_k \tag{5}$$

$$G_{kj} = \frac{G_{N_{kj}} + G_{C_{kj}} + G_{R_{kj}} + P_{GA}}{G_{N_{kj}} + G_{C_{kj}} + G_{R_{kj}}} \qquad k = 1, j = 1$$
(6)

$$Gm_{kj} = \frac{Gm_{N_{kj}} + Gm_{C_{kj}} + Gm_{R_{kj}} + r_1 P_{GA} \quad k = 1, j = 1}{Gm_{N_{kj}} + Gm_{C_{kj}} + Gm_{R_{kj}}} \qquad (7)$$

$$L_{kj} = L_{RM_{kj}} + L_{BM_{kj}} \tag{8}$$

Gはバブルの核形成(添え字 N)、バブル同士の衝突による結合(添え字 C)、核分裂片とバブルの相互作用によるバブル中ガス原子のマトリクスへの再溶解(添え字 R)、核分裂によるガス原子生成(P_{GA})等の過程による増減、Lはバブルのランダムな拡散及び指向性を持った拡散移行により他のメッシュまたは粒界へ移行して、当該メッシュから失われることによる減少分を代表する項である。jもkと同様バブルのグループを指示する整数で、kjの様な表記は両グループのバブル間の反応に関する項であることを示している。 r_{kj} は何らかの反応により、直前にjグループで合ったバブルがkグループに加わった際にこの大きさの半径をもってモーメントに寄与したとみなす量で、次式で近似される。

$$r_{kj} = N_k^{1/3} \left(r_j / N_j^{1/3} \right) \tag{9}$$

Nはあるグループに属するガス原子の数で、次式により定める。sはパラメータで、sよりも大き なグループにおいては、パラメータmが適用されることにより、グループ間のNの違いは1よ りも大きくなる。群構造の表現精度と計算コストのバランスはここでのsとmの設定により概ね 決定する。

$$N_k = \begin{cases} k & k \leq s \\ mN_{k-1} & k > s \end{cases}$$
(10)

このように、グループ間のNにはギャップが生じるのが通常であるので、今、様々な反応により $N_k < N_g < N_{k+1}$ なる N_g のバブルが生じた場合には、これを直ちに両側のグループの寄与として振り分ける必要があり、振り分けに用いる係数 f_k 及び f_{k+1} は次の拘束条件により算定する。

$$f_k N_k + f_{k+1} N_{k+1} = N_g \tag{11}$$

$$f_k N_k^2 + f_{k+1} N_{k+1}^2 = N_g^2 \tag{12}$$

$$\frac{f_{k+1}}{f_k} = \frac{N_k}{N_{k+1}} \frac{N_g - N_k}{N_{k+1} - N_g} = \frac{1}{m} \frac{N_g - N_k}{N_{k+1} - N_g}$$
(13)

単原子ガスが結合してバブルを形成する核形成反応の寄与については

$$K_{11} = -E_{11}D_1B_1^2 \tag{14}$$

$$K_{11} = -2V_N B_1 \dot{F}$$
(15)

いずれかの式により算定する。 E_{11} と V_N はパラメータである。前者(均質モデル)は2個の原子が、一方後者(非均質モデル)についてはやはりパラメータである A_N 個の原子が同時に反応してバブルを形成するモデルである。Dは拡散係数、Fは核分裂率である。 $G_{N_{kj}}$ 及び $Gm_{N_{kj}}$ に寄与するのはこれら下限周辺のグループにおける反応のみとなる。

バブル同士の衝突による結合反応の寄与については、

$$K_{C_{kj}} = K_{B_{kj}} + K_{R_{kj}} \tag{16}$$

$$K_{R_{kj}} = 4\pi R_{kj} D_{kj} B_k B_j \tag{17}$$

$$K_{B_{kj}} = \pi R_{kj}^2 |v_{bias,k} - v_{bias,j}| B_k B_j \tag{18}$$

$$[\mathrm{d}B_k/\mathrm{d}t]_{K_C} = -K_{C_{kj}} \tag{19}$$

$$[dB_k/dt]_{K_c} = (f_k - 1)K_{C_{kj}}$$
(20)

$$[dB_{k+1}/dt]_{K_C} = f_{k+1}K_{C_{kj}}$$
(21)

$$[\mathrm{d}M_j/\mathrm{d}t]_{K_C} = -r_j K_{C_{kj}} \tag{22}$$

$$[dM_k/dt]_{K_c} = (r_{kj}f_k - r_k)K_{C_{kj}}$$
(23)

$$[dM_{k+1}/dt]_{K_{C}} = r_{k+1j}f_{k+1}K_{C_{kj}}$$
(24)

$$R_{kj} = r_k + r_j \tag{25}$$

$$r_q = (r_k^3 + r_i^2)^{1/3} \tag{26}$$

により算定する。ここで $j \leq k$ である。結合により半径 r_g のバブルが形成すると仮定している。 $G_{C_{kj}}$ (グループjのバブルが関与した結合反応の結果kに生じた密度増減)には、上式の、 $[dB_k/dt]_{K_c}$ 、 $[dB_k/dt]_{K_c}$ 、及び、k-1とjの反応に対応するところの、 $[dB_{k+1}/dt]_{K_c}$ が足しこまれ る。 $Gm_c \geq dM/dt$ との対応も同様である。指向性を伴う拡散移行 (Biased migration) ⁵⁾の項 $K_{B_{kj}}$ について、拡散速度の算定は次式による。

$$v_{bias,k} = D_{BM,k} \frac{4\pi r^3}{3\Omega} (Q^*/kT^2)\beta\nabla T$$
(27)

Ωは原子体積、kはボルツマン係数、Tは温度、は ∇T 温度勾配、 $\beta = 1.5$ である。 Q^* は輸送熱でパ ラメータである(ネームリスト NL_HFP_PARAM(1)で指定可能、デフォルト値 100 kcal/mol)。 但し原文献 5にて非平衡時に現れる寄与として扱われている $K_{B_{kj}}$ 項を算定に含めるか否かにつ いては、バブルと場の状態により判定する(後述、2.3.14)。 L_{kj} の算定においても同様である。 また $D_{BM,k}$ には、ランダム拡散とは独立にモデルを指定可能としている。

核分裂片による再溶解の寄与については、Nelson 型の定式化

$$K_R = -b_{nelson} \dot{\mathsf{F}} f_{Rnel} N_k B_k \tag{28}$$

$$[dB_k/dt]_{R_k} = K_R \tag{29}$$

$$[dB_{k-1}/dt]_{R_k} = f_{k-1}K_R \tag{30}$$

$$[dB_k/dt]_{R_k} = (f_k - 1)K_R$$
(31)

$$[dM_{l_1} / dt]_{\mathcal{D}} = r_{l_1} / f_{l_2} / K_{\mathcal{D}}$$
(32)

$$\begin{bmatrix} dM_{k-1} / dt \end{bmatrix}_{R_{k}} = r_{k-1R} r_{k-1} R_{k}$$
(32)
$$\begin{bmatrix} dM_{k} / dt \end{bmatrix} = (r_{k} f_{k-1} r_{k}) K$$
(32)

$$[dM_k/dt]_{R_k} = (r_{kk}f_k - r_k)K_R$$
(33)

$$f_{Rnel} = \begin{cases} 1 & d_{nelson} \ge r \\ [r_k^3 - (r_k - d_{nelson})^3]/r_k^3 & d_{nelson} \le r \end{cases}$$
(34)

$$d_{nelson} = 1.5 \times 10^{-7} (4\pi r_k^3/3) / (N_k a_{VDW})$$
(35)

または Turnbull 型の定式化

$$K_R = 2V_R F B_k \tag{36}$$

$$V_R = \pi (r_k + r_{track})^2 \,\mu_{FF} \tag{37}$$

$$[dB_1/dt]_{R_k} = (N_k - N_g)K_R$$
(38)

$$[\mathrm{d}B_j/\mathrm{d}t]_{R_k} = f_j K_R \tag{39}$$

$$[dB_{j+1}/dt]_{R_k} = f_{j+1}K_R \tag{40}$$

$$[\mathrm{d}B_k/\mathrm{d}t]_{R_k} = -K_R \tag{41}$$

$$[\mathrm{d}M_j/\mathrm{d}t]_{R_k} = r_{jk}f_jK_R \tag{42}$$

$$[dM_{j+1}/dt]_{R_k} = r_{j+1k} f_{j+1} K_R$$
(43)

$$[\mathrm{d}M_k/\mathrm{d}t]_{R_k} = -r_k K_R \tag{44}$$

$$N_{\rm g} = \left(r_{\rm g}/r_k\right)^3 N_k \tag{45}$$

$$r_{\rm g}/r_k = \left(\frac{N_{\rm v} - n_{vac}}{N_{\rm v}}\right)^{1/3} = \left(1 - \frac{n_{vac}}{N_{\rm v}}\right)^{1/3} = \left(1 - n_{vac}\frac{3}{4\pi r_k^3}\right)^{1/3} \tag{46}$$

のいずれかを選択し(後述)、適用する。 $b_{nelson} = 3.4 \times 10^{-17} \text{ cm}^3 \text{s}^{-1}$ は再溶解率、 a_{VDW} はファン デルワールスの限界半径の逆数、 $r_{track} = 10$ Åは核分裂片トラックの半径、 $\mu_{FF} = 6 \, \mu \text{m}$ は核分裂 片トラックの飛程、 $n_{vac} = 200$ は核分裂片の衝突によりバブルから失われる空孔の数、 $N_g \ge r_g$ は ここでもそれぞれ反応により生じたバブルのそれぞれガス原子数と半径に対応する。上式の dB/dt、dM/dtが $G_R \ge Gm_B$ にそれぞれ足しこまれる。

拡散によるメッシュの出入り L_{kj} の内、 $L_{RM_{kj}}$ について、原文献 ⁵⁾では近似式

$$L_{1\rm gb} = S_{1\rm gb}^2 B_1 D_1 \tag{47}$$

$$S_{1\text{gb}}^2 = \frac{6}{d_g} (\sum_k S_{1k}^2)^{1/2}$$
(48)

$$S_{1k}^2 = K_{1k} / B_1 D_1 \tag{49}$$

が充てられているが、FEMAXIではバブル拡散係数により決定される差分項を結晶粒径の球殻 メッシュ毎に評価してバブル密度やモーメントの増減項として ODE に組み入れることで、数 値的にこの項の L_{kj} への寄与を求めている。一方 $L_{BM_{kj}}$ については、粒内の平均的なバブル移行 速度 v_{avg} の下で(メッシュ間の行き来では無く)直接的に粒界への移行 f_{gb} が生じるとする次式 の近似的扱いをそのまま採用している。

$$f_{\rm gb} = 1 - v_{avg}^2 \left(3d_{\rm g} - v_{avg} \right) / 2d_{\rm g}^3 \tag{50}$$

$$v_{avg} = \sum_{k} B_k N_k \, v_{bias,k} / \sum_{i} B_k N_k \tag{51}$$

ここにdgは結晶粒の直径である。

バブル半径の増減に対する空孔収支の寄与は次式により算定される。

$$\frac{\mathrm{d}r_k}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{r_k} \left(\phi_{\mathrm{v}} - \phi_{\mathrm{i}} - \phi_{\mathrm{v}}^k + \phi_{\mathrm{i}}^k \right) \tag{52}$$

$$\phi_{\mathbf{v},\mathbf{i}} = D_{\mathbf{v},\mathbf{i}}C_{\mathbf{v},\mathbf{i}} \tag{53}$$

$$\phi_{\rm v,i}^k = D_{\rm v,i} C_{\rm vk,ik} \tag{54}$$

$$\phi_{\mathbf{v},\mathbf{i}}^{\kappa} = D_{\mathbf{v},\mathbf{i}}C_{\mathbf{v}\mathbf{k},\mathbf{i}\mathbf{k}}$$
(54)
$$\Delta p^{k} = p_{g}^{k} - 2\gamma/r_{k} - p_{ex}$$
(55)

$$dC_{v,i}/dt = P_{tot}^{ve,ie} + P - P_{sv,si} - P_r$$
(56)

$$P_{\text{tot}}^{\text{ve,ie}} = \lambda_{\text{v,i}}^{\text{d}} C_{\text{vu,iu}} + \lambda_{\text{v,i}}^{\text{GB}} C_{\text{vu,iu}} + \sum_{k} \lambda_{\text{v,i}}^{k} C_{\text{vk,ik}} + \eta C_{\text{vu}} C_{\text{iu}}$$
(57)

$$C_{\rm vk} = C_{\rm vu} \exp(-\Delta p^k \Omega / kT) \tag{58}$$

$$C_{\rm ik} = C_{\rm iu} \exp(\Delta p^k \Omega / kT) \tag{59}$$

$$P = Y_{\rm iv} \dot{\mathsf{F}} \,\Omega \tag{60}$$

$$P_{\rm si,sv} = \lambda_{\rm i,v} C_{\rm i,v} \tag{61}$$

$$P_{\rm r} = \eta C_{\rm v} C_{\rm i} \tag{62}$$

$$\eta = 10^{16} D_{\rm v} D_{\rm i} \tag{63}$$

$$\lambda_{i,v}^{d} = D_{i,v} Z_{i,v} \rho_{d,1} \tag{64}$$

$$Z_{i,v} = 1.02, 1.0$$
 (65)

$$\lambda_{i,v}^{C} = \sum_{k} 4\pi B_{av,k} R_{avg,k} D_{i,v}$$
(66)

$$\lambda_{i,v}^{GB} = \left(\frac{6}{d_g/2}\right) \sqrt{\left(D_{i,v}(\lambda_{i,v}^{d} + \lambda_{i,v}^{C})\right)}$$
(67)

$$\lambda_{i,v} = \lambda_{i,v}^{d} + \lambda_{i,v}^{C} + \lambda_{i,v}^{GB}$$
(68)

ここに¢はバブル表面での欠陥のフラックス、D_{iv}は欠陥の拡散係数(ネームリスト NL_HFP_PARAM(6)とNL_HFP_PARAM(7)が、それぞれvとiに対するスケーリングファクタ として機能する)、Cは欠陥濃度、vは空孔、iは格子間原子、 p_g は気体の状態方程式に従い決定 されるガスバブル圧力、 $\gamma = 1527 - 0.3457T \operatorname{erg cm}^{-2}$ は表面エネルギ、 p_{ex} はマトリクスの静水 圧、 λ は欠陥の反応率定数、 η は再結合率係数、 $Y_{iv} = 10^4 \text{ fissions}^{-1}$ はフレンケル対の収率、 $\rho_{d,1} =$ 10^8 cm^{-2} は転位密度である。なお Khvostov らは λ_{iv}^d の算定について温度依存性を伴うより複雑 な式

$$\lambda_{i,v}^{d} = D_{i,v} Z_{i,v} 2\pi \rho_{d,2} / \log\left(\frac{r_{dis}}{r_{dis,0}}\right)$$
(69)

$$r_{dis} = 1/\sqrt{(\pi\rho_d)} \tag{70}$$

$$r_{dis,0} = 1/\sqrt{(\pi 10^{13})} \tag{71}$$

 $\rho_{d,2} = \max\left(10^{12}, 10^4 \exp\left(-2.07 \times 10^{-3}T + 21.825\right)\right) \tag{72}$

を用いているが ⁶、これを適用したところ ODE の収束が悪化し、計算コストに及ぼす影響が 大きかったことから、オプションとして選択可能とはしているものの、次章に述べる推奨モデ ル及びパラメータの決定においては採用していない。

*Cvu、Ciu*はそれぞれ熱平衡状態の空孔、格子間原子密度(サイト当たりの欠陥数)で、状態量として温度の情報を入力に取る以下の非線形方程式を解くことで更新される⁵⁾。

$$\frac{K_{\rm Fu}}{K_{\rm s}}(C_{\rm vo})^4 + (C_{\rm vo}^2)^3 \pm \frac{1}{2} \times (C_{\rm vo})^2 - \frac{1}{2}K_{\rm Fo}(C_{\rm vo}) - K_{\rm s} = 0$$
(73)

$$C_{\rm vu}C_{\rm vo}^2 = \exp(-\Delta G_{\rm s}/kT) \equiv K_{\rm s} \tag{74}$$

$$C_{\rm vo}C_{\rm io} = \exp(-\Delta G_{\rm Fo}/kT) \equiv K_{\rm Fo}$$
⁽⁷⁵⁾

$$C_{\rm vu}C_{\rm iu} = \exp(-\Delta G_{\rm Fu}/kT) \equiv K_{\rm Fu} \tag{76}$$

ここに ΔG_{s} はショットキー欠陥形成エネルギ、 ΔG_{Fo} 、 ΔG_{Fu} はフレンケル欠陥形成エネルギである。

2.3 多群/非平衡モデルの FEMAXI-8 への結合と追加モデリング要素

前節に述べた定式化が多群/非平衡モデルの処理の骨格を成しており、新たに開発、パッケージに追加したモジュール単体のコーディングとしては、これらの定式化の下、必要に応じ先行研究と同等の運用が出来る様、即ちバブル群数や粒内のメッシュ構成について任意の設定が出来る様、一般的な記述を採用している。一方、FEMAXI-8へ結合して用いる上では、多群モデルとして最小構成である2群で運用するなど、以下に述べるパラメータ設定、モデリング要素の追加を施している。

なお、パラメータ設定については、次節に述べる検証解析で指定した多群/非平衡モデル適用 オプション GBFIS=40 に対応する。指定内容自体は、ソースファイルの改変が必要になるもの の、モジュール pd_ode_interface の setup_rate_equations_1 上で容易に変更、切り替えが可 能である。

2.3.1. バブルの群数

本モデルの計算コストは、単一群バブルの過程に基づいて定式化されている従来の FEMAXI 粒内バブルモデルに比べて、一般に、大きくなる。特に先行研究 5.60で採用されている、バブル 群数が 10 を超える様な構成では、粒内 FP 移行計算のコストが FEMAXI-8 の計算コスト全体 に占める割合が極めて大きくなり、多くの解析条件でボトルネックとなることが想定されるこ とから、当面の設定として、多群バブルの構成としては最も小さい群数=2 を採用した。

2.3.2. 結晶粒の空間分割(球殻メッシュ)数

従来の粒内バブルモデルと同様に結晶粒を球体として近似し、球殻メッシュから成る一次元 体系でモデル化しており、等体積メッシュで系を分割している。メッシュ数として2を採用し た。これは FEMAXI-8 の最初の検証解析で従来モデルに適用した分割数に等しい。

2.3.3. バブル核形成モデル

非均質モデルを適用し、原文献 5° を参考に $V_{\rm N} = 1.1 \times 10^{-17}$ 、 $A_{\rm N} = 18$ としている。

2.3.4. 格子間原子濃度の扱い

原文献 ^{5,6)}ではいずれも ODE 変数として扱われている $dC_{v,i}/dt$ の内、格子間原子濃度 C_i については $dC_i/dt = 0$ 、即ち平衡状態として扱っている。これは同項の時定数が他の項に比べて桁違いに短く、ODE の時間刻み従って計算コストに及ぼす影響が大きい一方、燃料挙動解析で興味の対象となる FP ガス放出率等の予測値に関して、確認した範囲で非平衡の扱い有無による有意な影響は見られなかったことによる。

2.3.5. FP ガス単原子の拡散係数

FEMAXI-8に対する指定(ネームリスト IDCNST)がそのまま適用される。

2.3.6. バブルグループ間のバブル辺りガス原子数差

パラメータ*m*=250 を設定している。またグループ1のバブルに属する原子数は2である。従って、グループ2のバブルには常時500のガス原子が含まれる。

2.3.7. バブル/原子の衝突による結合モデル

結合反応率 $K_{R_{kj}}$ の算定に表れる D_{kj} には、衝突を想定する2体(バブルあるいは原子)それぞれの拡散係数の和を充てる。また、単原子が反応に関与する場合は、反応率を0.1倍する。この項目は、原文献間でも設定が大きく異なり 5,6 、粒界への移行率や粒内ポロシティの発展にも影響が大きいことから、主要なパラメータ調整要素となっている。

2.3.8. 再溶解モデル

Turnbull 型の定式化を適用している。

2.3.9. ガスバブルの拡散係数

原文献の定常状態解析向けモデル設定を参考とし⁵、ランダム拡散項で参照するバブル拡散 係数には、Buescher、Meyerのデータに基づく次のモデルを充てる⁷⁾。

$$D_{\rm k} = \frac{1.19 \times 10^{-22}}{r_k^3} \exp\left(-\frac{100}{RT}\right) \tag{77}$$

また前述の通り、指向性を伴う拡散移行に対しては、やはり原文献のモデル設定を参考として、 別個に Maiya らの提案によるバブル拡散係数を指定する⁸⁾。

$$D_{\rm BM,k} = \frac{3\Omega^{4/3}}{2\pi r_k^4} 5.4 \times 10^5 \exp\left(-\frac{108}{RT}\right)$$
(78)

拡散係数、バブル半径、気体定数、温度の単位はそれぞれ cm²/s、cm、kcal/K/mol、K である。 Maiya らの式は、ランダム拡散項に充てたものに比べて約2オーダー以上大きな拡散係数を与 え、表面拡散機構の寄与を仮定しなければ説明できないとされている。なお、指向性を伴う拡 散移行に適用する拡散係数については、ネームリスト NL_HFP_IP(1)より独立に指定、拡張可 能とした。また、ネームリスト NL_HFP_PARAM(5)と NL_HFP_PARAM(8)が、それぞれ*D*_kと *D*_{BM,k}のスケーリングファクタとして機能する。

2.3.10. 空孔収支を伴わないバブル (ソリッドバブル) の挙動

原文献 ®で導入されている概念である。ここでの例としてはグループ1(ガス原子数 2)のナ ノバブル、あるいはガス原子のクラスタと呼ぶべき非常に小さいグループについては、空孔を 伴わないか、伴ったとしても気体の状態方程式を適用して圧力を算定し、挙動評価に適用する アプローチは意味を為さないと考えられることから、拡散係数が異なる点を除き単原子ガスと 同じ扱いをする。この場合、核形成や結合反応、拡散反応は取り扱うが、空孔収支によるバブ ル径の増減や再溶解は扱わない。ODE 変数として扱われるバブル状態量は、バブル数密度Bの みとなる。グループの小さいバブルに適用されるべき扱いであり、ここでは、グループ1(ガ ス原子数 2)にのみ適用している。 2.3.11. 中央メッシュで評価されたバブル径の全メッシュに対する適用

整備した多群/非平衡モデルにおいて、バブル数密度BとバブルモーメントMはODE変数で、 厳密な保存が維持される必要がある一方、バブル径r_kはこれら保存量の変化率に影響するもの の、ODE変数ではないので、適当な近似を導入しても計算は成立する。バブル径が関与する計

算コストは比較的大きく、このコストを削減するため、 $r_k や \frac{dr_k}{dt}$ の評価は中央メッシュ(球殻メ ッシュ系の中心付近、ここでは原点から1番目のメッシュ)でのみ行い、この値を他の全ての メッシュに適用している。

2.3.12. ソリッドバブルの拡散係数補正

単原子とソリッドバブルについては、燃焼進行に伴う燃料組織変態の影響として、拡散係数 補正f_{dif,pol}が適用される⁴。

2.3.13. 粒成長に伴う結晶粒界への FP ガス掃き出しの考慮

ODE 計算の時間積分に適用される時間刻みは BDF スキームにより必要に応じて自動的に細 分化されるが⁹、ODE の呼び出し元である多群/非平衡モデルの制御モジュールは、FEMAXI-8 から受け渡されたある有限の時間刻区間 δt についてこの時間積分を実行する。時間区間 δt に 生じる燃料ペレット結晶粒の成長割合(時間区間の前後での体積増分割合) δR_{vGG} は、ネームリ スト IGRAIN オプションの選択に応じて FEMAXI-8 側で適宜算定され、やはり多群/非平衡モ デルに受け渡される。多群/非平衡モデルでは、時間区間の起点において粒内に存在した単原子 ガス及びガスバブルの内、 δR_{vGG} に等しい割合については、時間区間の終点までに粒内から掃き 出される(粒界へ移行する)様、各 ODE 変数の増分項を補正する。

2.3.14. 指向性を伴う拡散移行の扱い

ガスバブルがある偏りを見せて析出した状態は、ランプ照射後に観察されるケースがあり、 通常のランダムな拡散過程とは別の移行現象として区別して扱うコードが複数存在する。原文 献 ⁵では解析対象ケースが定常的な照射か過渡的な照射かにより適用モデルが明確に区別され、 指向性を伴う拡散移行は後者にのみ適用されている。*v_{bias,k}による*粒界へのガス移行速度はラ ンダム拡散による移行に比べて大きく、定常的な照射条件に同様の概念、モデルをそのまま適 用すると、ガス放出率を過大評価することとなる^{2,3)}。そこで過渡的な条件を判定してモデルの 適用を解析中で逐次決定する必要があり、従来粒内バブルについては実質的に平衡に近い挙動 しか再現することが出来なかったため、簡易的に、粒内ポロシティの急速な増大を過渡的な条

件の出現と捉えて判定に利用してきた 2,3。一方多群/非平衡モデルでは、主に $\frac{dr_k}{dt}$ の項を介して

ガスバブルの過渡的な状態遷移が追跡されており、過渡状態の検出をより自然な形で表現する ことができる。高い濃度で FP ガスが粒内に存在している状態から燃料温度が急速に上昇した 場合、ガス原子やガスバブルの結合によりサイズの大きいバブル(ここではグループ2のバブ ル)密度が増大するが、定常的な照射条件下での形成に比べると、バブル辺りガス原子数の急激な増大に対してバブルによる空孔吸収とこれに伴う圧力緩和に遅れが生じるため、バブルの 圧力は高くなる傾向となる。そこで、多群/非平衡モデル適用時の過渡状態判定基準として、バ ブル圧力pgの粒内平均値がしきい圧力(ネームリスト NL_HFP_PARAM(2)で指定可能、デフ オルト値 100 MPa)を上回ること、燃料ペレット内の温度勾配が 100 K/cm を上回ること、場 の核分裂率がしきい値(ネームリスト NL_HFP_PARAM(4)で指定可能、デフォルト値 0.0 n/cm³/s)を上回ること、と定めている。

3. 検証解析

第2章に整理した多群/非平衡モデルを適用した上で、従来モデル適用時と同等の予測性能が 得られるようパラメータの調整、決定を行い、FEMAXI-8公開時の総合的な性能評価で用いた 144の照射試験ケース²⁾を対象に、再度検証解析を実施した。

Table 1	検証解析ケース	マの条件範囲
---------	---------	--------

		Fuel type ^c	
	UO_2	MOX	Gd-doped
Burnup [GWd/tU]	3-99	15 - 72	25 - 95
Max. LHR ^a [W/cm]	146 - 585	201 - 469	174 - 392
Rod pressure ^b [MPa]	0.1 - 3.4	0.1 - 2.6	1.0-2.6
He ratio in rod filler gas^b	0.0 - 1.0	1.0	0.5 - 1.0
P/C diametral gap ^b [µm]	42-508	75-290	49-186

a: Rod-average linear heat rate that a rod experienced during its irradiation period

b: Initial condition

c: Cladding material is stress-relief annealed Zircaloy-4 or recrystallization annealed Zircaloy-2 in most cases

Table 2	検証解析のグル	ープ分けと	:着目する	う測定データ
---------	---------	-------	-------	--------

Validation-case group ID	Measurement data focused in validation
PCT/BOL	PCT ^a at the BOL
PCT/LowBU	PCT at low burnup < 5 GWd/tU
PCT/UO2, PCT/MOX, PCT/Gd	PCT of UO ₂ , MOX, and Gd-doped rods for a
	whole irradiation period
FGR/UO2/Base,	
FGR/MOX/Base,	FGR from UO ₂ , MOX, and Gd-doped rods
FGR/Gd/BASE	
FGR/UO2/Ramp,	$\mathrm{FGR}\ \mathrm{from}\ \mathrm{UO}_2\ \mathrm{and}\ \mathrm{MOX}\ \mathrm{rods}\ \mathrm{subjected}\ \mathrm{to}\ \mathrm{a}$
FGR/MOX/Ramp	power ramp
FreeVol	Rod free volume at the EOL
HoonStrain	Hoop strain increment in cladding tube
moopstram	induced by a power ramp

a: Pellet Center Temperature

3.1 検証解析の対象照射試験ケース

検証解析がカバーする照射条件範囲及び着目するパラメータによるグループ分けを Table1 及び Table 2 に示す^{2,3)}。同表において、PCT/BOL は照射開始直後の燃料中心温度、PCT/LowBU は低燃焼度(約5 GWd/tU まで)の燃料中心温度、PCT/UO2、PCT/MOX、PCT/Gd はそれぞ れ UO₂、MOX、Gd 燃料の照射期間に亘る燃料中心温度、FGR/UO2/Base、FGR/MOX/Base、 FGR/Gd/Base は同様に定常照射ケースの FP ガス放出率、FGR/UO2/Ramp、FGR/MOX/Ramp はそれぞれ UO₂、MOX 燃料ランプ照射ケースの FP ガス放出率、FreeVol は照射末期の燃料棒 内自由体積、HoopStrain は照射により生じた被覆管変形量について、それぞれ測定データが 取得されている照射試験ケースのグループで、対応するデータ項目について測定値と解析値の 比較により検証を行っている。各グループに属する照射試験ケースについてより詳細な情報は 文献 2 にて報告した。

3.2 モデルパラメータの決定(推奨パラメータセットの更新)

検証解析に用いた全ケース共通のモデルパラメータ(多群/非平衡モデル適用時の推奨パラメ ータセット)00029wnZuhGをAppendixに示す。パラメータ調整の方針はFEMAXI-8公開時 の検証²⁰と同様である。即ち、燃料挙動全体への影響が大きい燃料中心温度とFPガス放出率 の再現性を重視し、保守側への偏りについてはやや寛容に評価しつつ、simulation setによっ ては大きなばらつきを残しつつもベストエスティメートに相当するバランスを選定している。

検証解析を通じたモデル/パラメータの決定/調整は、概ね以下のステップを経ている。まず、 多群/非平衡モデル適用前で最近検証を行ったモデルセット 00022tb7oc⁴⁾から、粒内移行モデル のみを多群/非平衡モデル適用オプションGBFIS=40に変更した。この時点で、FGR/UO2/Ramp 等過渡条件下の FP ガス放出率について、測定値との乖離が 00022tb7oc から拡大する。これ が再び改善されるよう、前節に述べた NL_HFP_PARAM ネームリストを用いて、指向性を伴 う拡散移行モデル関連パラメータを中心に調整を行った。燃料中心温度等他の比較項目につい ては測定値からの系統的な乖離は認められなかったため、新たな調整は行っていない。

解析に採用した径方向メッシュ構成は、燃料ペレットについて力学計算メッシュ3分割、熱計算メッシュ9分割、被覆管金属層2分割(MESH=11)とした。熱計算メッシュ数が6~12の範囲では、現在検証解析で扱っている測定値との比較項目に及ぼすメッシュ分割数の影響は小さいことを確認している^{2,3)}。

検証解析に用いたネームリストパラメータの内、燃料仕様等に依存するためケース毎に指定 する必要のあるものについては前検証解析レポート²⁾と同様である。燃料ペレット、被覆管の 表面粗さについても、前検証解析レポートと同様に、検証データベース中の既知の値を参考と し、Appendix に挙げた一律の値を適用している。 3.3 検証解析結果

前節に示したモデル及びパラメータによる各ケース解析結果と測定値との比較結果を Fig. 2 から Fig. 14 に示す。各図には相対誤差±10%水準に相当する直線を併せて示す。

前検証解析時と同様 2.3、燃料中心温度については概ね相対誤差 10%以内の精度が得られて いる(Fig. 2から Fig. 7)。FGR(Fig. 8から Fig. 12)についても一致の度合いは同水準で、 燃料タイプ、照射条件による傾向にも変化は見られない。即ち、FGR/MOX/Ramp が全て過大 評価側である一方、FGR/UO2/Ramp や FGR/MOX/Base は過小評価側となり易く、これがパ ラメータ調整上の主な拘束条件となって、再現度改善を妨げている。また、やはり前検証解析 時と同様、FGR/MOX/Ramp を構成する照射試験ケースは全て SBR-MOX のもの、一方 FGR/MOX/Base は MIMAS-MOX が複数含まれることから、MOX 燃料間の非均質性の度合が 今後モデリングに取り込まれることで、再現度が改善される可能性は考えられる。燃料棒内自 由体積と被覆管変形量についても、特に後者で一部過大評価の大きいケースが含まれるなど、 前検証解析時から傾向は変わっていない。



Fig. 2 Comparison between calculation results of 'PCT/BOL' simulation sets and measurements



Fig. 3 Comparison between calculation results of 'PCT/LowBU' simulation sets and measurements up to 0.2 GWd/tU



Fig. 4 Comparison between calculation results of 'PCT/LowBU' simulation sets and measurements from 0.2 to 5.0 GWd/tU



Fig. 5 Comparison between calculation results of 'PCT/UO2' simulation sets and measurements



Fig. 6 Comparison between calculation results of 'PCT/MOX' simulation sets and measurements



Fig. 7 Comparison between calculation results of 'PCT/Gd' simulation sets and measurements



Fig. 8 Comparison between calculation results of 'FGR/UO2/Base' simulation sets and measurements



Fig. 9 Comparison between calculation results of 'FGR/MOX/Base' simulation sets and measurements



Fig. 10 Comparison between calculation results of 'FGR/Gd/Base' simulation sets and measurements



Fig. 11 Comparison between calculation results of 'FGR/UO2/Ramp' simulation sets and measurements



Fig. 12 Comparison between calculation results of 'FGR/MOX/Ramp' simulation sets and measurements



Fig. 13 Comparison between calculation results of 'FreeVol' simulation sets and measurements



Fig. 14 Comparison between calculation results of 'HoopStrain' simulation sets and measurements

FGR については上述の通りグループ間の相対的な傾向(過大評価と過小評価の関係)はあま り変化していない一方、FP ガスの照射期間に亘る粒内から粒界への移行、また自由体積への 移行は、全体に 00029wnZuhG が前検証解析時²⁰及び 00022tb7oc⁴よりも抑制される側のバラ ンスとなっている。例えば FGR/MOX/Base はやや過小評価寄りの傾向が強まり、FGR/Gd/Base は過大評価寄りの傾向が緩和している。高燃焼度まで照射後の燃料ペレットについて EPMA に より径方向 FP ガス分布が評価されている照射試験ケース ¹⁰について別途解析を行い、EPMA に基づき評価した相対分布と比較を行った(Fig. 15)ところ、やはり 00022tb7oc では FP ガ スの保持割合を過小評価傾向、00029wnZuhG では若干過大評価傾向にあることを示唆する結 果となった。ここで、同図の"EPMA"は各測定位置において検出された Xe カウントと Nd カウ ントの比(それぞれあらかじめバックグラウンドの効果を補正したもの)を算定し、絶対値に ついては解析結果と比較しやすいよう適宜スケーリングを行ったものである点に留意する必要 がある。更に、粗大化したバブルのサイズが大きくなるほどそこに保持されていた FP ガスは 検出前に検出面から自由体積へ移行しやすくなり、EPMA では検出され辛くなるため、解析結 果の内どのガス保持割合を直接比較すべきかを一意に定めることは難しい。そこでここでは、 いくつかのバブルの大きさ(同図'radius')を設け、単原子ガスの他、この大きさ以下バブルに 属する FP ガスの寄与までを考慮した場合の保持割合をそれぞれ評価し、プロットしている(同 図'Calc.: single atoms and bubbles with radius...')。この際、集計は粒内であるか粒界である かといったインベントリの種別に関係なく行っている。例えば粒界インベントリであっても、 径の小さいバブルに属する FP ガスであれば、寄与として含まれている。バブル径を大きく取 った系列の方が当然値が大きく、例えば青破線と橙色一点鎖線の差分は、半径が 0.01 µm より

大きく 1.0 µm より小さいバブルに属する FP ガスの寄与に相当する。一方、粒界に保持され る FP ガスバブルは計算上粗大化する割合が大きく、この寄与をバブルの大きさに拠らず集計 した同図'grain boundary'については、EPMA との比較は適切でなく、参考値である。以上の ように、EPMA 結果との厳密な比較は難しいが、当該高燃焼度条件について、燃料ペレット中 央部と周辺部で保持割合が大きく減じ、中間部で比較的高い保持割合となっている傾向を、解 析は定性的に再現している。



Fig. 15 Comparison between calculation results of fission gas fraction retained in fuel pellet and measurements. The measured retention fraction was evaluated from EPMA line-analysis result for a horizontal cross section of 77 GWd/tU UO₂ fuel pellet sample $AP5^{10}$.

次に、今回適用した多群/非平衡モデルにより、粒内ガスバブルが条件によっては空孔を取り 込んで成長し、バブル圧力の緩和が生じていることを確認できる解析結果の例として、検証解 析ケースより、FGR/UO2/Baseの内の一ケースである BR3_x_24i6²⁾を採り上げる。BR3_x_24i6 は照射 280 日目付近で線出力が最大 500W/cm 以上に急昇する試験である (Fig.16)。そのた め、燃料中心温度も商用軽水炉の通常運転時の水準を超えており (Fig.17)、粒内でも FP ガス バブルの成長が生じやすい条件にあると考えられ、従って多群/非平衡モデルの挙動把握に適し ている。燃料温度に関してモデルパラメータセット間で殆ど差は生じていない。



Fig.16 Histories of linear heat rate at the peak power node and average linear heat rate of the validation case $BR3_x_24i6^{2}$.



Fig.17 Histories of pellet center temperature at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2)}$.

粒内ガスバブルの圧力の履歴を Fig.18 に示す。単群モデルが適用されている同図(a)では、 時間発展の定式化としては非平衡な扱いが取り入れられているものの、1.1 節に述べたように、 ナノオーダー未満のバブル径から解析が始まり、ガス原子や空孔との結合によるバブル径増大 よりも再溶解項によるバブルからのガス原子のはじき出し、バブル径減少が支配的な状態が照 射終了まで続く挙動を反映し、バブル圧力は GPa オーダーで推移している。バブル径は照射期 間全体の最大値で見ても 3 nm 程度に達する程度である。解析上、この系では、サブミクロン オーダーのバブルは安定に存在できていないことになる。多群/非平衡モデルの出力の内、グル ープ1は剛にふるまうナノバブルであり、同図(a)に表れているに近い特性を有するバブル群の 挙動を表現している。剛なふるまいを強制しているので、圧力は算定されない。一方、同図(b) は、多群/非平衡モデルの出力の内、グループ2のバブルについて情報を出力した結果である。 このケースではバブル当たり 500 の FP ガス原子が含まれる仮定となっているが、空孔が取り 込まれることで圧力が緩和し、数百 MPa オーダーと一桁低い圧力で推移している。また、280 日付近で燃料ペレット中心部のバブル圧力に見られるピークは、当該ノードの線出力が 500 W/cm 超まで上昇したタイミングに一致しており、温度上昇に伴うバブル圧の上昇とその後の 緩和挙動、つまり FP ガスバブルの非平衡な挙動が定性的に模擬されていることが確認できる。



Fig. 18 Histories of intragranular gas bubble pressure calculated at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2}$. The variable 'ir' in the legends denotes the index of thermal calculation mesh for fuel pellet.

前述の通り、検証解析全体では、モデルパラメータセット 00029wnZuhG で粒界へのガス移 行が 00022tb7oc に比べ抑えられる傾向が見られたが、この解析ケース前半については燃料温 度が高いため、粒内ガスバブルの指向性を伴う拡散移行の効果で寧ろ 00029wnZuhG の FP ガ ス放出開始が早い。燃焼後期になると燃料温度が下がるため、ガス移行速度に係る上述の傾向 が徐々に表れ、照射終わり時点の FP ガス放出率では 00022tb7oc の方が高い結果となってい る (Fig.19)。



Fig.19 Histories of fission gas release at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{29}$.

FP ガスバブルの成長は定性的にはスウェリング増に繋がるため、本研究で行われた粒内 FP ガス挙動変化の影響が燃料のマクロな力学挙動に表れている可能性がある。両モデルにより算 定されたガスバブルスウェリングを Fig.20 にそれぞれ示す。燃焼を通して、00029wnZuhG で ガスバブルスウェリングが大きい。また約 280 日での出力急昇時には、両モデルパラメータセ ットが逆のスウェリング増減を示している。この挙動をより詳細に確認するために、粒内バブルと粒界バブルの寄与へ分解した結果を Fig.21 に示す。



Fig.20 Histories of pellet gaseous swelling at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2)}$.



Fig.21 Histories of volume ratio of gas bubbles at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2}$. (extracting power ramp term)

粒内に関しては、2つのモデルパラメータセット間でバブル体積割合の推移は似通っており、 出力急昇時のガスバブルスウェリングとしては00029wnZuhGが大きい。一方粒界に関しては、 出力急昇時に 00022tb7oc のバブル体積割合が大きく減少し、Fig.20 で見られたモデル間で相 反する挙動の原因となっている。00029wnZuhG については急昇直後の変化としては比較的小 さく、急昇後徐々にガスバブルの体積割合が増加している。Fig.20 で見られた 00029wnZuhG の急昇時ガスバブルスウェリング増加は主に粒内バブルの寄与によるものと考えられる。なお 急昇前後の変動は粒界バブルの方が大きい。また、両モデルパラメータセット間で固体スウェ リングは同一である。

ガスバブルスウェリングや熱膨張等寄与を総合したペレット外径変化の推移を Fig.22 に示 す。全体を通して、00029wnZuhG でペレット外径変化量が大きくなり、Fig.20 で確認された 傾向に合致している。出力急昇時、00022tb7oc ではガスバブル体積割合の低下により熱膨張が ある程度打ち消される形となっており、ペレット外径の増大が相対的に小さい。



Fig.22 Histories of pellet outer diameter at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2}$.



Fig.23 Histories of PCMI pressure at the peak power node of the validation case $BR3_x_24i6^{2}$. (extracting power ramp term)

上述の様なペレット外径変化を受けて生じる被覆管との PCMI の推移を Fig.23 に示す。モ デルパラメータセット 00022tb7oc と 00029wnZuhG では、被覆管クリープモデル(ネームリ スト名: CRPEQ)が異なるため、約 280 日目の出力急昇までに生じる被覆管クリープダウン 量(またはペレット・被覆管ギャップ)に違いが出る。そのため、モデルパラメータセット間の 違いについて、ペレット外形変化量と PCMI 圧力の大小は単純には対応しない。そこで同図で は、00022tb7oc の解析条件を一部変更(CRPEQ を 00029wnZuhG と同じ 7 番に設定)した 場合の解析結果も併せて示している。単純なモデル間の比較では PCMI 圧力は倍程度の違い、 ペレット外形変化量の違いの効果がより直接的に現れるよう CRPEQ を揃えて比較すると PCMI 圧力は 3 倍程度の違いとなった。00029wnZuhG では、被覆管のひずみが僅かながら弾 性域を越え、周方向塑性ひずみが 0.02%となった。

ここで例示した解析ケースは、前述の通り線出力が 500 W/cm に達する照射期間があり、燃料温度が非常に高い水準で推移するため、バブルの衝突/結合、拡散移行、空孔の吸収/放出等反応率が全体に大きくなり、ODE 時間積分時の時間刻み縮小、計算時間の増大が起こりやすい条件である。計算完了までに要する時間(CPU 時間)は 00022tb7oc から 00029wnZuhG へ約 50%増加した。00029wnZuhG では、多群モデルとしてはグループ数 2 と既に可能な限り構成を小さくした上で FEMAXI-8 と接続しており、多群/非平衡モデルを FEMAXI-8 の標準的なモデルとして開発/整備を進めていく場合、この程度の計算コスト増は避けられないものと見込まれる。

4. 結言

継続的な燃料挙動モデル高度化の一環として、燃料結晶粒内ガスバブルの挙動を対象に、多 群/非平衡モデルを新たに整備した。まず、任意のバブル群数や結晶粒の空間分割に対応可能な 柔軟なモジュールとして開発し、次に、このモジュールを燃料コードの要素モデルとしての運 用に適した条件設定の下で、FEMAXI-8 コードに接続した。その後、多群/非平衡モデルを適用 したモデルパラメータセットの再調整を経て、改めて検証解析を実施した。検証解析を通じて、 多群/非平衡モデルにより、粒内バブルの粗大化とこれに伴うバブル圧力の緩和、出力上昇時の 圧力状態と緩和等、非平衡挙動を定性的に模擬できていること、また、多群/非平衡モデルを適 用した新たな推奨パラメータセットについても、FEMAXI-8 公開時に実施した前回検証解析時 と同等の予測性能が得られることを確認した。

今回整備したモデルパラメータセットの時点で、多群モデルとしてはグループ数2と既に可 能な限り構成を小さくした上で FEMAXI-8 と接続している。この条件であっても、計算完了に 要する CPU 時間が 50%程度増加しうることが確認されており、燃料挙動解析コードのモデル 高度化に伴う計算コスト増としては大きな部類となる。しかしながら、検証解析ケースにおけ るランプ照射下の FP ガス放出挙動の様に、FP ガスバブルの非平衡条件下特有と考えられる挙 動が解析精度を決定づけるケースはあり、純経験的なルールを別途持ち込むこと無しにこのよ うな非平衡条件を解析中に判定、検出できることの意義は大きい。追加した多群/非平衡モジュ ール自身の高速化や FP ガス移行モデル外の計算コスト削減の開発努力を並行しつつ、 FEMAXI-8 における新たな標準モデルと位置づけ、新知見の反映等により改良を重ねて行くこ とが望ましい。

参考文献

- 1) 鈴木元衛他, 軽水炉燃料解析コード FEMAXI-7 のモデルと構造, JAEA-Data/Code 2013-014, 2014, 382p.
- 2) 宇田川豊他, 燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の開発 —軽水炉燃料挙動モデルの改良と総合 性能の検証-, JAEA-Data/Code 2018-016, 2019, 79p.
- 3) Udagawa Y. et al., Model updates and performance evaluations on fuel performance code FEMAXI-8 for light water reactor fuel analysis, Journal of Nuclear Science and Technology, vol.56, no.6, 2019, pp.461-470.
- 4) Udagawa Y. et al., The effect of base irradiation on failure behaviors of UO₂ and chromiaalumina additive fuels under simulated reactivity-initiated accidents: A comparative analysis with FEMAXI-8, Annals of Nuclear Energy, vol. 139, 107268, 2020.
- 5) Griesmeyer J. M. et al., A Dynamic Intragranular Fission Gas Behavior Model, Nuclear Engineering and Design, vol.55, 1979, pp.69-95.
- 6) Khvostov G. et al., A model for fission gas release and gaseous swelling of the uranium dioxide fuel coupled with the FALCON code, Nuclear Engineering and Design, vol.241, 2011, pp.2983-3007.
- 7) Buescher B. J. et al., Thermal-gradient migration of helium bubbles in uranium dioxide, Journal of Nuclear Materials, vol.48, 1973, pp.143-156.
- 8) Maiya P. S., Surface diffusion, surface free energy, and grain-boundary free energy of uranium dioxide, Journal of Nuclear Materials, vol.40, 1971, pp.57-65.
- 9) Hindmarsh A. C., Odepack a systematized collection of ode solvers, UCRL-88007, 1982, 10p.
- 10) 日本原子力研究開発機構,平成18年度燃料等安全高度化事業に関する報告書,2007,675p.

Appendix モデルパラメータセット 00029wnZuhGの

構成ネームリスト

第3章の解析に適用した、多群/非平衡モデル適用時の推奨モデルパラメータセット 00029wnZuhGを構成するネームリストの説明と設定値を次頁以降に示す。 This is a blank page.

Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
Parameters related to ma- terial thermal conductivity		
IPRO	3	Option for fuel porosity calculation that affects fuel thermal conductivity. Let Di the initial theoretical density ratio, P_0 : <i>initial porosity</i> $\frac{\Delta V_{swg}}{V_0}$: fission gas bubble swelling irrespective of IFSWEL, $\frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$: densification calculated by the model designated by IDENSF, and $\frac{\Delta V_{dens}}{V_0}$: volumetric strain by hot-press. Plot output is by IDNO=57, and pellet density =1-p. $p = p_0 + \frac{\Delta V_{swg}}{V_0} + \frac{\Delta V_{dens}}{V_0} + \frac{\Delta V_{hot}}{V_0}$
IPTHCN	91	Options for fuel thermal conductivity models Ohira and Itgaki latest model for UO_2 and MOX
i_stoich_crct (8)		Correction of fuel thermal conductivity by stoichiometric ratio
	1	Correction of fuel thermal conductivity by stoichiometric ratio by Lucuta(1996) method
NLJPROLLIMIT (8)	0.9	Lower limit is imposed on the relative fuel density, affected by IPRO option, used for computing fuel thermal conductivity
Parameters related to gap conductance		
BDX	10000.	A parameter for determining the maximum value of the extent of bonding advancement (hour-MPa), (common in the gap thermal conductance model and mechanical bonding model).
FBONDG	10	A parameter F for adjusting gap conductance during bonding (applied to the gap thermal conductance model)
IBOND	2	Option for P-C bonding model (mechanical model) Mechanical bonding is activated when P/C gap is closed and P/C contact pressure is greater than PCPRES.
IGAPCN		Option of gap thermal conductance

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
	5	Bonding model 1 (combination of $UO_2 + ZrO_2$ +Open Gapcon)
R1	0.1	(Used when IGAPCN = 0 or 2) pellet surface roughness (μm)
R2	0.5	(Used when IGAPCN = 0 or 2) cladding surface roughness (μm)
SBONDG	0.01	A parameter θ for adjusting the gap conductance at bonding. (thermal analysis)
Parameters related to fuel relocation		
bufsp	0.1	Percentage of the axial length of elements for dish (cham- fer) space to the axial length of fuel stack. (%)
ECRAC3		Pellet stiffness when pellet is completely cracked (Pa) (mechanical model).
(1) ⑧	2d8	Radial direction component
(2) (8)	2d8	Circum. direction component
(3) (8)	2d8	Axial direction component
Efac_RTZ	1.0	PuO_2 weight fraction at each axial segment (-). It is assumed that segments of PU(I)>0 have MOX fuel and segments of PU(I)=0 have UO_2 fuel. Totally NAX num- ber of PU(I) are designated. $Pu = \frac{PuO_2}{UO_2 + PuO_2}$ (weight ratio) *Restart calculation automatically takes over the value specified in [Base-calculation].
EPSRLZ	0.000000	Relocation strain in the axial direction

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
FRELOC ®	-3.010	Relocation parameter (1) -1.0 <freloc<0 :="" initial<="" td=""></freloc<0>
		relocation = diametral gap reduction = min([pel-
		let initial diameter] x abs(FRELOC), nominal diame-
		ter gap) (2) $-2.0 < \text{FRELOC} < = -1.0$: Thermal gap by
		Oguma(1983) model, and 30% as mechanical relocation
		(3) $-3.0 < \text{FRELOC} < -2.0$: Initial relocation = diame-
		tral gap reduction = min([pellet initial diameter] \mathbf{x}
		(abs(FRELOC)-2.0), nominal diameter gap), and cor-
		rected via f_rel_param() parameters (4) -4.0 <freloc<-< td=""></freloc<-<>
		3.0: Initial relocation = diametral gap reduction = min(
		[pellet initial diameter] x (abs(FRELOC)-2.0), nominal
		diameter gap), and corrected via f_rel_param() param-
		eters (5) $0 < \text{FRELOC} < 1.0$: Initial relocation = frac-
		tional reduction of diametral gap = $abs(FRELOC)$ (6)
		1.0 < FRELOC < 2.0: Initial relocation = fractional re-
		duction of diametral gap $= abs(FRELOC)-1.0$, and cor-
		rected via f_rel_param() parameters
f_rel_param (8)		Parameter to control thermal effect of fuel relocation
(1) ⑧	0.00016	Coef. of LHR-effect term: gradient 1
(2) (8)	0.0012	Coef. of LHR-effect term: gradient 2
(3) (8)	0.0025	Scaling factor F of [thermal reloc.] = $F \ge F$ (current value
		of mechanical reloc.]
(4) (8)	270	Boundary temperature of LHR-effect function, consisting
		of two linear functions for lower and higher temperature
		range
(5) (8)	1.0	Coef. of LHR-effect term: offset
(6) (8)	0.12	Coef. of eccentricity-effect term: parameter 1
(7) ⑧	0	Coef. of eccentricity-effect term: parameter 2
(8) (8)	1.1	Coef. of burnup-effect term: parameter 1
(9) (8)	0.0005	Coef. of burnup-effect term: parameter 2
(10) (8)	0.14	Coef. of burnup-effect term: parameter 3
(12) (8)	1120	Reference temperature $T_{ref}[K]$. When valid value given,
		BTparam [GWd/tU] is used as the input parameter for
		burnup-effect term instead of burnup itself. Here, BT-
		$\mathrm{param} = \int dBu * max(0.0, T - T_{ref}) dt$
(13) (8)	200	Coef. of nominal-gap-dependency term. Valid when
		diameter-based formulation selected.
iyng (8)		Option for pellet crack model (mechanical model)
	13	Internal flag i_crack_Emod_formula=2
		recovery of rigidity is expressed as a
		(NL_MCRLC_ORDER)-th order function. Stress
		transfer process applied when significant tensile force
		detected.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
I_HOLD_AX_EMOD_TENSILE ⑧	1	Option for control of pellet elasticity under tensile stress Treated as fully-cracked material when tensile stress de- tected, except axial directions.
NL_crack_level ⑧	1	Parameter for DGC model. Max. level of crack genera- tion stage assumed.
NL_DGC_bu_eff_1 ⑧	1.3	Parameter for DGC model. Coef. of burnup-dependency term of thermal effect.
NL_DGC_bu_eff_2 ⑧	0.0008	Parameter for DGC model. Coef. of burnup-dependency term of thermal effect.
NL_DGC_cutoff_CTE_um (8)	0.5	Parameter for DGC model. Thermal effect is neglected when DGC crack width < NL_DGC_cutoff_CTE_um
NL_dishmodel_option	10	Control for treating axial node contact in 1.5dim mech calc. Combine following Internal options. stiff_crct: when T, stiffness of axial buffer element is gradually cor- rected to find a condition that satisfies both buffer ele- ment is not fully collapsed and pellet axial tensile force is moderate; SCOTR_active: activate SC_OT_rev process that shuffle priority of preventing buffer element collapse and significant pellet axial tensile force during iteration of mechanical calculation. Shuffling happens convergence difficulty is encountered and iteration is re-tried; stiff_crct=T SCOTR_active=T
NL_LHR_ICG_W_cm (8)	200	Parameter for DGC model. Thermal effect of radial cracks (activated when NL_crack_level>0) starts to affect when an axial node experiences LHR greater than that specified with this option.
NL_MCRLC_ORDER (8)	10	See description of IYNG.
NL_mcrlc_recov (8)	1	Option for recovery process of mechanical relocation. Recovery operation of mechanival relocation is applied toward its initial value when gap is open and the current value is lower than the initial value.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
NL_MRfrac_as_internal_crack (8)	0.4	Parameter for DGC model. Fraction of mechanical relo- cation that contributes to thermal effect as internal crack of DGC model
NL <i>S</i> TTD (8) (3)	15d6	Stress Threshold for Tensile-state Detection (Pa) Threshold value referred in axial-buffer stiffness- correction process. When SCOTR_active=T, axial stress is required to become lower than this value (as an addi- tional necessary condition for successfull convergence of mechanical calc. interation)
Parameters related to fuel densification		
IDENSF (8)	11	Option for equation of pellet densification *Restart cal- culation automatically takes over the value specified in [Base-calculation]. Modified Rolstad model: corrected based on Freshley's
		report
NL_f_above_Tbound2 (8)	4.5	Denisfication rate is multiplied by NL_f_above_Tbound2 (from its value below 1000K) at temperature above NL_Tbound2_K
NL_Tbound2_K (8)	1300	See description of NL_f_above_Tbound2
Parameters related to ma- terial swelling		

 $table \ continues \ to \ the \ next \ page$

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
((8) : update in FEMAXI-8) IFSWEL		Option for pellet swelling model. Restart calculation automatically takes over the value specified in its base- calculation. It combines the following internal op- tions. When femaxiGSM=T, gas bubble swelling is eval- uated from porosities computed in femaxi FG migration models (intragranular, intergranular, HBS). AT_GBS: Anisotropy in grain-boundary gas-bubble swelling. When =2, swelling is distributed to radial/hoop/axial (1-3) directions following $F(1:3)=Fp(1:3)/sum(Fp(1:3))$, $Fp(1:3)=exp($ NL_IGBGS_anis_param(1) Sfuel(1:3)), Sfuel(1:3):fuel pellet stress. When =4, in the case that bubble over pressure is positive in only one or two di- rections, swelling is distributed to these directions. Oth- erwise swelling becomes isotropic. AT_IGBS: Anisotrypi in intragranular gas-bubble swelling. Similarly works to
		AT_GBS.
	14	femaxiGSM=T, AT_GBS=4, AT_IGBS=2
RIMSWL	1	Option for the swelling of the rim structure region. When RIMSWL=1, the volumetric swelling rate of the rim structure region is considered in total swelling evalua- tion. *Restart calculation automatically takes over the value specified in [Base-calculation]. Contribution of HBS porosity to fuel swelling is taken into account.
Parameters related to ma- terial creep		
BETAX	0.002	Pellet hot press parameter α (in mechanical analysis)
CRFAC	1.0	Magnification factor for cladding creep rate (mechanical analysis)
CRPEQ	7	Option for cladding creep model FRAPCON-4.0 model, PNNL-19418, Vol-1. Parameter set (SR/RX) is selected according to i_clad_mater.
ICRP	1	Option to add temperature dependency to cladding creep When ICRP=1, for the temperature under CRTEMP the equation designated by CRPEQ is used, and over CRTEMP the other one designated by HTCRP is used.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
ІНОТ	1	Option for fuel pellet hot pressing hot pressing factor is given by $\frac{(1-D)-(1-D_S)}{(1-D_0)-(1-D_S)}$ × <i>BETAX</i> , where D:fuel pellet RTD(-), D_0 : initial value of D(-), D_S :FDENH
IPCRP	2	Option for pellet creep equation MATPRO-11
NL_FCRate_UL_s	300.0d0	Calculation aborts when fuel creep rate (/s) exceeds this threshold value.
NL_f_str_creep_ref ⑧	1.0	When NL_i_str_creep_ref=1, stress referred in creep calc. is evaluated by Sref(ix) = (1.0-NL_f_str_creep_ref) * S(ix) + NL_f_str_creep_ref * Savg (ix:r,thet,z). Savg: average stress
NL_HP_FPtCC ⑧	0.0	HotPress-Fraction-of-Plastic-to-Creep-Component. In hot-press term calc. of equivalent stress, betax is ac- cepted without any modification in creep module, while betax is scaled by NL_HP_FPtCC in plastic calc. module.
NL_i_str_creep_ref	2	NULL For fuel region, stress is averaged for the region from radial position of maximum axial (compressive) stress to the periphery.
NL_SLCF_Tactive_K (8)	1273.15	Parameter for DGC model. Coef. of burnup-dependency term of thermal effect.
NL_stress_low_cutoff_fcreep_MPa ⑧		Fuel creep rate is scaled by f_scl such that f_scl=0 for Seq < NL_stress_low_cutoff_fcreep_MPa(1), f_scl= (abs(Seq) - NL_stress_low_cutoff_fcreep_MPa(1)) / (NL_stress_low_cutoff_fcreep_MPa(2) - NL_stress_low_cutoff_fcreep_MPa(1)), where Seq is equivalent stress.
(1) (2)	50.0 100.0	Parameter 1 Parameter 2
TCS	1773.15	Cut-off value of temperature in pellet creep calculation (K) in mechanical model.

Parameters related to fission gas behavior

		table continues from the prev.page
Namelist ID ((8) : update in FEMAXI-8)	Value	Description
ADDF	0	Re-dissolution rate of gas atoms in grain boundary bub- bles into grain matrix is multiplied by ADDF.
APORE	1	Initial radius of intra-granular gas bubble (nm).
FACD	1	Effective diffusion coefficient in grain is multiplied by FACD.
FSIGM	1.0	Tuning parameter to multiply Pext by FSIGM.
GBFIS	40	Option for intra-granular gas bubble model, i.e., model for bubble radius and number density abolished
gbthick_fgr_model	0	Thickness of re-solution layer of GB-FP gas atom at grain periphery (cm)
GRWF	1.0	(Used when $IGRAIN = 0$) Grain growth rate is multiplied by GRWF.
IDCNST	13	Option for models of fission gas atom diffusion constant equation $D = Dth + Dirr + DirLT, Dth=NL_DCGAC(1)$ $exp(-NL_DCGAC(2)/(KT)), Dirr=NL_DCGAC(3)$ $(Rfis)(0.5) = exp(-NL_DCGAC(2)/(kT)),$ $DirLT=NL_DCGAC(5) = Rfis^N L_DCGAC(6),$ k:boltzmann const., Rfis: fission rate
IGASP (8)	3	Option for fission gas release model. *Restart calcula- tion automatically takes over the value specified in [Base- calculation]. GB model: Matthews' and White's models are combined and modified
IGRAIN	1	Option for equation representing UO_2 grain growth Ainscough
IPEXT (8)	20	Option for the external pressure Pext acting on grain boundary bubbles. Take information at the mid-point of time-step, and adopt node-avg. value of average stress for all the ra- dial fuel mesh.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
NL_DCGAC		Diff-Coefof-Gas-Atom-model-Coefficients. Valid when idcnst=10. Parameter for Dgas_atom_Matzke_Modified_cm2_s. Or valid when idcnst=11. NL_DCGAC(3) and NL_DCGAC(4) affects irradiation-effect term.
(1)	1.0d+1	Parameter
(2)	4.7	Parameter
(3)	1.0d-20	Parameter
(4)	0.6	Parameter
(5)	1.0d-21	Parameter
(6)	0.3	Parameter
NL-F_ITBT (8)		0.0-1.0: gas-atom trapping rate by intragran- ular bubbles is multiplied by NLLF_ITBT(1). $0.0>NL_F_ITBT(1)$: trapping rate is scaled with $f(T) = -atan((T-abs(NL_F_ITBT(1)) * NL_F_ITBT(3)))$ * (1-NL_F_ITBT(2))/pi + 0.5 + 0.5 * NL_F_ITBT(2), where T is temperature(K).
(1) (8)	-2000	Coef. of correction function for trappping rate
(2) (8)	3.0	Coef. of correction function for trapping rate
(3) (8)	1.0	Coef. of correction function for trappping rate
NL_GBMT_LPARAM ®		Integer-type parameter for Matthews/White type GB- FP migration model
(1) (3)		Control of combination of the following internal op- tions. i.gfb_resol: option to take into account the effect of resolution of face bubbles($0/1/4$)(0:fraction of frac_gfa.in_gfb contributes to bubble pressure 1: contribution fraction to bubble pressure is com- puted by NL_gbmt_param(1)*(NL_gbmt_param(4)- a_)+NL_gbmt_param(3)*a_ where $a_=sqrt(Fcov_face)^{NL_gbmt_i_param(2)}$ 4: con- tribution fraction to bubble pressure is computed by NL_gbmt_param(1)*1.0d0/($1.0d0+NL_gbmt_param(21)*fis_cm3_s/Da_intra_cm2_s$) where fis_cm3_s is fission raten, Da_intra_cm2_s is gas-atom diffusion coef. for grain interior)) i_Dvac_type: model option for vacancy diffusion coef.(5)(5:=D_GB_vac_param_given3_m2_s) i_vac_bndep: option for additional scaling factor on Dvac($0/1$)(0 :no additional factor 1:additional factor as functions of temperature and burnup)

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
		i_Bdens_mdl: method to compute face bubble den-
		sity(0/1)(0:computed as a function of temperature)
		1:computed using a correlation between coverage ratio
		and density)
		i_opt_Elink_func: scaling method for the input parame-
		ter of the function to compute linkage fraction of edge
		bubbles to free volume $(1/3)(1:no \text{ scaling. Edge porosity})$
		is used as the input parameter 3:edge porosity is scaled
		by a function of grain size)
		i_Fblink: model for computing linkage fraction of face
		bubbles to grain edge. $(0/2)(0$:computed as a function
		of coverage ration 1:computed as a function of bubble
		length and coverage ratio. Here Fblength_estimated flag
		is activated.)
		$\frac_Sf2Se_by_linkage:$ valid when Fblength_estimated is
		activated. A scaling factor fo porosity fraction delivered
		to grain edge additionally, dependent on the linkage ra-
		tion of face bubbles to grain edge. $(0.0-1.0)$
		closed_pore_focused: $(T/F)($.true.: n_f is treated as
		'closed' FB-gas density, and n_e is treated as 'clsoed' EB-
		gas density = (Spatially gas in EB and 'open' FB) in
		computing bubble pressuresfalse.: fraction of 'open'
		bubbles on grain face is not considered, and so n_f is
		treated just as gas denity in face bubbles(spatial poso-
		timing is adopted to define $n_{\perp}(T)$ ($T_{\perp}(T)$)
		interfere_ode_to_freeze_rf: (1/F)(.true.: update of face
		porosity in ODE is temporarily freezed when face cover-
		age ratio gets close to =1.0) Criteff emice from emell ED: (T/E) (true is undeten of
		Cuton_emiss_from_small_FP: (1/F)(.true.: update of
		face porosity in ODE is temporarily freezed when face
		porosity gets lower than a given threshold value) dSfe and for Payt mitigation $(T/F)(true)$, this affects
		use Early <1.0 to mitigate effective constraint on bub
		bles by external pressure. Porosity increase that occurred
		in such condition that "it would not have been occurred
		if FsigM was 1.0" is computed and stored in variables
		named PIIIOC. This information is used for correction
		of gas bubble swelling.)
		- 6 5 40000 0110111B/
	24	$i_{gfb}resol = 4$
		$i_Dvac_type = 5$
		$i_vac_bndep = 1$
		$i_Bdens_mdl = 1$
		$i_opt_Elink_func = I_Elink_Gsfunc_table$
		$i_{\rm F}$ blink = 2

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
		$f_{\rm fblink} = 3.28$
		$frac_Sf2Se_by_linkage = 0.9$
		$closed_pore_focused = .true.$
		$Cutoff_release_from_small_Nf = .true.$
		$interfere_ode_to_freeze_rf = .true.$
		$Cutoff_emiss_from_small_FP = .true.$
		$dSfe_crct_for_Pext_mitigation = .true.$
(2) (8)	3	Parameter to control burnup dependency of vacancy dif-
		fusion coef.
(3) (8)	4	Not valid
NL_GBMT_PARAM (8)		Double-precision-type parameter for Matthews/White
		type GB-FP migration model
(1) (8)	1.0	frac_gfa_in_gfb. Fraction of grain face FP gas that con-
		tributes to bubble pressure.
(3) (8)	30	Parameter to control burnup dependency of Dvac.
(4) (8)	1.0	Parameter to control burnup dependency of Dvac.
(6) (8)	-1d30	Parameter for the function to compute linkage fraction
		of edge porosity to free volume.
(7) (8)	3000	Control of porosity calculation with frac_gfa_in_gfb is in-
		activated above the temperature specified with this pa-
		rameter.
(8) (8)	9.0d+0	Valid when i_Dvac_type>=3 with which Dvac is defined
		via NL params. Pre-exp. coef. for high temp. region.
(9) (8)	5.752d4	Valid when i_Dvac_type>=3 with which Dvac is defined
		via NL params. Activation energy for high temp. region.
(10) (8)	8.38d-5	Valid when $1_Dvac_type >= 3$ with which Dvac is defined
	4 5 14	via NL params. Pre-exp. coef. for low temp. region.
(11) (8)	4.504	Valid when $1_Dvac_type >= 3$ with which $Dvac$ is defined
(12)	10	Via NL params. Activation energy for low temp. region.
(12) (8)	10	of adra parasity to free volume
(13)	100	Parameter for the function to compute linkage fraction
(13)	100	of adm porosity to free volume
(14)	15	Parameter for the function to compute linkage fraction
	1.0	of edge porosity to free volume
(15) (8)	20	Parameter for the function to compute linkage fraction
	20	of edge porosity to free volume.
(17) (8)	2000	Control of burnup dependency is inactivated above the
		temperature specified with this parameter.
(18) (8)	1273	Valid when i_Dvac_type>=3 with which Dvac is defined
		via NL params. Coefs. for high temp. region are used
		below the temperature specified with this parameter

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
(19) (8)	0.9	FPlink_cntrbt_Thrsld. EPlink(edge porosity linkage frac-
		tion) increases with FPlink(face poroity linkage fraction)
(20)	10	when FPlink_cntrot_ThrsId < FPlink Scaling factor to be applied on external stress Valid
	1.0	when dSfe_crct_for_Pext_mitigation is active.
(21) (8)	3.0d-28	See description of i_gfb_resol.
(22) (8)	1.0d-14	Lower limit of time-step (sec) for ODE time integration.
		Calculation aborts when ODE time step becomes lower
		than this value.
NI HED ID		Interne time entions for Chiesmanon time dynamic inter
NLIFFIF		granular fission gas behavior model
(1)		Option for bubble-diffusion coefficient applied to biased
(-)		migration (when activated).
	5	$D = (3v(4/3))/(2PiRb^4)Ds, Ds=NLSDFV(2)$
		$\exp(\text{NL}_{SDFV}(1)/(\text{RT}))$, R: gas const., T: temper-
		ature, v: atomic volume of U, Rb: gas bubble radius
NL_HFP_PARAM		Double-precision type option parameters for Griesmever
		type intragranular fission gas behavior model
(5)	10.0d0	Scaling factor for bubble-diffusion coef. for steady state
(8)	3.0d0	Scaling factor for bubble-diffusion coef. for biased-
		migration
NL_ITRG_LPARAM (8)		Integer-type parameter related to mainly intragranular-
0		FP migration model
(1) (8)		Control of combination of the following internal options
		(for >0). imdl_NEQcrit:option for trigger of IG-to-GB
		releas. $(2/3)(2$:criteria based on IG porosity and temper-
		ature. Once triggered, the release will continue until the
		release rabe by indl_RR becomes insignificant. 3:criteria
		based on 1G porosity and temperature. Judged at each
		imdLinact: option for additional criteria to stop IG-to-
		GB releas $(0/1)(1$:stop the release when IG FP density
		becomes lower than a certain level)
		imdLRR:option for formulation of release
		rate. $(1/2)(0$:Evans-type formulation 2:general for-
		mulation for biased migration of gas-bubbles)
	0	FRGBLactive=F
(2)	3	Parameter (power) for upscaling of intra-grain gas-atom
		diffusion coeffecient by kjma/mtrg grain size effect
(3)	7	Parameter(power) for polygonization rate (kjma)

Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
NL_ITRG_PARAM (8)		Double-precision-type parameter related to mainly
		intragranular-FP migration model
(3) (8)	1023	Lower cut-off temperature for beff_mtrg
(4) (8)	1903	Upper cut-off temperature for beff_mtrg
(5) (8)	0.068	Parameter b0 for polygonization_param(kjma)
(6) (8)	0.06	Parameter b0 for polygonization_param(mtrg)
(7) (8)	0.35	Effective grain size ds0(um) of polygonized region (kjma)
(8) (8)	0.40	Effective grain size ds0(um) of polygonized region (mtrg)
(9) (8)	1.0	Enhancement of effective diffusion coeffecient of intra-
		granular FP gas, influenced by the change of effective
		grain size(mtrg), is activated when 0.0<.
(11) (8)	0.1	Scaling factor on the additional FP migration activated with NL $(TDC \perp DADAM(1) > 0)$
(12)	9 4 E	with NLLIRGLPARAM $(1)>0$
(13) (8)	8 d -5	of the additional EP migration activated with
		NI ITEC I DARAM(1)>0
(14)	773	Lower cut-off temperature for heff mtrg transition tem-
	115	Lower cut-on temperature for ben intig transition tem-
(15) (8)	1123	Upper cut-off temperature for heff mtrg transition tem-
(13)	1125	nerature range
(16) (8)	2-0d7	Parameter Opress [Pa] of exp(-Opress/P Pa) which
	2.041	is the pressure-dependency term of migration rate
		in the additional FP migration activated with
		$NL_{ITRG_{I}}PARAM(1) = 2$
(17)	0.0	Parameter for effective fission rate referred in calculation
		of beff_kjma. Lower limit of scaling factor applied to high
		temperature range above NLJTRG_PARAM(2).
(25)	20.0	Upper limit of grain size referred in evaluation of effective
		FG diffusion coef. affected by polygonized (mtem) fuel
		region
NL_SDFV		see $NL_HFP_IP(1)$
(1)	85.0d0	see $NL_HFP_IP(1)$
(2)	1.0d2	see NL_HFP_IP(1)
NL_SOBcutoff_Pa (8)	1d6	Upper limit (tensile-direction) of fuel stress referred in
		fission gas models.
NODEC	0	Norm of much classest a landed in diffusion of the
NODEG	2	Num. of mesh element adopted in diffusion calc. for
		intragranular FG atoms
DF am	0.00005	Critical value of main hour dam. ED and hubble of dive
RF LCIII	0.00005	Critical value of grain-boundary FP gas bubble radius
		(cm)

 $table\ continues\ from\ the\ prev.page$

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
R_FS_cm	1.0d-7	Radius of region influenced by a fission spike
Parameters related to high bunrup structure		
BURMXE	68.493	(Used when HBS=1 or 2) Value of Bu_0 in the above equation (GWd/t)
Cbub_hbs_cm3	1.3d11	Valid when prs_REq=.true., HBS bubble density
FPINF	0.25	(Used when HBS=1 or 2) Lassmann empirical model is applied to fission gas transfer from rim structure to pore.
F_disl_punch	0.70	Valid when disl_punch=.true., scalinf factor of dislocation-punching threshold stress
GEN1	0.0146	(Used when HBS=1 or 2) Value of Gen1in the above equation (wt.%/GWd/t)
GEN2	0.0584	(Used when HBS=1 or 2) Value of Gen2 in the above equation.

		table continues from the prev.page
Namelist ID ((8) : update in FEMAXI-8)	Value	Description
HBS	14	HBS combines the following internal options for HBS behaviors; GMtoHBS.by.kjma.eq: HBS model type (T/F) (T: Khostov-type model F: femaxi-7-type model that employs Lassman's correlation with effective bur- nup $B_{eff}^n(GWd/tM)$ computed as $B_{eff}^n = B_{eff}^{n-1}$. $exp-k_1(T_n - T_0) \cdot \Delta t + \Delta B^n$ where B_{eff}^n : effective bur- nup at n-th time step (GWd/tU), T_n : local fuel temper- ature (K) at n-th time step. This is assumed as $T_n = T_0$ when $T_n \leq T_0$ T ₀ : Reference temperature (K), k_1 : constant, Δt : time step increment (s), ΔB^n : burnup increment at n-th time step.; prs_REq: Porosity evolu- tion type (T/F). When =T, treated by ODE. When =F, calculated by empirical correlation.; i.GD.hbs: option for gas distribution to grain boundary and HBS region (1/4/5). (1: distribution fraction to HBS is equal to the ratio of polygonization fraction (kjma) to sum of polygo- nization fractions (kjma+mtem). 4: distribution fraction to HBS is a function of polygonization fraction (kjma). 5: distribution fraction to HBS is a function of the diff. coef. enhancement factor); disl_punch: When =T, poros- ity increase by dislocation punching mechanism is takin into account.; MGDTtoHBatRZE: Matrix-Gas is Direc- trly Tranferred to Hbs-Bubble at Restructured-Zone- Extension. When =T, polygonization process involves direct migration of fission gas (contained in the fuel re- gion before polygonization) to the newly formed HBS region. ; dRdt_VCO: When =T, interstitial defect terms are neglected in defect emission/absorption calculation for an HBS bubble: p.hbs.aniso: When =T, anisotropic contribution of HBS porosity to fuel swelling is assumed.; GMtoHBS_by_kjma_eq=.true. i.GD_hbs=4 skip_HBs.ode_after_2nd_call=.true. disl_punch=.true. MGDTtoHBatRZE=.true. dRdt_VCO==.true. p.hbs.aniso=.true. AT_HBS=2 fgr_REq=.true.
KON1	2.0d-11	(Used when HBS=2) A constant k_1 to multiply the temperature dependent term of effective burnup.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
NL_F_DP_rate		Valid when prs_REq is active (HBS porosity evolution treated by ODE)
(1)	1.0d-7	Porosity increasing rate with dislocation punching is cal- culated by = $NL_F_DP_rate(1) \exp(dP NL_F_DP_rate(2))$, where dP is threshold bubble pressure of punching.
(2)	1	see description for (1)
(3)	3.5d7	When hydrostatic pressure Shyd exceeds NL_F_DP_rate(3), Shyd is scaled to NL_F_DP_rate(3) + NL_F_DP_rate(4) (Shyd - NL_F_DP_rate(3))を乗じて 算定する.
(4) (5)	0.2d0 1.1d-10	see description for (3) When NL_F_DP_rate(5)>0.0, driving force (gas pressure) of dislocation punching is scaled by f_irrad = $1.0d0 / (1.0d0 + C_FFC NL_F_DP_rate(5))$, where C_FFC is fission-fragment-collision rate (n/cm3/s) of an HBS bub- ble with 10nm radius
NL-HBS_PARAM (8)		Double-precision-type parameter related to mainly intragranular-FP migration model
(2) (8)	1.0d0	Valid when p_hbs_aniso=T. Factor to tune sensitivity of HBS-porosity-growth deviation to stress-deviation
(3) (8)	3.0d0	Valid when prs_clac_on_fgrain=T. Scaling factor of gas- migration rate to HBS
RMOGR	2	Option for using empirical equations to estimate FP gas release from HBS RMOGR=2: open pore fraction OPR to the rim pore porosity P_{rim} is given as a function of P_{rim} $OPR = 0.03/0.23 \times P_{rim}(0 \le P_{rim} \le 0.23)OPR = 0.03 + (0.15 - 0.03)(100 \times P_{rim} - 23)thickspace(0.23 <= P_{rim} <= 0.24)OPR = 0.15 + (0.45 - 0.15)(100 \times P_{rim} - 24)(0.24 <= P_{rim} <= 0.25)$
RMPST	-1	Option for calculation of rim structure porosity P_{rim} . Must be -1 when prs_REq is .true.
TSTD	750	Valid when GMtoHBS_by_kjma_eq is .false. Above this temperature (K), polygonized region is partially annealed to normal region.

Parameters related to calculation control

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
DDSIGE	3	Maximum allowable change of equivalent stress in the iteration calculation of ERL (IFEMRD=1) mechanical analysis (MPa).
dt_redo_Llim_hr	0.000000000	3 Valid when dt_subdiv_active=T. The minimum time step (hr) reached by automatic time-step subdivision.
f_BRF_reduc (8) (2) (8)	5000	Options when internal option stiff_crct is valid(=T). Upper limit of stiffness-correction factor applied to axial buffer element
GGIDCbugfix	1	A bug-fix related to grain growth model with which fis- sion gas conservation is broken to some degree. The bug-fix is applied. (default and recommended)
IDSELM	1	Modeling option for fuel pellet dish/chamfer/pellet-pellet axial gap spaces fuel pellet dish/chamfer/pellet-pellet axial gap spaces are treated in the 1.5D fem model
IELAST (8)	4	Option of elastic calculation in ERL mechanical analysis. Treatment of fuel plasticity is inactivated in femaxi and activated in ranns.
IFEMOP	2	Option for coupling type between therm/mechanical cal- culations
IFEMRD	1	Options for configuration of mechanical calcula- tions(1.5D/2D) Entire rod length (ERL) mechanical analysis (Mechanical analysis I).
ISIGE	14	Option to continue calculation even if allowable error of the maximum change of equivalent stress is detected in the iteration calculation of ERL (IFEMRD=1) mechan- ical analysis. dt_subdiv_active=T, flg_MSMFPIS=T, FCIWERNE=F, RPFAMCE=T, PCMVGAPV=T, CCMVGAPV=T, LPSIISMT=T

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
mesh (8)	11	However, when HBS option (high burnup structure model) is designated, MESH>0 has to be set. When ISHAPE=1 is selected, the above number of ring el- ements is doubled. (X In RANNS, when IREST>0, "MESH" value is automatically taken over from FE- MAXI.). Here, number of cladding ring elements is, irre- spective of "MESH" designation, as follows: (1) Cladding which has no Zr-liner: 8 metallic elements + 2 outer ox- ide layers. (2) Cladding with Zr-liner: 2 liner elements + 8 metallic elements + 2 outer oxide layers. For 2-D local mechanical model, (3) Cladding which has no Zr-liner: 4 metallic elements + 1 outer oxide layers (4) Cladding with Zr-liner: 1 liner elements + 4 metallic elements + 1 outer oxide layers. However, when ISHAPE=1, the above number of elements is doubled. Pellet: 1-D therm.=9 equi-volume, 1-D mech.=3 equi- volume, 2-D mech.=3 equi-volume, Cladding: 2 for
NL_check_consistency_fric_eff (8)		metallic layer, with NRCOX=1 forced. Control for treating P/C contact state in 1.5dim mech
	1	Active detection of contradictive calculation results is are applied to, and incremental corrections of axial force (by P/C friction) are iterated until the detected contraidiction is removed.
NL_DIRECT_OUTPUT_TO_CSV		Option for output to plt file
	2	Conversion of plt file contents to csv files are conducted during femaxi/ranns execution (generally much faster). Two explot-control files named x_time and x_coord are required to be existing under the directory at which cal- culation is executed. The two files are supposed to cover outputs with time (or burnup) as x-axis and with ax- ial/radial coordinates as x-axis, respectively.
NL_mechcalc_at_convergence (8)	-1	Control of coupling algorithm between thermal and me- chanical calcs. Variable update(fix) process is launched just after con- vergence is obtained

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
Parameters related to friction between fuel and cladding		
AMU2	0.02	Friction coefficient between pellet and cladding (IFEMRD=1)
ICONP (8)	3	Option for P/C frictional force in 1.5D mech. calc. Coulomb's law. Internal flag depend_Rbond is activated to treat the coef. as a function of bonding state variable
NL_friccoef_max (8)	0.4	Valid when depend_Rbond is active. Cutoff value for fric. coef.
NL_PCFD_BR (8)	40	Valid when depend_Rbond is active. Const. of propor- tionality to bonding state variable
Parameters related to free volume		
NL_tilt_angle_rad	0	Tilt angle of fuel pellets (radian)
Parameters related to ma- terial thermal expansion		
IPTHEX	1	Option for pellet thermal expansion rate MATPRO-09
DTPL	0.0	Temperature difference between gas inside the plenum and surrounding coolant (K) Plenum temperature = Coolant temperature + DTPL (K)
EFAC	1.0	Fraction of stiffness recovery of cracked pellet to the pel- let Young's modulus. (ERL mechanical analysis)

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
FACLNR		(Effective when ZR>0, and MATLNR=1) Option to mul-
		tiply the mechanical properties values of cladding liner by
		FACLNR.
(1)	1.0	(FACLNR(1): Young' s modulus
(2)	1.0	FACLNR(2): Poisson' s ratio
(3)	1.0	FACLNR(3): thermal expansion rate
(4)	1.0	FACLNR(4): creep rate
(5)	0.5	FACLNR(5) : yield stress
FACXI		(Effective when NRCOX2>0, and MATXI=1) Option to
		multiply the mechanical property values of cladding oxide
		layer.
(1)	0.01	Young's modulus
(2)	1.0	Poisson' s ratio
(3)	1.0	thermal expansion rate
(4)	1.0	creep rate
(5)	1.0	yield stress
FACXO		Option to multiply the mechanical properties values of cladding outer oxide layer by FACXO. Effective when $MATXO = 1$
(1)	0.01	(FACYO(1): Young' a modulus
(1) (2)	1.0	(FACXO(1)): Poisson' s ratio
(2)	1.0	FACXO(2): Foissoir is ratio
(3)	1.0	FACXO(3): thermal expansion rate
(4)	1.0	FACXO(4): creep rate
(0)	1.0	racao(3): yield stress
FCRFAC	1.0	Magnification factor for pellet creep equation in mechan- ical model.
FRMIN	0	Minimum fission gas release rate (%)
HER	1	Options for He release HER=1: He release rate is HERLS times as large as the FGR of Xe+Kr.
ICAGRW	1	Cladding irradiation growth equation option: MATPRO-09
ICATHX	0	Option for cladding thermal expansion rate MATPRO-09
ICFL		Option for transient calculation.

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
	1	When ICFL=1, when the coolant temperature exceeds the cladding temperature in the calculation, the cladding temperature is set equal to the coolant temperature, and the material properties such as the enthalpy of coolant, quality and void fraction are reset using the cladding tem- perature.
IPLYG	2	Option for equation of pellet Young's modulus. MATPRO-11
IPOIS	30	Option for pellet Poisson' s ratio MATPRO-11
IPUGH	1	Pugh' s reversal method is adopted in the cladding creep calculation in 2D local mechanical analysis. Activated
ISPH	1	Option for equation of pellet specific heat. MATPRO-11
IST	1	Option for internal gas flow. Calculation of transferred amount of gas is performed to obtain an instantaneous complete mixture of composition and pressure equilibrium as well inside fuel rod, i.e. in every axial segment and plenum
izyg_oxygen_effect	0	If activated, effects of oxygen conc. are taken into ac- cout in computations of material properties of zircaloy cladding Not activated
MATLNR	1	(Effective when ZR>0) Option for mechanical properties of Zr liner of cladding. Mechanical properties of liner are replaced with those of Zircaloy by designating FACLNR.
MATXI	1	(Effective when NRCOX2>0) Option for mechanical properties of cladding inner oxide layer. Mechanical properties of cladding inner oxide layer are replaced with those of Zircaloy by designating the values in FACXI.
MATXO		Options for mechanical properties of cladding

		table continues from the prev.page
Namelist ID	Value	Description
((8) : update in FEMAXI-8)		
	1	mechanical properties of cladding outer oxide layer are replaced with those of Zircaloy by designating the values in FACXO.
NRCOX2	0	Radial mesh number of cladding inner surf. oxide layer. 0: inner surf. oxide layer is not modelled.
РХ	99.0	Portion of volume expansion ratio, X, in the radial direc- tion (%), where X=PBR-1.0. This volume expansion is due to oxidation.
RFGFAC	1.0	Scaling factor for FGR from HBS
XKSU	1500.0	Upper plenum spring constant (N/m)
		bottom of table