

DETR.PD-072/79

TITULO
IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO CARO PARA O COMBUSTÍVEL
 $ThO_2-5\%UO_2$

NOTAS CORRELATAS
NT DETR.PD 077/79
NT DETR.PD 098/80
NT DETR.PD 108/80
NT DETR.PD 110/80

OBJETIVO
Implementar o código CARO para o combustível $ThO_2-5\%UO_2$.

LISTA DE DISTRIBUIÇÃO
SUPLA * (1)
SUPED (1)
ASPC.PD * (1)
DETR.PD (2)
AUTOR(ES) (2)
DIECB.PD (1)
DIFNU.PD (1)

KWU/B(222)
Dr. M.Peehs (1)
KFA/HBK Projekt
Dr.D.F.Leushacke (1)

RESUMO E CONCLUSÕES
Neste trabalho é feita a implementação do código CARO D-3 para o combustível $ThO_2-5\%UO_2$. Algumas modificações foram feitas para o cálculo de: Queima, expansão térmica, distribuição radial de fontes de calor e calor armazenado.

As demais propriedades materiais do $ThO_2-5\%UO_2$ foram introduzidas sem modificações internas no programa. Estas propriedades do $ThO_2-5\%UO_2$ utilizadas nos cálculos são descritas e comparadas com as análogas do UO_2 usadas pelo CARO para queima nula. Os cálculos iniciais realizados mostram melhor comportamento térmico e mecânico da vareta combustível carregada com $ThO_2-5\%UO_2$, relativamente, àquela contendo UO_2 .

* Apenas folha de rosto

ÍNDICE		
	Summary	2/41
1.	Introdução	3/41
2.	Propriedades Materiais do UO_2 e $ThO_2-5\%UO_2$	4/41
3.	Implementação do código CARO para o Combustível $ThO_2-5\%UO_2$	10/41
4.	Conclusões	24/41
	Referências	25/41
	Tabela	27/41
	Figuras	28/41
	Anexo	41/41

cma.

Nº. CÓPIAS
11

AUTOR (ES)	VISTO	DATA	APROVAÇÃO	VISTO	DATA
Fernando Soares Lameiras	<i>[Signature]</i>	21.11.80	CHEFE DO LAB. OU GRUPO		
Antônio C.S. Sabioni	<i>[Signature]</i>	21.11.80	CHEFE DA DIVISÃO	<i>[Signature]</i>	25.11.80
			CHEFE DO DEPARTAMENTO	<i>[Signature]</i>	18.12.80
CLASSIFICAÇÃO TH-UTILIZATION IN PRESSURIZED WATER REACTORS			CONFIDENTIAL INFORMATION TAREFA: 11.21.03		

SUMMARY

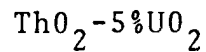
In this work the implementation of the CARO computer code for ThO_2 -5% UO_2 fuel is presented.

Some modifications concerning the calculations of burnup, thermal expansion, radial distribution of heat sources and stored energy were made. Other material properties were introduced without internal modifications in the programme.

The properties of the ThO_2 -5% UO_2 used for the calculations are described and compared with the analogous ones of UO_2 for null burnup. The first calculations shown better thermal and mechanical behavior for ThO_2 -5% UO_2 fuel rod than a similar rod with UO_2 fuel.

1 275

IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO CARO PARA O COMBUSTÍVEL



1. INTRODUÇÃO

Para a utilização do Programa CARO [1], no caso do combustível $(\text{Th,U})\text{O}_2$, as seguintes propriedades materiais devem ser introduzidas:

1. Composição do combustível (frações de urânio e tório, estequiometria, etc);
2. Densidade do combustível e densidade teórica;
3. Porosidade aberta;
4. Nitrogênio quimicamente ligado ou adsorvido, liberação de gás residual;
5. Condutividade térmica (como função da temperatura, porosidade, relação Th:U, e estequiometria);
6. Expansão térmica linear (dependências);
7. Capacidade térmica molar (dependências);
8. Variação volumétrica do combustível através de inchamento e densificação;
9. Liberação de gases de fissão;
10. Relocação (radial + axial);
11. Reestruturação;

12. Distribuição radial de fontes de calor (como função da composição do combustível e queima).

Neste trabalho concentramos nossa atenção no combustível $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$.

Muitas das propriedades materiais deste combustível não são ainda conhecidas. Aquelas relacionadas com a fabricação do combustível também não estão definidas.

A seguir apresentamos algumas das propriedades citadas acima para o combustível $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$ em comparação com as análogas do UO_2 e que foram introduzidas no programa CARO.

2. PROPRIEDADES MATERIAIS DO UO_2 e $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$

2.1 Composição do Combustível

O combustível $(\text{Th,U})\text{O}_2$ sob estudo, e que é de possível interesse para reatores PWR's, tem as seguintes especificações:

Composição : 5% UO_2 (em moles)
Enriquecimento : urânio com 93% U^{235}
Razão O/M : 2

2.2 Densidade do Combustível

A densidade teórica do composto $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$ pode ser calculada, conforme [2], através da seguinte expressão:

$$\rho_T = \frac{4 \cdot M}{A \cdot V} \quad (1)$$

onde

ρ_T : densidade teórica em g/cm^3 ;

M : peso molecular em g;

A : número de Avogadro = $6,02 \times 10^{23}$ moles/mol.-g

1 277

V : volume da célula unitária, cm^3

Para o combustível ThO_2 -5% UO_2 cuja composição, enriquecimento e razão O/M correspondem ao descrito no item 2.1, temos:

$$M = 264,16\text{g}$$

$V = a^3$, onde a é o parâmetro da rede. Para o ThO_2 -5% UO_2 o parâmetro a vale $5,5913 \times 10^{-18} \text{cm}$, conforme [2].

Logo,

$$V = 1,748 \times 10^{-24} \text{cm}^3$$

Levando os valores acima na expressão (1), obtemos:

$$\rho_T = \frac{4 \times 264,16}{(6,02 \times 10^{23})(1,748 \times 10^{-24})} = 10,04 \text{g/cm}^3$$

Assim, a densidade teórica do combustível é $10,04 \text{g/cm}^3$.

Neste trabalho, consideraremos para o combustível uma densidade de 95% DT, ou seja, $9,54 \text{g/cm}^3$.

2.3 Condutividade Térmica

Para a condutividade térmica das soluções sólidas de $(\text{Th,U})\text{O}_2$ adotamos o ajuste proposto por [3], ou seja,

$$K = F \cdot \frac{1}{A_0 + A_1 y + A_2 y^2 + (B_0 + B_1 y + B_2 y^2) T} + y \cdot \frac{C}{T^2} \exp\left\{\frac{-E_1}{T}\right\} + (1-y) \cdot \frac{C}{T^2} \exp\left\{\frac{-E_2}{T}\right\} \quad (2)$$

onde:

K : condutividade térmica, $\text{W/cm}^{\circ}\text{K}$

F : fator de correção da porosidade = $1,114 \left[\frac{1 - P}{1 + \beta P} \right]$

$$A_1 = 31,2$$

$$A_2 = - 9,3$$

$$B_0 = 0,0203$$

$$B_1 = 0,077$$

$$B_2 = - 0,55$$

$$E_1 = 1,8 \times 10^4$$

$$E_2 = 8,45 \times 10^4$$

$$C = 8,49 \times 10^7$$

$$\sigma : \text{desvio padrão} = 4,2 \times 10^{-3} \text{ W/cm } ^\circ\text{K.}$$

A expressão (2) é válida para $0 < P < 0,1$

Na Fig. 1 é feita uma comparação entre as condutividades térmicas do $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ e a do UO_2 [4, 5, 6] usada no CARO.

A integral da condutividade térmica para o $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$, entre duas temperaturas T_1 e T_2 , é obtida por integrarmos a expressão (2) entre T_1 e T_2 , ou seja,

$$I = \int_{T_1}^{T_2} K \, dT = 43,86 \ln \left(\frac{2,86 + 0,0228 T_2}{2,86 + 0,0228 T_1} \right) +$$

$$236 \left[\exp\left(\frac{-1,80 \times 10^4}{T_2}\right) - \exp\left(\frac{-1,80 \times 10^4}{T_1}\right) \right] +$$

$$2168 \left[\exp\left(\frac{-3,72 \times 10^4}{T_2}\right) - \exp\left(\frac{-3,72 \times 10^4}{T_1}\right) \right], \quad (3)$$

ou, aproximadamente,

$$I = 43,86 \ln\left(\frac{2,86 + 0,0228 T_2}{2,86 + 0,0228 T_1}\right) + 236 \cdot \exp\left(\frac{-1,80 \times 10^4}{T_2}\right)$$

$$+ 2168 \cdot \exp\left(\frac{-3,72 \times 10^4}{T_2}\right) \quad (4)$$

onde

I : integral da condutividade térmica em W/cm,

T : temperatura em °K

Na Figura 2 são mostradas as integrais da condutividade do ThO_2 -5% UO_2 , conforme [3] e a do UO_2 usada no CARO, com material 95%DT.

2.4 Expansão Térmica

A expansão térmica linear de soluções de $(\text{Th,U})\text{O}_2$, conforme [7], é calculada através da seguinte expressão:

$$\frac{\Delta L}{L_0} = \frac{(t-t_0)(A-By) + (t^2 - t_0^2)(A_1 - B_1y)}{A_2 - B_2y} \quad (5)$$

onde

$\frac{\Delta L}{L_0}$: expansão térmica linear, cm/cm;

t : temperatura em °C;

t_0 : temperatura de referência = 25°C ;

y : fração molar de UO_2 ;

$$A = 2,45 \times 10^{-5}$$

$$A_1 = 3,97 \times 10^{-9}$$

$$A_2 = 3,03$$

$$B = 1,59 \times 10^{-4}$$

$$B_1 = 3,17 \times 10^{-8}$$

$$B_2 = 21,1$$

σ : desvio padrão = $3,76 \times 10^{-4}$ cm/cm.

A expressão (5) é válida para $0 \leq P < 0,1$.

A Fig. 3 mostra as expansões térmicas do UO_2 [8,9, 10] utilizada pelo CARO e a do $ThO_2-5\%UO_2$ conforme [7].

2.5 Capacidade Calorífica Molar

As capacidades caloríficas molares das soluções sólidas de $Th_{1-y}U_yO_2$ têm valores muito próximos ao do ThO_2 para y até 0,2.

Tendo isto em vista, usaremos neste trabalho uma expressão da capacidade calorífica molar do ThO_2 em função da temperatura e a suporemos válida para o $ThO_2-5\%UO_2$ o que é muito razoável.

A expressão adotada [11] foi:

$$C_{pm}(T) = \frac{K_1 \cdot \theta^2 \cdot e^{\theta/T}}{T^2 (e^{\theta/T} - 1)^2} + K_2 T \quad (6)$$

onde

C_{pm} : capacidade calorífica molar, J/mol.°K;

: 1 281

T : temperatura absoluta, °K;

$$\theta = 398^{\circ}\text{K}$$

$$K_1 = 69,29 \text{ J/mol. }^{\circ}\text{K}$$

$$K_2 = 9,34 \times 10^{-3} \text{ J/mol. }^{\circ}\text{K}^2$$

A expressão (6) foi escolhida por ser similar à usada para o UO_2 [12] no CARO. Só que, no caso do UO_2 , há uma terceira parcela no segundo membro que leva em conta o crescimento anômalo da capacidade calorífica molar do UO_2 a altas temperaturas, fenômeno este não observado para o ThO_2 . A Fig. 4 mostra as capacidades caloríficas molares do UO_2 e ThO_2 .

2.6 Temperatura de Reestruturação

A temperatura na qual começa a formação de grãos colunares através do fenômeno de sublimação-condensação é considerada ser, aproximadamente, 1800 °C para combustíveis de UO_2 [13].

Conforme Kingery a passagem de óxidos combustíveis para a fase vapor requer pressões de vapor da ordem de 10^{-4} a 10^{-5} atm.

Considerando-se para a pressão de vapor do ThO_2 puro o valor mínimo de 10^{-5} atm a sua temperatura de sublimação correspondente seria, conforme [13], de 2400°C.

Sendo assim, é previsto para óxidos mistos de $(\text{Th,U})\text{O}_2$ uma temperatura de reestruturação entre 1800° e 2400°C, conforme a composição do combustível.

2.7 Ponto de Fusão

Para o combustível ThO_2 -5% UO_2 , conforme mostrado em [2], o ponto de fusão é de ~ 3250°C.

Com relação ao efeito da irradiação sobre o ponto de fusão do ThO_2 e soluções sólidas de $(\text{Th,U})\text{O}_2$ não há dados experimentais disponíveis. Entretanto, conforme [14], não deixa de ser razoável con

siderar uma diminuição aproximadamente linear do ponto de fusão destes materiais com a queima, similar àquela do UO_2 determinada por Christensen [15], a uma razão de $32^\circ C/10.000 \text{ MWd/tonMP}$.

3. IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO CARO PARA O COMBUSTÍVEL $ThO_2-5\%UO_2$

A implementação do código CARO-D3 para o combustível $ThO_2-5\%UO_2$ exigiu algumas modificações para o cálculo de:

- queima;
- expansão térmica;
- distribuição radial de fontes de calor; e
- calor armazenado.

A consideração das demais propriedades físicas pode ser feita sem modificações internas no programa.

Os dados sobre a distribuição radial de fontes de calor, no caso do $ThO_2-5\%UO_2$, ainda não estão disponíveis.

Neste trabalho foi sempre considerado uma distribuição radial uniforme de fontes de calor e igual àquela na região anular mais externa da pastilha combustível de $ThO_2-5\%UO_2$. Esta consideração leva a cálculos de temperaturas do combustível superiores à realidade.

Para o UO_2 a distribuição radial de fontes de calor não é uniforme, sendo usada aquela programada para o CARO.

Propriedades materiais do $ThO_2-5\%UO_2$, como:

- densidade do combustível;
- porosidade aberta;
- nitrogênio quimicamente ligado ou adsorvido; e
- liberação de gás residual, estão relacionados com a

fabricação do combustível, a qual ainda não está totalmente definida. Tendo isto em vista, consideraremos que o combustível $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ possui, para as propriedades acima, exatamente os mesmos valores do UO_2 -padrão. Outras propriedades menos importantes, mas que são necessárias para o código CARO e estão relacionadas com a fabricação, foram, também, tomadas com valores iguais ao do UO_2 -padrão.

3.1 Cálculos Iniciais

Tomou-se uma vareta combustível como aquela apresentada na Fig. 5 e fêz-se cálculos tipo "canal quente" para potências lineares até 650 W/cm. Supôs-se que a vareta estava sendo irradiada no reator DIDO no canal 2V6 do circuito experimental de irradiação LV9 [16]. Fizemos os cálculos para dois casos: vareta carregada com $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ e com UO_2 , para fins de comparação.

3.2 Temperatura da Vareta Combustível

Para o projeto de uma vareta combustível, é tomado como limite de projeto, que numa vareta combustível, mesmo sob as piores condições de operação e sob a maior sobre-potência possível, o ponto de fusão do combustível não seja atingido. Com o estabelecimento deste limite, fica eliminada a relocação instantânea do combustível fundido para as partes inferiores da vareta. Além do mais evita-se com isto que, do aumento de volume resultante da fusão do combustível, aconteça uma deformação adicional do revestimento. Para compensar esta deformação é ainda necessário prever um determinado espaço na vareta (porosidade, furo central, etc).

A máxima temperatura da vareta se encontra no canal quente, no início da operação no reator.

Esta temperatura é calculada simultaneamente com um fator de sobre-potência e para as piores condições, ou seja:

- máxima folga diametral tolerada;
- mínima densidade do combustível tolerada;
- densificação do combustível conservativa (encolhimento

volumétrico imediato e isotrópico do combustível de 2,1%);

- relocação mínima de 20%.

Estas considerações levam a uma redução da transferência de calor através da folga diametral e a altas temperaturas centrais no combustível.

A partir da temperatura superficial do tubo de revestimento $t_{H,a}$ as temperaturas na vareta são calculadas através das seguintes equações:

3.2.1 Temperatura da Parede Interna do Tubo de Revestimento

$$t_{H,i} : \quad t_{H,i} = t_{H,a} + \frac{q'}{2 \cdot \pi \cdot k_H} \cdot \ln \frac{d_{H,a}}{d_{H,i}} \quad (7)$$

onde:

$t_{H,i}$: °C;

q' = potência linear, W/cm;

K_H = condutividade térmica do tubo de revestimento, W/cm.°C;

$d_{H,a}$; $d_{H,i}$ = diâmetro externo e interno do tubo de revestimento, respectivamente, mm.

3.2.2 Temperatura Superficial do Combustível

$$t_R = t_{H,i} + \frac{q'}{\pi \cdot d_B \cdot K_{sp}} \quad (8)$$

onde:

d_B = diâmetro externo da pastilha combustível, cm.

O coeficiente de transferência de calor K_{sp} através da folga diametral entre o tubo de revestimento e a pastilha é calculado, em princípio, através do método de Ross e Stoute [1]:

$$K_{sp} = \frac{K_{gás}}{S_E + S_R + (\ell_1 + \ell_2)} \quad (9)$$

onde:

$K_{gás}$ = condutividade térmica do gás, W/cm⁰C

S_E = folga diametral de operação, cm;

S_R = folga diametral mínima possível, causada pela rugosidade do tubo de revestimento e da pastilha, cm.

As distâncias de extrapolação $\ell_1 + \ell_2$ descrevem a transferência de calor nas duas superfícies limites sólido-gás.

3.2.3 Temperaturas no Combustível

O cálculo das temperaturas é realizado da seguinte maneira:

No programa CARO-D a pastilha é subdividida em N elementos anulares com a mesma massa. Avalia-se a potência da vareta q' nas fronteiras de cada elemento anular (para o caso do combustível ThO₂-5%UO₂ foram adotados valores uniformes para q' , conforme já mencionado). A solução da equação diferencial de condução de calor fornece para um único elemento anular que:

$$Q_i = \int_{t_{i+1}}^{t_i} K(t) dt = \frac{q'_{2i} - q'_{1i}}{4\pi} + \frac{r_i^2 \cdot q'_{2i} - r_{i+1}^2 \cdot q'_{1i}}{2\pi(r_{i+1}^2 - r_i^2)} \cdot \ln \frac{r_i}{r_{i+1}} \quad (10)$$

onde:

K = condutividade térmica do combustível, W/cm⁰C;

índice 2 = lado externo do anel;

índice 1 = lado interno do anel.

Além do mais há a seguinte relação:

$$\int_0^{t_i} K(t)dt = \int_0^{t_{i+1}} K(t)dt + Q_i \quad (11)$$

No programa CARO-D a integral de condutividade térmica está programada de forma tabular para o UO_2 (e para o $ThO_2-5\%UO_2$ a condutividade térmica é introduzida como dado de entrada de forma tabular, para depois ser calculada a integral de condutividade térmica), tal que a temperatura para cada elemento anular pode ser calculada.

Particularidades sobre este cálculo são fornecidos na referência [1].

Para a correção da porosidade sobre a condutividade térmica, são utilizados os seguintes fatores:

para o UO_2 , a relação de Loeb [1].

$$K_p = \left[\frac{1 - 2,5.P}{0,875} \right] K_{95} \quad (12)$$

e para $ThO_2-5\%UO_2$, a relação de Maxwell-Eucken, conforme o item 2.3:

$$K_p = 1,114 \left[\frac{1 - P}{1 + \beta P} \right] K_{95} \quad (13)$$

onde:

$\beta = 1,17$ (constante ajustada);

P = porosidade;

K_{95} = condutividade térmica do combustível para 5% de porosidade.

No início o reator é apenas lentamente dirigido para 100% da potência. O combustível densifica na região mais quente através do crescimento dos grãos colunares e formação do canal central. Este fe-

: 1 237

nômeno se processa bastante rápido [17]. Portanto, será considerado que na região dos grãos colunares o combustível atinja imediatamente uma densidade de 97% DT. Segundo está exposto no item 2 e 6, a formação dos grãos colunares deve se iniciar para temperaturas compreendidas entre 1800°C e 2400°C no caso do ThO₂. Como a formação do canal central e dos grãos colunares tem um efeito de diminuir as temperaturas no combustível, será considerada a situação piorada, ou seja, que os grãos colunares no ThO₂-5%UO₂ acontecem para temperaturas maiores que 2400°C. Para o UO₂, adota-se a temperatura mínima de 1750°C para a formação dos grãos colunares.

Para o cálculo foram adotados os seguintes valores:

- densidade teórica do combustível:

$$\text{UO}_2 - 10,96\text{g/cm}^3$$

$$\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2 - 10,04\text{g/cm}^3$$

- densidade relativa: 95% DT

- diâmetro externo do tubo de revestimento:

$$d_{H,a} = 10,75 \pm 0,005 \text{ mm}$$

- diâmetro interno do tubo de revestimento:

$$d_{H,i} = 9,30 \pm 0,004 \text{ mm}$$

- diâmetro da pastilha combustível:

$$d_B = 9,11 \pm 0,01 \text{ mm}$$

As faixas de tolerância acima são aquelas adotadas pela KWU.

O problema da densificação já foi teoricamente analisado para o caso do ThO₂-5%UO₂ [18]. Para uma distribuição de porosidade considerada otimizada para o comportamento dimensional do combustível, dentro das incertezas na determinação das taxas de densificação, um en

colhimento volumétrico instantâneo e isotrópico da matriz de combustível de 2,1% (valor adotado para o UO_2), já deve ser um valor bastante conservativo, também para o $ThO_2-5\%UO_2$ e foi adotado no cálculo.

As típicas potências lineares de canal quente em PWR's, com fator de sobre-potência de 12%, encontram-se na faixa de 600 W/cm. O cálculo abrangeu potências lineares de até 650 W/cm.

Adotando-se o valor máximo para a folga diametral de enchimento de 0,240 mm, calculamos com o código CARO-D3 uma temperatura central máxima de:

$$t_{z,max} = 2817^{\circ}C \text{ para o } ThO_2-5\%UO_2, \text{ e}$$

$$t_{z,max} = 2570^{\circ}C \text{ para } UO_2$$

Ambos os valores calculados estão seguramente abaixo dos respectivos pontos de fusão: $2800^{\circ}C$ para o UO_2 e $3250^{\circ}C$ para o $ThO_2-5\%UO_2$.

Com o aumento da queima, o ponto de fusão abaixa [15]. Para uma queima de 50 MWd/kgU, o ponto de fusão do UO_2 não se torna inferior a $2640^{\circ}C$, enquanto que para a mesma queima o ponto de fusão do $ThO_2-5\%UO_2$ não seria inferior a $3090^{\circ}C$ (veja item 2.7). Deve ser salientada que a potência de canal quente não é mais atingida para queimas altas, tal que as temperaturas acima calculadas são reduzidas consideravelmente. Mesmo sem considerar este fato, elas estariam ainda inferiores aos respectivos mais baixos pontos de fusão.

A máxima temperatura do combustível $ThO_2-5\%UO_2$ esteve 9,7% abaixo do mais baixo ponto de fusão, enquanto que a máxima temperatura do UO_2 esteve 2,7% abaixo do mais baixo ponto de fusão. Salienta-se, mais uma vez, que foi considerada distribuição radial uniforme de fontes de calor e igual à da região anular mais externa da pastilha para o caso do combustível $ThO_2-5\%UO_2$.

A Fig. 6 mostra uma comparação dos perfis radiais de temperatura do UO_2 e do $ThO_2-5\%UO_2$ para uma potência linear de 650 W/cm e para as piores condições. Apesar do $ThO_2-5\%UO_2$ apresentar uma maior temperatura central, a sua temperatura média de pastilha é inferior ao

: : : : 1 289

UO_2 (1527°C do $ThO_2-5\% UO_2$ contra 1564°C do UO_2).

A Fig. 7 apresenta as temperaturas centrais em função da potência linear para os dois combustíveis. As temperaturas externas das pastilhas em função da potência linear podem ser apreciadas na Fig. 8.

O código CARO-D3 calculou para a vareta combustível carregada com $ThO_2-5\%UO_2$ um valor para a quantidade de calor armazenada de 86 KJ (para 650 W/cm), contra 123 KJ para a vareta combustível carregada com UO_2 . Este fato decorre da menor capacidade calorífica do $ThO_2-5\%UO_2$ em relação ao UO_2 (Fig. 4). A menor quantidade de calor armazenada na vareta com $ThO_2-5\%UO_2$ é bastante interessante para a análise do comportamento da vareta combustível sob as condições de um acidente com perda de refrigerante (LOCA).

3.3 Deformação do Revestimento da Vareta Combustível Causada por Diferentes Expansões Térmicas do Revestimento e do Combustível

Caso ocorra um canal quente em uma vareta combustível com folga diametral mínima tolerada, o que só pode ocorrer no início da operação no reator, o revestimento pode ser deformado pelo combustível expandido.

Para a avaliação da deformação do tubo de revestimento, analisa-se o canal quente como em 3.2.

O cálculo da expansão térmica do revestimento é realizado para a condição mais desfavorável. Este caso ocorre quando em uma vareta combustível se toma a menor densidade tolerada de combustível, pois deste caso resultam as maiores temperaturas e, conseqüentemente, as maiores expansões térmicas do combustível.

3.3.1 Deformação do revestimento na direção tangencial

Esta deformação é calculada através de:

$$\epsilon_t = \frac{1}{d_{H,m}} (W\Delta d_B + S\Delta d_B + NS\Delta d_B) -$$

1 290

$$- \frac{1}{d_{H,m}} (S_E + W\Delta d_H) + \epsilon_{t,k} \quad (14)$$

para $\epsilon_t > \epsilon_{t,pk}$

onde:

$d_{H,m}$ = diâmetro médio do tubo de revestimento, mm;

$W\Delta d_B$ = expansão térmica do combustível, mm;

$S\Delta d_B$ = deformação por inchamento do combustível, mm;

$NS\Delta d_B$ = variação do diâmetro do combustível por densificação, mm;

SE = folga diametral de enchimento, mm;

$W\Delta d_H$ = expansão térmica do revestimento, mm;

$\epsilon_{t,pk}$ = deformação elástica do revestimento causada pela pressão do refrigerante.

$\epsilon_{t,K}$ = deformação por fluência do revestimento.

Materiais cerâmicos como o UO_2 e $ThO_2-5\%UO_2$ são essencialmente não-dúcteis e frágeis. Portanto, para o cálculo da expansão térmica da pastilha combustível, parte-se da pastilha já fraturada por tensão térmica.

Para um fragmento cuneiforme da pastilha, Fig. 9, a expansão térmica no sentido radial é dada por:

$$\Delta r_w = \sum_{i=1}^N \epsilon_w(\bar{t}_i) \cdot (r_{i+1} - r_i) + \epsilon_w(t_z) r_z \quad (15)$$

onde:

N = número de anéis de combustível;

r_i = raio interno para o anel i , mm;

r_{i+1} = raio externo para o anel i , mm;

r_z = raio do canal central, mm;

t_z = temperatura central, °C;

$\epsilon_w(\bar{t}_i)$ = expansão térmica média do anel elementar i relativa ao estado frio com

$$\bar{t}_i = \frac{1}{2} (t_{i+1} + t_i) \quad (16)$$

A expansão térmica do raio interno do tubo de revestimento é calculada através da seguinte relação:

$$\Delta d_{H,i} = d_{H,i} \int_{20^\circ\text{C}}^{t_{H,m}} \alpha(t) dt \quad (17)$$

Esta equação não leva em conta o transporte de calor através do revestimento e, em consequência, também as tensões térmicas. Mas ela conduz a resultados suficientemente precisos, uma vez que as tensões térmicas são bem pequenas.

As temperaturas e expansões térmicas são conservativamente calculadas para o canal quente com folga diametral mínima, considerando um fator de sobre-potência, não considerando densificação do combustível e com uma relocação mínima de 20%.

No cálculo da deformação do revestimento não se considera o efeito da relocação, uma vez que é assumido relocação reversível. Se o diâmetro externo da pastilha combustível ultrapassa durante o cálculo o diâmetro interno do tubo de revestimento, considera-se então um bloqueamento sem resistência aos fragmentos da pastilha combustível pelo revestimento.

A Tabela 1 mostra as temperaturas das varetas calculadas para $q' = 650$ W/cm. As Fig. 10 e 11 mostram a variação relativa do diâmetro do revestimento e do combustível, assim como a variação relativa do comprimento do combustível para o $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$. As Fig. 12 e 13 fazem o mesmo para o UO_2 .

Com as temperaturas calculadas foram obtidos:

1 292

para $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$:

$$\frac{W\Delta dB}{d_{H,m}} = 1,7801 \%$$

$d_{H,m}$

$$\frac{W\Delta dH}{d_{H,m}} = 0,2031 \%$$

$d_{H,m}$

para UO_2 :

$$\frac{W\Delta dB}{d_{H,m}} = 1,8173 \%$$

$d_{H,m}$

$$\frac{W\Delta dH}{d_{H,m}} = 0,2031 \%$$

$d_{H,m}$

Para o início da operação é válido que:

$$S\Delta dB = \epsilon_{t,k} = 0$$

Com a suposição de que a densificação pode ser desprezada, a equação (14) se reduz a:

$$\epsilon_t = \frac{1}{d_{H,m}} \left[W\Delta dB - (S_E + W\Delta dH) \right] \quad (18)$$

Assim, a deformação tangencial no canal quente é:

para $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$:

$$\epsilon_t = 0,178 \%$$

para UO_2 :

$$\epsilon_t = 0,215 \%$$

3.3.2

Deformação do revestimento na direção axial

No cálculo considera-se que a coluna de pastilhas pode se

deslocar relativamente ao tubo de revestimento até o ponto onde a folga diametral é fechada e aparece uma pressão de contato no revestimento. A partir deste ponto o revestimento é axialmente deformado pelo combustível, uma vez que com a deformação tangencial do revestimento rapidamente cresce a pressão radial entre revestimento e combustível e evita um deslizamento da pastilha relativamente ao tubo de revestimento. Das Fig. 10 e 12 conclui-se que o ponto a partir do qual o revestimento passa a ser axialmente deformado pelo combustível é determinado pela potência linear de 617 W/cm para o $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ e 595 W/cm para o UO_2 . As respectivas deformações axiais nestas potências obtêm-se das Fig. 11 e 13:

para $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$:

$$\left(\frac{W\Delta l_B}{l_B}\right)_{\sigma=0} = 0,564\%$$

para UO_2 :

$$\left(\frac{W\Delta l_B}{l_B}\right)_{\sigma=0} = 0,590\%$$

No cálculo da deformação axial das pastilhas adotou-se o raio das concavidades ("dishing") igual a 3,955 mm. A deformação axial do revestimento, a $q'_{\max} = 650$ W/cm, calcula-se como segue:

$$\epsilon_a = \left(\frac{W\Delta l_B}{l_B}\right) q'_{\max} - \left(\frac{W\Delta l_B}{l_B}\right)_{\sigma=0} - \epsilon_{ax,pk} \quad (19)$$

onde:

$\epsilon_{ax,pk}$ = deformação axial do revestimento devida à pressão do refrigerante.

Assim, são obtidos os seguintes valores:

para $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$:

$$\epsilon_a = 0,596\% - 0,564\% - 0,012\%$$

$$\epsilon_a = 0,019\% , e$$

para UO_2 :

$$\epsilon_a = 0,647\% - 0,590\% - 0,012\%$$

$$\epsilon_a = 0,045\%$$

3.3.3. Deformação efetiva do revestimento.

A deformação elástica efetiva, ϵ_{ef} , é calculada por:

$$\epsilon_{ef} = \frac{1}{1+\nu} \sqrt{\epsilon_t^2 + \epsilon_a^2 + \epsilon_r^2 - \epsilon_t \cdot \epsilon_a - \epsilon_r \cdot \epsilon_t - \epsilon_r \cdot \epsilon_a} \quad (20)$$

onde:

ν : razão de Poisson = 0,3 .

ϵ_r , deformação radial, é calculada das equações da elasticidade para estado triaxial de tensão, onde $\sigma_r = -p_k$ (pressão do refrigerante). Obtem-se que [1]:

$$\epsilon_r = \frac{\sigma_r}{E} \left(1 - \frac{2\nu^2}{1-\nu} \right) - \frac{\nu}{1-\nu} (\epsilon_t + \epsilon_a) \quad (21)$$

onde E : módulo de Young = 99408 - 65,4t (22)
sendo t em $^{\circ}C$, conforme [1].

A temperatura média do zircaloy calculada para 650 W/cm é de 377,5 $^{\circ}C$. Nesta temperatura o módulo de Young é dado por:

$$E = 99408 - 65,4 \times 377,5 = 74717 \frac{N}{mm^2}$$

A pressão do refrigerante é:

$$p_k = 12,5 \frac{N}{mm^2}$$

Calcula-se então que:

para $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$:

$$\epsilon_r = -0,072\% , e$$

para UO_2 :

$$\epsilon_r = -0,099\%$$

Os valores obtidos para a deformação efetiva são:

para $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$:

$$\epsilon_{ef} = 0,103\% , e$$

para UO_2 :

$$\epsilon_{ef} = 0,209\%$$

A tensão efetiva σ_{ef} é dada por:

$$\sigma_{ef} = E \cdot \epsilon_{ef}.$$

Calcula-se então que:

para $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$:

$$\sigma_{ef} = 76,7 \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$$

para UO_2

$$\sigma_{ef} = 156,3 \frac{\text{N}}{\text{mm}^2}$$

Nesta temperatura do revestimento, a tensão de escoamento é $\sigma_{o,2} = 276 \text{ N/mm}^2$.

Em ambos os casos os esforços causados pelo combustível sobre o revestimento encontram-se abaixo do limite imposto pela tensão de escoamento. Além do mais deve ser salientado, que o UO_2 é plasticamente deformável para temperaturas acima de 1260°C e o $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$ pa-

ra temperaturas acima de 1500°C [19]. Assim, quando houver impedimento de deformação do combustível pelo revestimento, aquele pode fluir para dentro dos espaços disponíveis (dishing, volume das fissuras, etc), de tal maneira que as deformações axiais reais do combustível são menores que os valores acima calculados.

Note que o esforço imposto sobre o revestimento calculado nas condições aqui apresentadas é para o $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ aproximadamente metade daquele calculado para o UO_2 .

4. CONCLUSÃO

O programa CARO-D3 implementado para $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ calculou (para queima nula), nas condições acima expostas, que:

1º) em condições de pior transferência de calor através da folga entre combustível e revestimento, a vareta combustível carregada com $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$, em relação à mesma vareta combustível carregada com UO_2 apresenta:

- menor temperatura média do combustível;

- menor razão temperatura máxima/ponto de fusão. Não se observaria fusão do combustível em ambas as varetas, mesmo quando se leva em conta possível influência da queima sobre o ponto de fusão;

- menor quantidade de calor armazenado:

 - 43% a menos para 650 W/cm

 - 19% a menos para 200 a 300 W/cm.

2º) sob a pior condição de contato físico combustível-revestimento, na vareta combustível carregada com $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$, o esforço causado pelo combustível sobre o revestimento é aproximadamente 50% daquele observado na vareta carregada com UO_2 .

Na próxima etapa serão introduzidos os fatores de depressão de fluxo neste cálculo para o $\text{ThO}_2\text{-5\%UO}_2$ (queima nula). A implicação será o cálculo de uma menor temperatura do combustível. Isto nos

leva a prever que o desempenho da vareta carregada com ThO_2 -5% UO_2 será ainda mais propício do que este calculado neste trabalho.

REFERÊNCIAS

- [1] EBERLE, R. et al. - Das KWU - Brennstab-Rechenprogramm CARO-D. Erlangen, Kraftwerk Union, 01.11.77. Technischer Bericht R.B. 21/191/77.
- [2] SABIONI, A.C.S.- PINTO, L.C.M.- RIBEIRO, A.P.R. - Dados de Óxidos Mistos de Tória-Urânia para Adaptação do Código CARO. Belo Horizonte, NUCLEBRÁS, CDTN 02.04.80. 30P. N.T. DETR.PD 098/80.
- [3] DIAS, M.S. & SABIONI, A.C.S. - Condutividade Térmica de Soluções Sólidas de $(\text{Th,U})\text{O}_2$. Belo Horizonte, NUCLEBRÁS CDTN, 19.06.80, 15P. NT DETR.PD 108/80.
- [4] IAEA. Thermal Conductivity of Uranium Dioxide. Technical Reports Series Nº 59, IAEA, Vienna, 1966.
- [5] MÜLLER, E.M. - Die Wärmeleitfähigkeit von UO_2 in Abhängigkeit von Porosität und Temperatur. ITB 71.31, 1971
- [6] SPENNATI, M. - Literaturstudie über die Wärmeleitfähigkeit von UO_2 . SAG - RT 52, Aktenvermerk 83/72, 1972.
- [7] SABIONI, A.C.S. & DIAS, M.S.- Expansão Térmica de Soluções Sólidas de $(\text{Th,U})\text{O}_2$. Belo Horizonte. NUCLEBRÁS, CDTN . 02.07.80. N.T. DETR.PD 110/80.
- [8] CONWAY, J.B. et al.- "The Thermal Expansion and Heat Capacity of UO_2 to 2200°C. Trans. Amer. Nucl. Soc., 6:153 June 1963.
- [9] MARCHANDISE, H. - EUR 4033 f (1968).
- [10] RUBIN, B.F. - GEAP 13582 (1970)

- [11] YOUNG, R.A. - Model for the electronic contribution to the thermal and transport properties of ThO_2 , UO_2 and PuO_2 in the solid and liquid phases. Journal of Nuclear Materials, 87:283-296, 1979
- [12] KERRISK, J.F. & CLIFTON, D.G. - Smoothed Values of the Enthalpic and Heat Capacity of UO_2 . Nucl. Techn., 16: 531, 1972.
- [13] NEIMARK, L.A. - Recrystallization of ThO_2 - UO_2 during irradiation. Trans. Amer. Nucl. Soc., 5 (1): 226-228, 1968
- [14] BELLE, J. & BERMAN, R.M. - Properties of Thoria and Thoria-Urania: A Review (LWBR Development Program). Bettis Atomic Power Laboratory, West Mifflin Pa. USA. June 1978 . 133p (WAPD-TM-1340)
- [15] CHRISTENSEN, J.A. et al. - Melting Point of Irradiated Uranium Dioxide. In: - Trans. Amer. Nucl. Soc., 7 (2):390-391 , Nov. 1964.
- [16] REICHARDT, K. - Bestrahlungstestplan 1981 für DWR-Brennstäbe mit Thorium als Brutstoff. Erster Entwurf. KFA, Jülich, 8.8.80. Technische Notiz KFA-ZBB-TN-23/80.
- [17] ARAUJO GOMES, P.A.M et al. - Avaliação da Experiência de Irradiação de Varetas NUCLEBRÁS no Reator R-2 de Studsvik Suécia. NUCLEBRÁS IEN. Sede. Nota Técnica DICOB/SETIRR 01/77. Dez. 1977.
- [18] LAMEIRAS, F.S. & ASSMANN, H. - Über das Dimensionsverhalten von (Th,U) O_2 -Brennstoffen. Kraftwerk Union, Erlangen , 12.08.80. Technischer Bericht B 22/73/80.
- [19] WOLFE, R.A.F & KAUFMAN, S.F. - Mechanical Properties of Oxide Fuels . Pittsburgh, Bettis Atomic Power Laboratory, 1967, P.33. (WAPD-TM-587).

TABELA 1

Temperaturas das varetas calculadas para:

$$q' = 650 \text{ W/cm}$$

$$\text{folga diametral de enchimento} = 0,140 \text{ mm}$$

$$\text{relocação} = 20\%$$

sem densificação

$$\text{densidade} = 95\% \text{ DT}$$

Combustível	$t_{H,a}$ °C	$t_{H,i}$ °C	t_r °C	t_z °C
ThO ₂ -5%UO ₂	331	424	478	2440
UO ₂	331	424	479	2303

$t_{H,a}$ = temperatura externa do tubo de revestimento

$t_{H,i}$ = temperatura interna do tubo de revestimento

t_r = temperatura externa da pastilha

t_z = temperatura central da pastilha

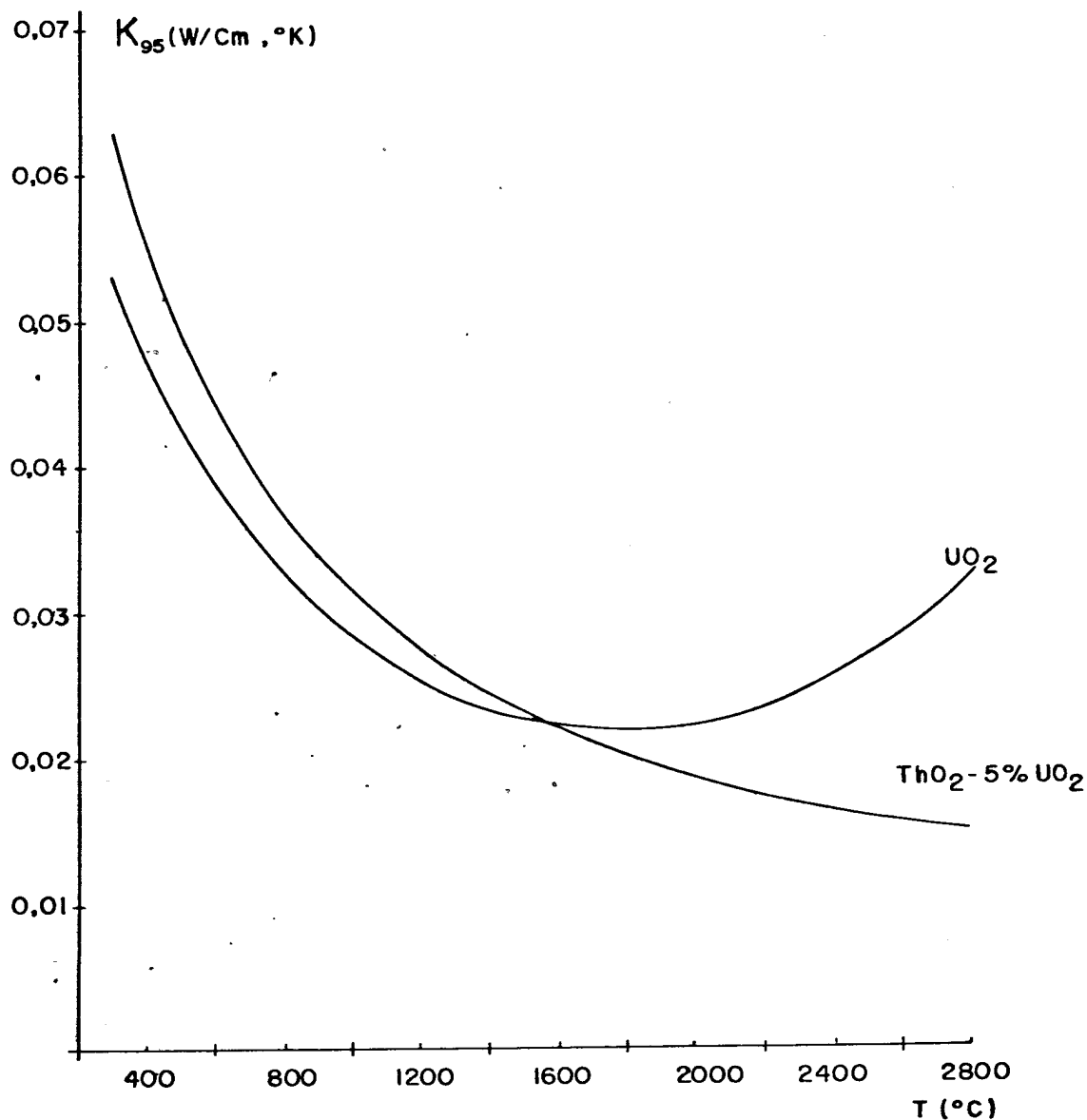


FIGURA 1 - CONDUTIVIDADES TÉRMICAS DO UO_2 E $ThO_2-5\%UO_2$ AMBOS 95% DT.

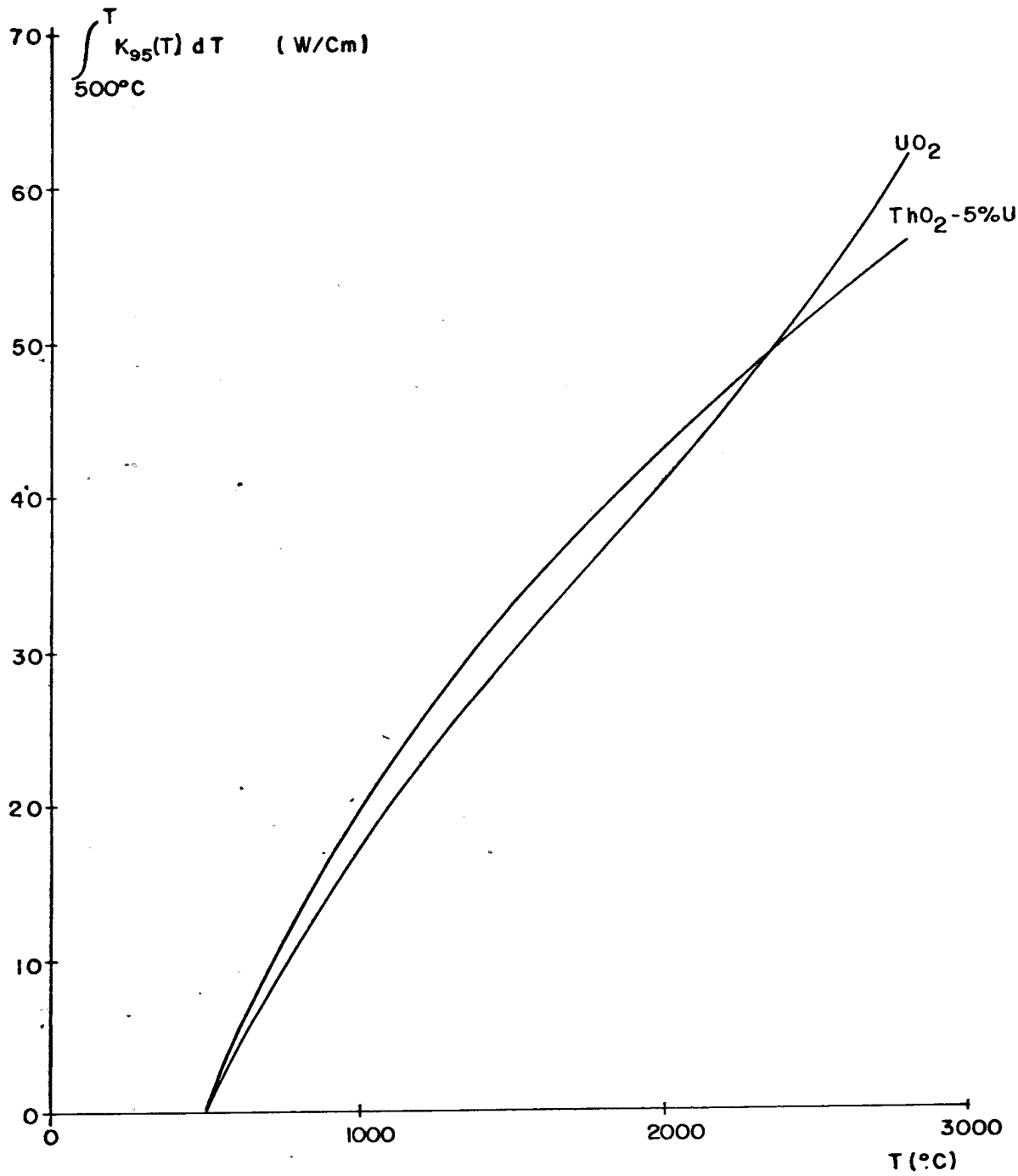


FIGURA 2 - CURVAS DE $\int K(T) dT$ PARA O UO_2 E $\text{ThO}_2-5\%\text{UO}_2$.
AMBOS 95% DT.

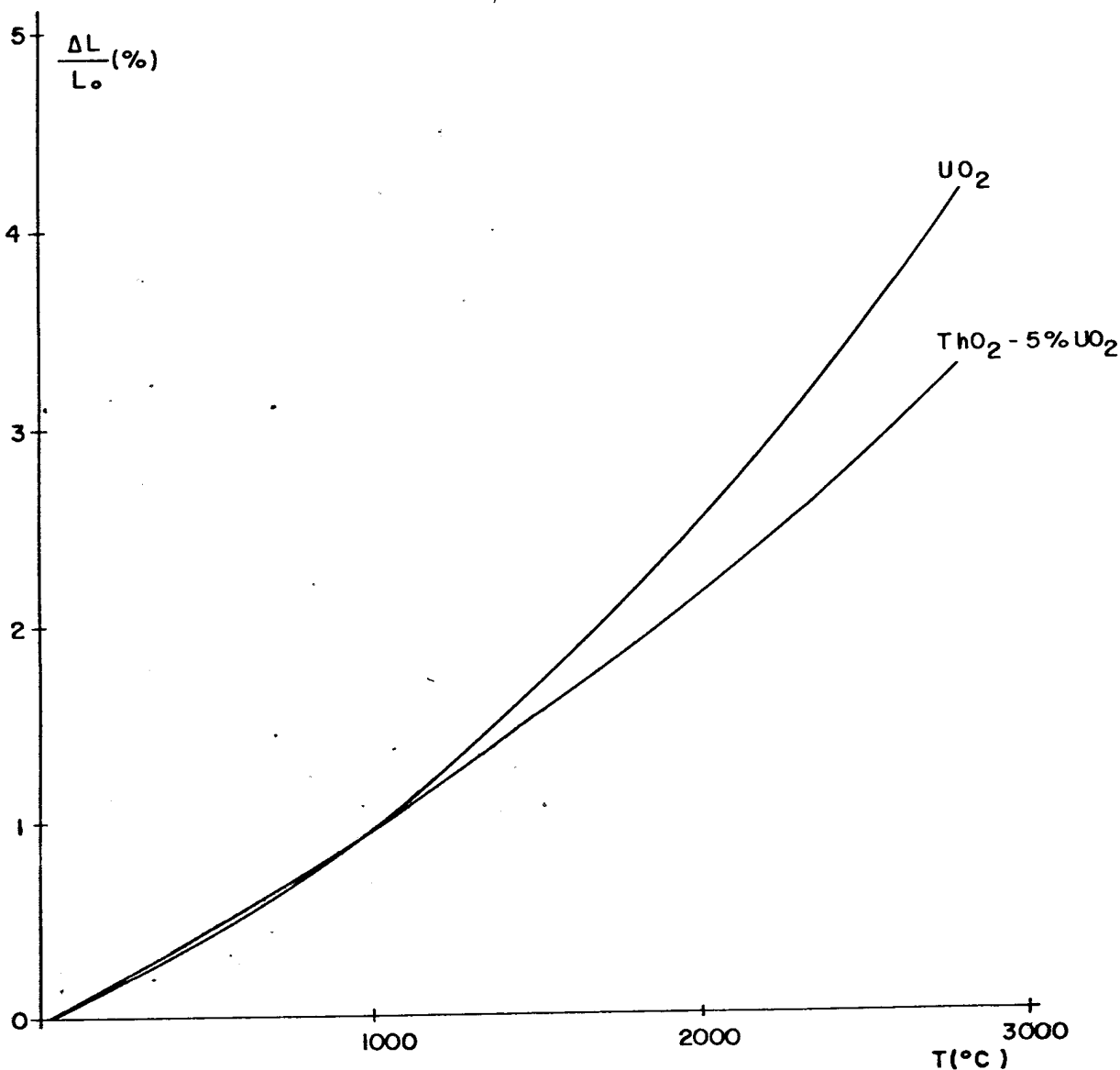


FIGURA 3 - EXPANSÕES TÉRMICAS LINEARES DO UO_2 E $\text{ThO}_2 - 5\% \text{UO}_2$

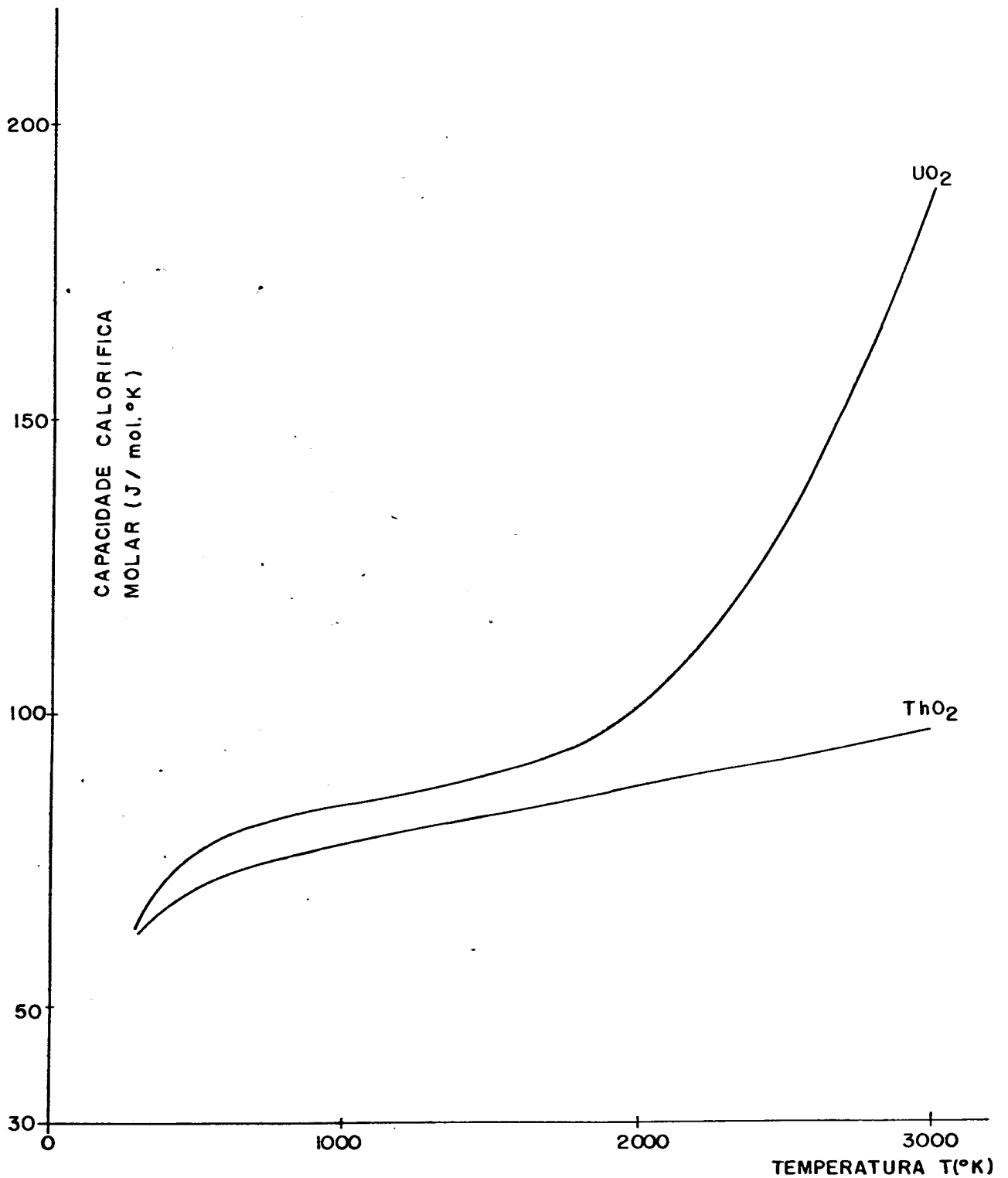
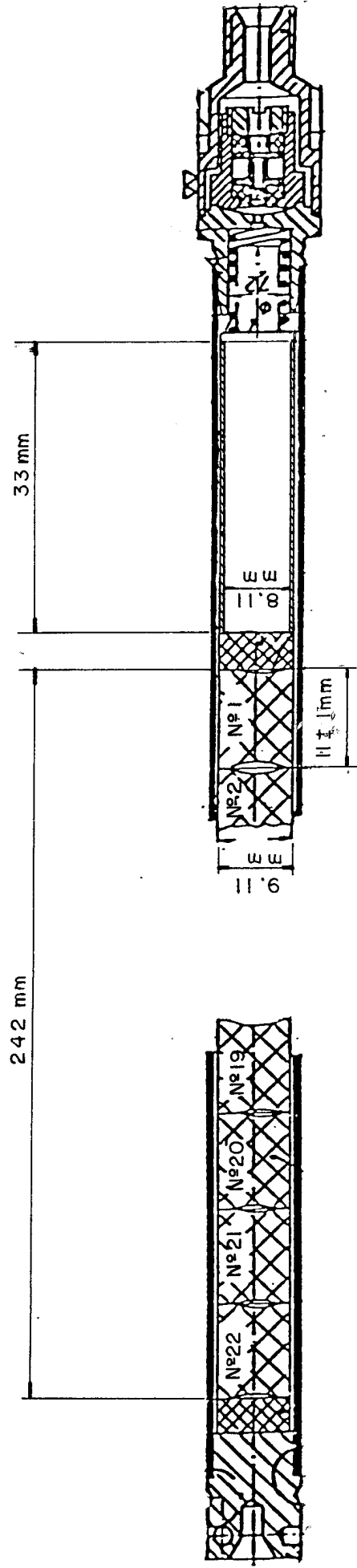


FIGURA 4- CAPACIDADES CALORÍFICAS MOLARES DO UO₂ E ThO₂.

1 304

DETR.PD-073/79



Pressão de enchimento = 22,5 bar

FIGURA 5 - SEÇÃO LONGIDUTINAL DA VARETA-TESTE CONSIDERADA PARA OS CÁLCULOS.

NUCLEBRÁS
DETR.PD 235/80

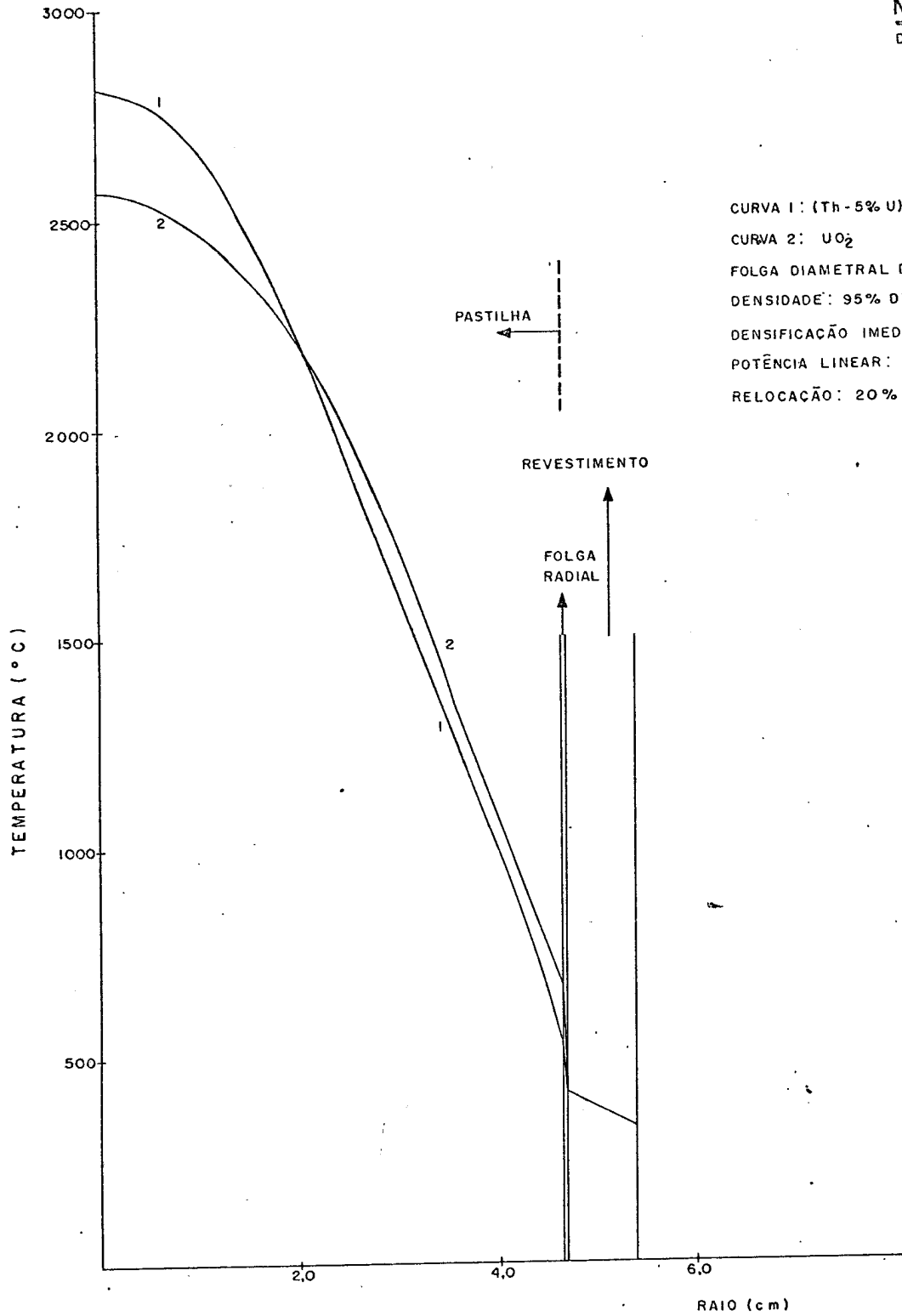


FIGURA 6 - PERFIS RADIAIS DE TEMPERATURA PARA VARETAS À BASE DE (Th-5%U)O₂ E UO₂ (QUEIÇA - 0 MWd/Kg MP)

ESCALA = 4:1 30 x 100 mm

Fig. 6

1 306

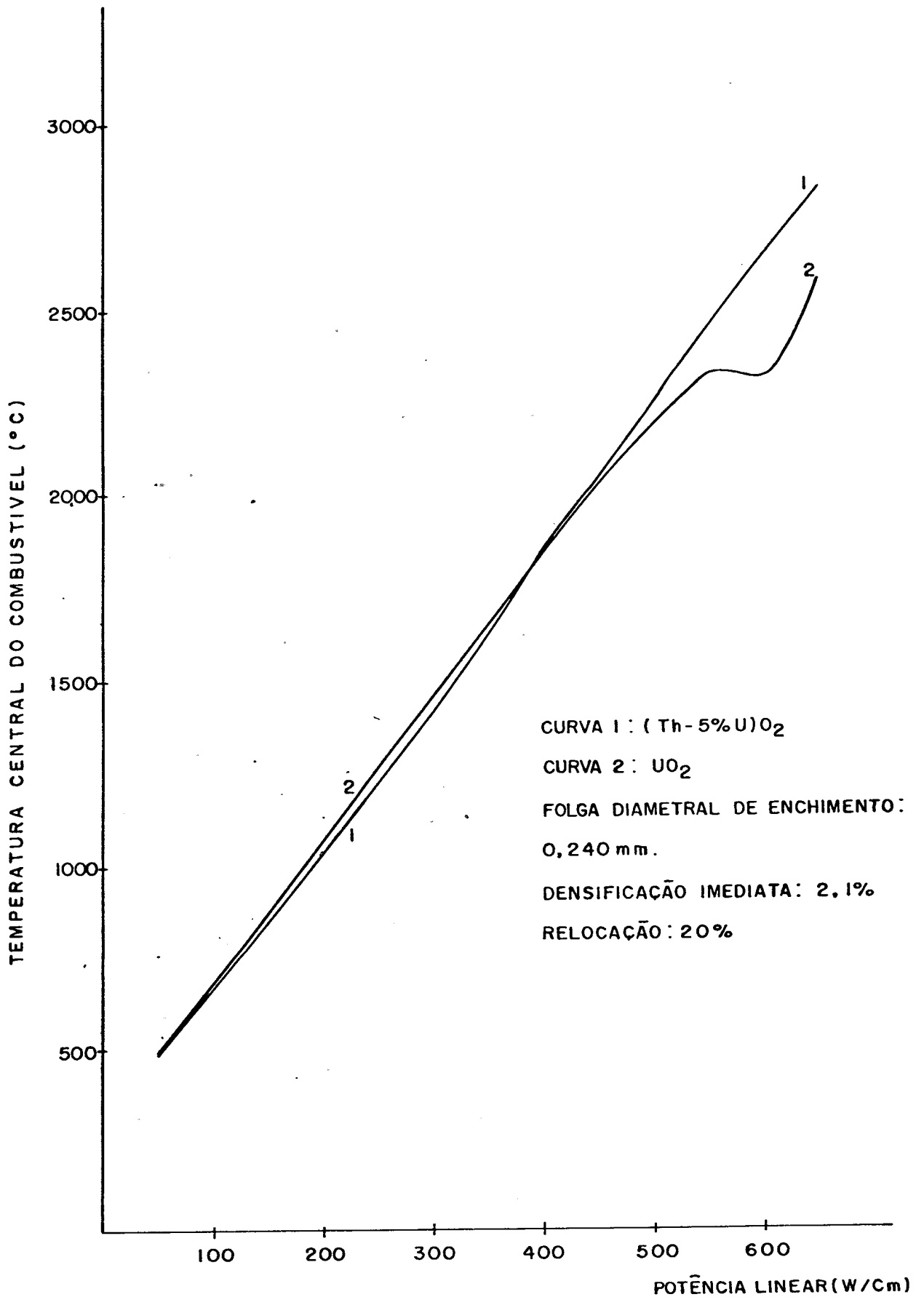


FIGURA 7 - TEMPERATURA CENTRAL DO COMBUSTIVEL EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR. (QUEIMA = 0 MWd/Kg MP)

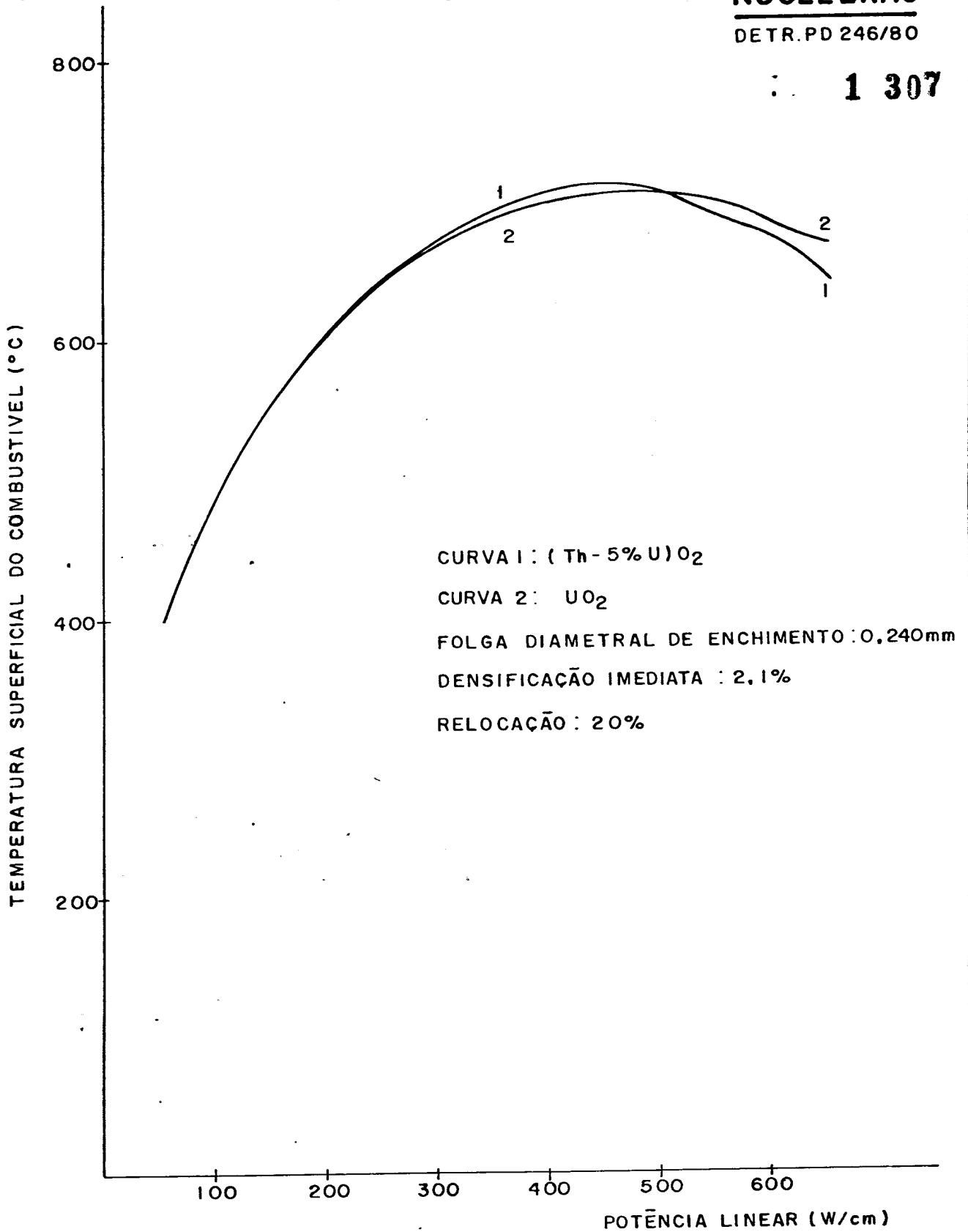


FIGURA 8 - TEMPERATURA SUPERFICIAL DO COMBUSTIVEL EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR.
(QUEIMA = 0 MWd / kg MP)

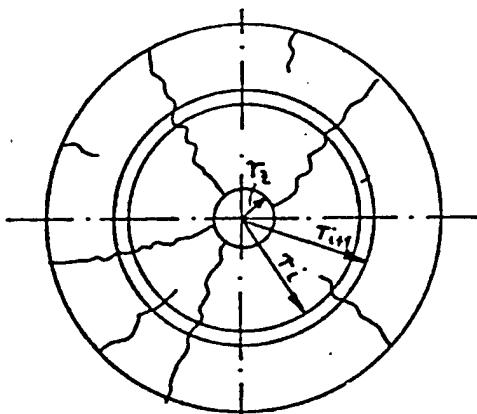


FIGURA 9 - SEÇÃO TRANSVERSAL DE PASTILHA COM FRAGMENTOS CUNEIFORMES.

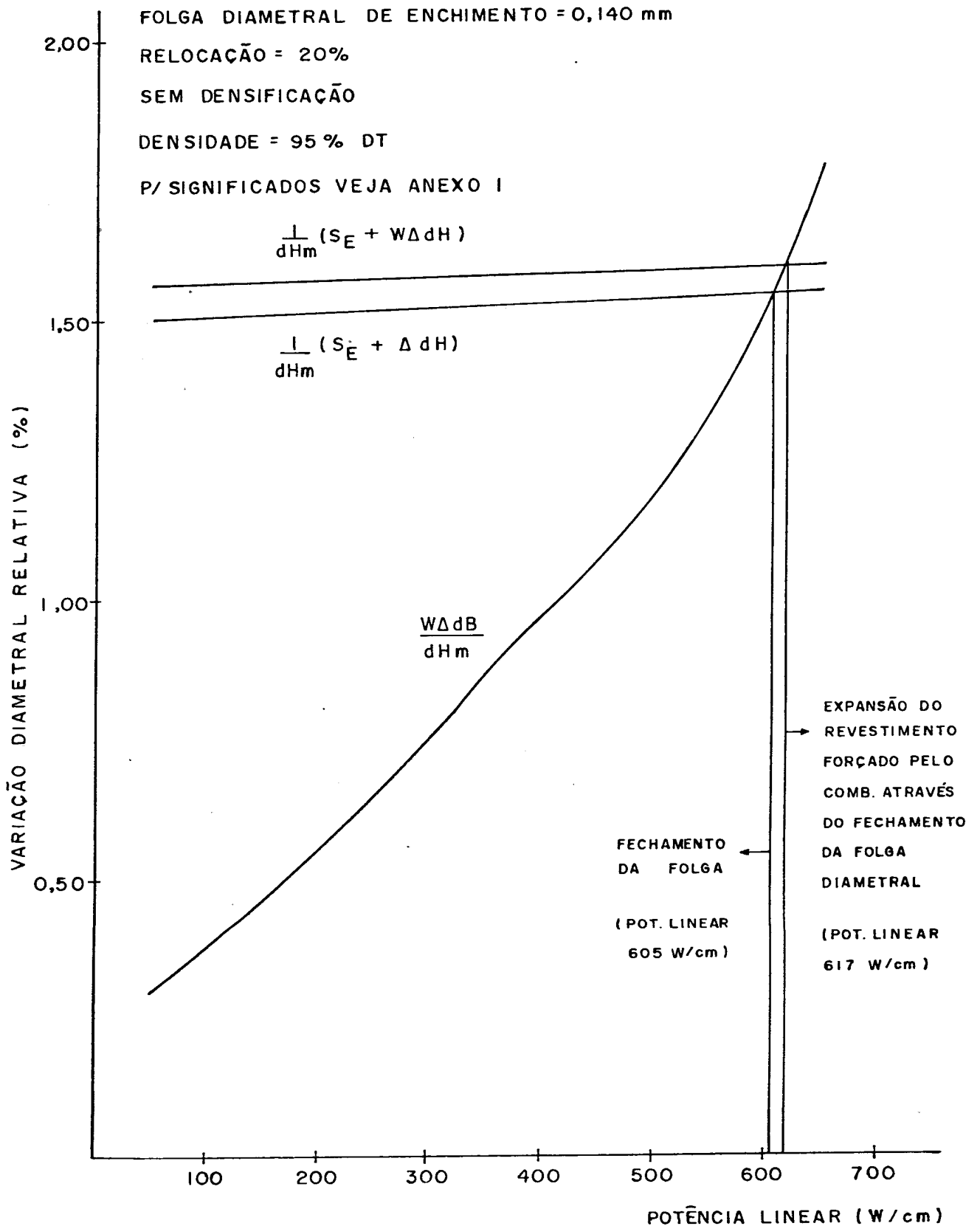


FIGURA 10 - VARIACÃO RELATIVA DIAMETRAL DO COMBUSTIVEL E DO REVESTIMENTO EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR.

(QUEIMA = $0Mw d / kg U + Th$)

COMBUSTIVEL $ThO_2-5\% UO_2$

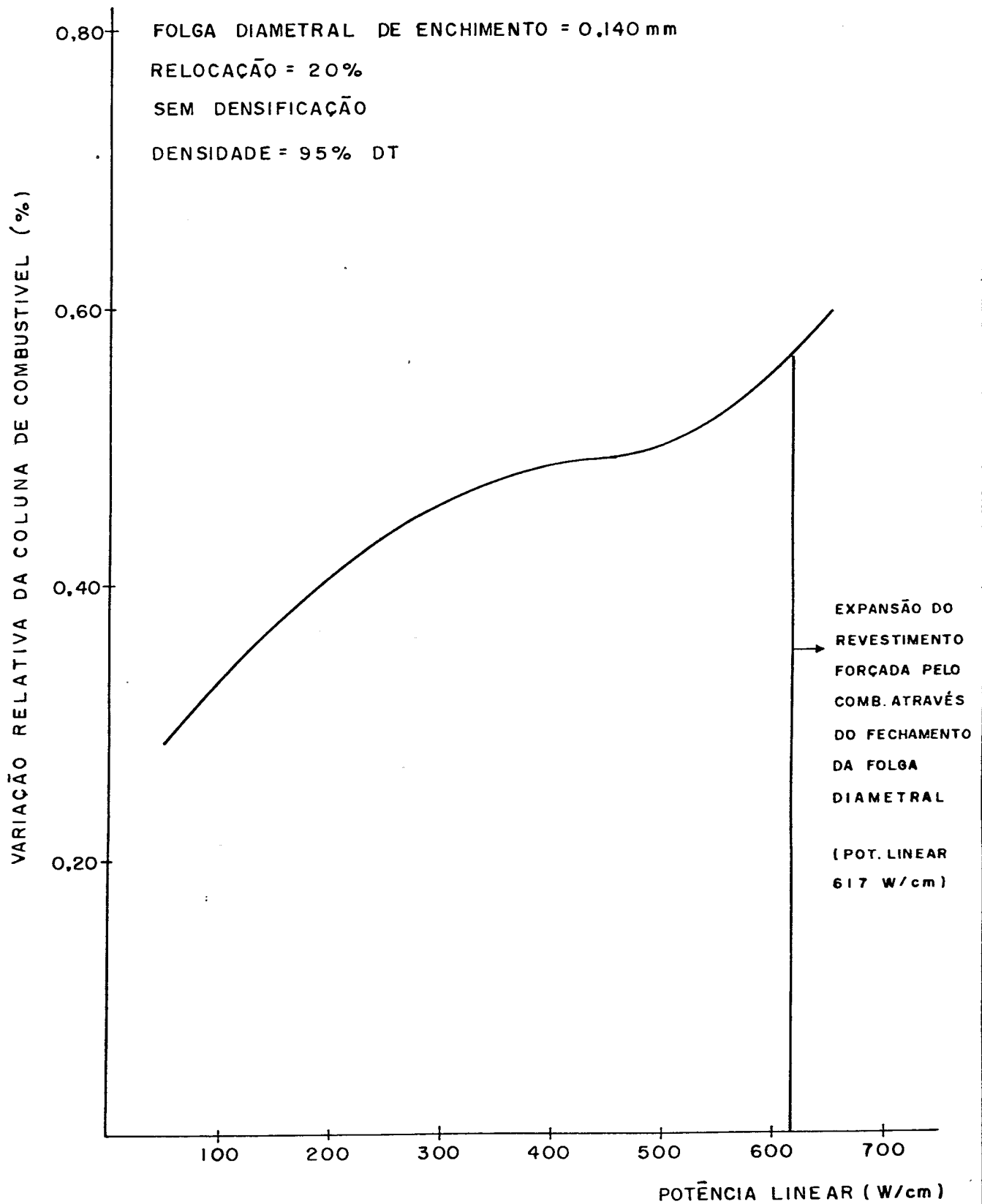


FIGURA II - VARIAÇÃO RELATIVA DA COLUNA DE COMBUSTIVEL EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR (QUEIMA = 0 MWd/kmU+Th) COMBUSTIVEL; ThO₂ - 5% UO₂

1 311

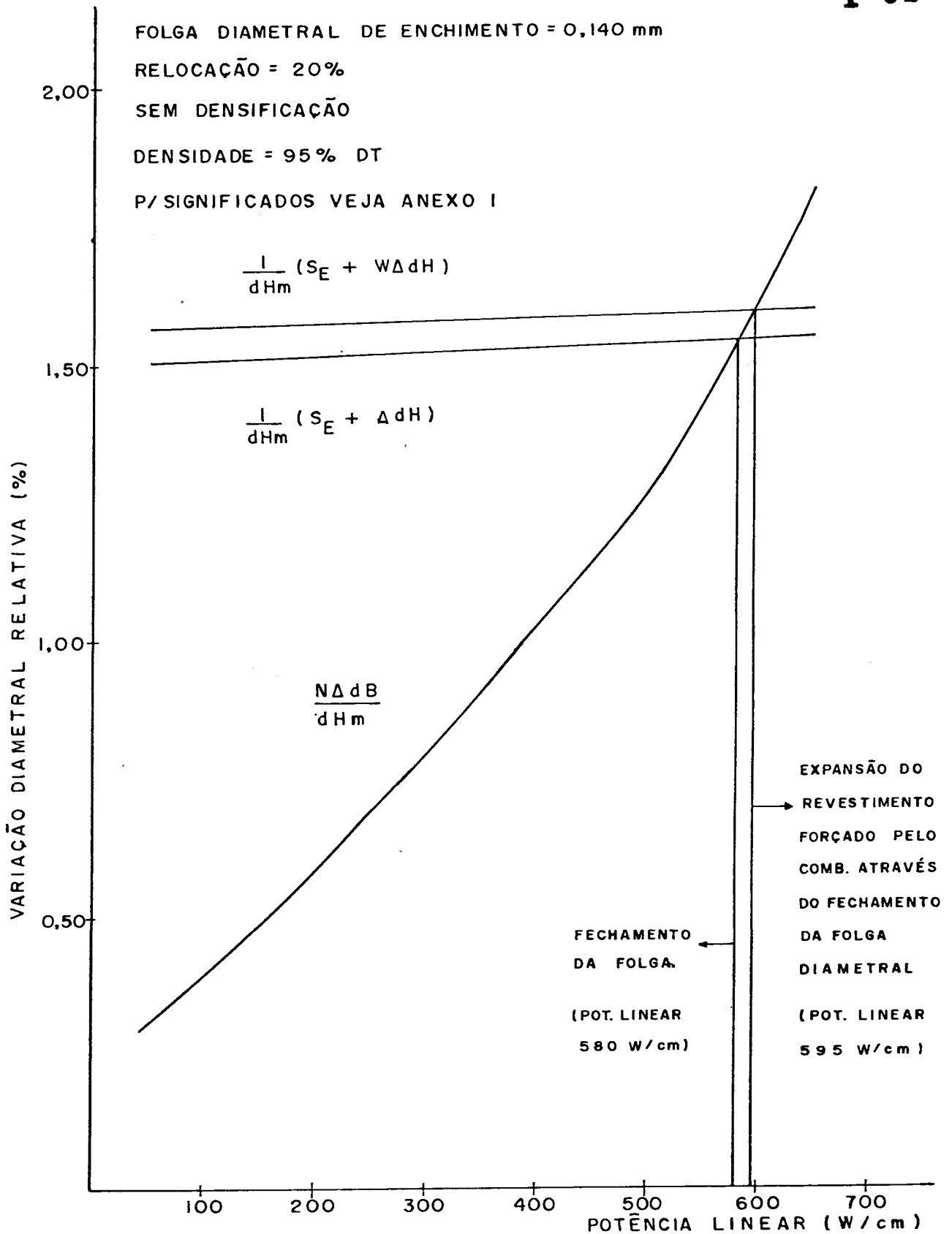


FIGURA 12 - VARIAÇÃO RELATIVA DIAMETRAL DO COMBUSTIVEL E DO REVESTIMENTO EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR (QUEIMA = 0 MWd / kg U)

COMBUSTIVEL : UO₂

1 312

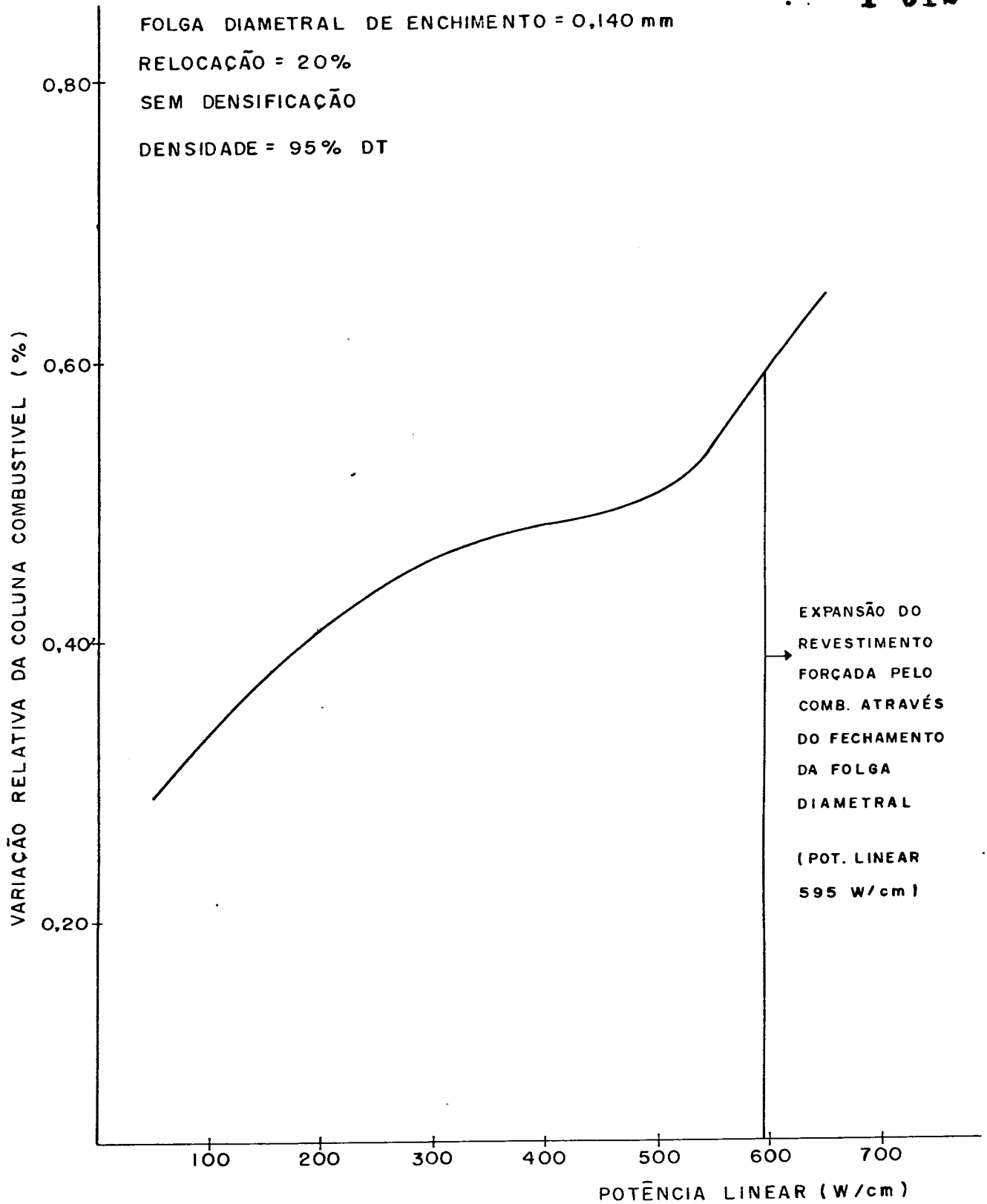


FIGURA 13- VARIACÃO RELATIVA DA COLUNA DE COMBUSTIVEL EM EM FUNÇÃO DA POTÊNCIA LINEAR (QUEIMA = 0 MWd/kgU) COMBUSTIVEL: UO₂

ANEXO 1

EXPLICAÇÃO PARA AS FIGURAS 10 E 12

$\frac{1}{d_{Hm}} (S_E + W\Delta d_H) =$ folga diametral de enchimento + deformação térmica do revestimento

$\frac{1}{d_{Hm}} (S_E + \Delta d_H) =$ folga diametral de enchimento + deformação térmica do revestimento + deformação elástica do tubo de revestimento pela pressão do refrigerante.

$\frac{W\Delta d_B}{d_{Hm}} =$ variação do diâmetro do combustível por deformação térmica.

$d_{Hm} =$ diâmetro médio do tubo de revestimento.