



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**SIMULAÇÃO COM PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DE
DESEMPENHO DO COMBUSTÍVEL EM REGIMES PERMANENTE E
TRANSIENTE DE VARETAS COMBUSTÍVEIS DE AÇO INOXIDÁVEL
AUSTENÍTICO**

DANIEL DE SOUZA GOMES

Tese apresentada com parte dos requisitos
para obtenção do Grau de Doutor em
Ciências na Área de Tecnologia Nuclear -
Reatores

Orientador:

Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva

São Paulo
2014



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**SIMULAÇÃO COM PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DE
DESEMPENHO DO COMBUSTÍVEL EM REGIMES PERMANENTE E
TRANSIENTE DE VARETAS COMBUSTÍVEIS DE AÇO INOXIDÁVEL
AUSTENÍTICO**

DANIEL DE SOUZA GOMES

Tese apresentada com parte dos requisitos
para obtenção do Grau de Doutor em
Ciências na Área de Tecnologia Nuclear -
Reatores

Orientador:

Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva

São Paulo
2014

AGRADECIMENTOS

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN/CNEN-SP), pela oportunidade que me foi concedida para realizar os trabalhos de pesquisa do doutorado.

Ao Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva, pela orientação e pelo enriquecimento do trabalho proporcionado por seus comentários, bem como pelo incentivo, colaboração e apoio que foram muito importantes para a realização deste trabalho.

Ao grupo de pesquisa do desempenho do combustível nuclear do Centro Tecnológico da Marinha de São Paulo (CTMSP), que durante todo o percurso colaborou com a pesquisa e promoveu treinamento com especialistas internacionais.

Aos amigos e funcionários do Centro de Engenharia Nuclear (CEN/SP), que acreditaram na realização dessa tarefa, pela ajuda, colaboração e incentivo dispensado.

Agradeço a todos aqueles que, direta ou indiretamente, contribuíram para a execução da pesquisa e que acreditam na ciência nacional.

SIMULAÇÃO COM PROGRAMAS COMPUTACIONAIS DE DESEMPENHO DO COMBUSTÍVEL EM REGIMES PERMANENTE E TRANSIENTE DE VARETAS COMBUSTÍVEIS DE AÇO INOXIDÁVEL AUSTENÍTICO

DANIEL DE SOUZA GOMES

RESUMO

A causa imediata do acidente na usina nuclear de Fukushima Daiichi de março de 2011 foi o derretimento do núcleo do reator. Durante este processo, o zircônio do revestimento do combustível reagiu com a água, produzindo uma grande quantidade de hidrogênio. Esse hidrogênio, combinado com os materiais radioativos voláteis, vazou do vaso de contenção e entrou no edifício de reator, resultando em explosões. No passado, o aço inoxidável foi utilizado como revestimento em muitos reatores de água pressurizada (PWR) e seu desempenho sob irradiação foi excelente, entretanto, o aço inoxidável foi substituído por uma liga à base de zircônio como material de revestimento, principalmente devido à sua mais baixa seção de choque de absorção de nêutrons. Hoje, o revestimento de aço inoxidável aparece novamente como uma possível solução para problemas de segurança relacionados a explosão e a produção de hidrogênio. O objetivo desta tese de doutorado é discutir o desempenho sob irradiação de varetas combustíveis usando aço inoxidável como material de revestimento. Os resultados mostram que varetas de aço inoxidável exibem temperaturas mais baixas no combustível e maiores larguras da folga pastilha-revestimento do que as varetas revestidas por Zircaloy e essa folga não fecha durante a irradiação. O desempenho térmico das duas varetas combustíveis é muito semelhante, e a penalidade de maior absorção de nêutrons em razão do uso de aço inoxidável pode ser compensada pela combinação de um pequeno aumento no enriquecimento do U-235 e modificações no tamanho do espaçamento entre as varetas combustíveis.

**FUEL PERFORMANCE COMPUTER CODE SIMULATION OF
STEADY-STATE AND TRANSIENT REGIMES OF THE
STAINLESS STEEL FUEL RODS**

DANIEL DE SOUZA GOMES

ABSTRACT

The immediate cause of the accident at the Fukushima Daiichi nuclear power plant in March 2011 was the meltdown of the reactor core. During this process, the zirconium cladding of the fuel reacted with water, producing a large amount of hydrogen. This hydrogen, combined with volatile radioactive materials leaked out of the containment vessel and entered the building of the reactor, resulting in explosions. In the past, stainless steel was utilized as cladding in many pressurized water reactors (PWRs) and its performance under irradiation was excellent. However, the stainless steel was replaced by zirconium-based alloy as cladding material mainly due to its lower neutron absorption cross section. Today, the stainless steel cladding appears as a possible solution for safety problems related to hydrogen production and explosion. The objective of this thesis is to discuss the performance under irradiation of fuel rods using stainless steel as cladding material. The results show that stainless steel rods display higher fuel temperatures and wide pellet-cladding gaps than Zircaloy rods and no gap closure during the irradiation. The thermal performance of the two fuel rods is very similar, and the penalty of increased absorption of neutrons due to the use of stainless steel could be compensating by combining small increase in U-235 enrichment and pitch size changes.

Sumário

LISTA DE TABELAS	iii
LISTA DE FIGURAS	VI
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	IX
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Motivação	1
1.2 Objetivo da tese	4
1.3 Aspectos relevantes e originalidade	5
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	7
2.1 Experiência adquirida com revestimento de aço	8
2.2 Estado permanente com revestimento de aço.....	13
2.3 Aspectos do comportamento do aço e zircaloy	15
2.4 Análise de transiente por excesso de reatividade.....	23
2.6 Análise de propriedades do aço	29
2.7 Acúmulo de hidrogênio	33
3 CONSTRUÇÃO DOS PROGRAMAS IPEN-SSP e IPEN-SST	35
3.1 Modelagem dos materiais nucleares	35
3.1.1 Análise das variáveis de entrada	36
3.1.2 Arquitetura dos códigos de desempenho do combustível....	41
3.1.3 Módulos do FRAPCON.....	46
3.1.4 Módulos do FRAPTRAN.....	52
3.1.5 Limitações dos códigos de desempenho	54
3.2.1 Calor específico do aço (ccp)	57
3.2.2 Condutividade térmica (cthcon)	61
3.2.3 Condutividade térmica dos óxidos (zotcon)	64
3.2.4 Emissividade do revestimento (zoemis).....	69
3.2.5 Expansão térmica (chtexp)	71
3.2.6 Módulo de elasticidade (celmod)	76
3.2.7 Módulo de cisalhamento (cshear).....	79

3.2.8 Crescimento por irradiação (cagrow)	81
3.2.9 Taxa de fluência (crepr)	85
3.2.10 Dureza meyer (cmhard)	86
3.2.5 Razão de Poisson (celmdr)	88
3.3 Anisotropia (caniso)	90
3.5 Efeitos do césio e iodo (cesiod)	95
3.6 Formação de crud	96
3.7 Critério da densidade de energia (CSED)	97
3.8 Modelo de integridade do revestimento	98
3.8.1 Correlação proposta por Vitanza	101
3.8.2 Correlação proposta pelo KAERI	103
3.8.3 Probabilidade de riscos decorrentes de transientes	105
3.8.4 Análise de risco para falhas do combustível	107
3.8.5 Limites térmicos do revestimento	109
3.8.6 Análise de transientes	111
4 TESTES REALIZADOS	117
4.1 Introdução	117
4.1.2 Varetas escolhidas do (ifpe) para validação do código	119
4.1.3 Base de casos (fumex)	120
4.2 Estado estacionário	121
4.2.1 Formação de hidretos	128
4.2.2 Fechamento da folga	129
4.2.3 Energia armazenada	135
4.1.4 Análise de gases de fissão	136
4.2.4 Rampas de potência	140
4.3 Transientes	147
5 CONCLUSÃO	153
6 TRABALHOS FUTUROS	157
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	158

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1	Resumo dos <i>LWRs</i> que usaram aço inoxidável no passado [1].	11
TABELA 2.2 -	Propriedades do Zircaloy -2/4 e aços 348 e 347.....	30
TABELA 3.1	Variáveis de entrada para simulação PWR -17x17 típico.	40
TABELA 3.2	Reatores em construção e licenciamento.....	37
TABELA 3.3	Estrutura das sub-rotinas do FRAPCON e FRAPTRAN...	42
TABELA 3.4	Modelagens para o combustível e revestimento.....	43
TABELA 3.5	Modelagem para o revestimento	44
TABELA 3.6	MATPRO rotinas destinadas ao combustível UO_2	45
TABELA 3.7	Módulos do FRAPCON.....	46
TABELA 3.8	Rotinas principais do código FRAPTRAN.....	52
TABELA 3.9	Módulos do FRAPTRAN.....	53
TABELA 3.10	Códigos utilizados para cálculo de transientes.....	53
TABELA 3.11	Rotinas da biblioteca MATPRO atualizadas	56
TABELA 3.12	Condutividade térmica do Zircaloy-4 e do aço 348 de 258 a 387 °C.	64
TABELA 3.13	Oxidação em altas temperaturas Zircaloy e aços austenítico.....	65
TABELA 3.14	Calor específico dos óxidos de ferro e zircônio.....	66
TABELA 3.15	Emissividade experimental de aços austeníticos.....	71
TABELA 3.16	Expansão térmica axial e circunferencial do Zircaloy e do aço 348 entre 217° C a 788 °C.....	73
TABELA 3.17	Expansão linear do aço 348 e Zircaloy.....	74
TABELA 3.18	Expansão térmica e condutividade dos aços 321, 347 e 348.....	75
TABELA 3.19	Módulo de elasticidade dos aços: 304, 316, 321, 347.....	77
TABELA 3.20	Condições de irradiação.....	83
TABELA 3.21	Dureza Meyer para o aço 348 e Zr-4.....	89
TABELA 3.22	Razão de deformação plástica, anisotropia do aço.....	92
TABELA 3.23	Coeficiente de anisotropia normal, R.....	93

TABELA 3.24	Calor específico dos aços da série 300 não irradiados...	94
TABELA 3.25	Composição das ligas de zircônio comerciais	100
TABELA 3.26	Comparação entre zircaloy e aço inoxidável.....	116
TABELA 4.1	FUMEX versões implementadas.....	120
TABELA 4.2	Base de dados IFPE NUCLEAR FUEL PREFORMANCE EXPERIMENTS.....	120
TABELA 4.3	Grupos participantes do FUMEX-III.....	121
TABELA 4.4	PWR16x16 Arkansas Nuclear One-Unit 2 RodD04.....	122
TABELA 4.5	Parâmetros Térmicos e Hidráulicos do Reator US- PWR-16x16 TSQ002-D040	123
TABELA 4.6	Dados dimensionais de entrada.....	124
TABELA 4.7	Dados de entrada do FRAPCON, vareta US-PWR16x16 - TSQ002.....	124
TABELA 4.8	Valores de saída do FRAPCON US-PWR 16X16 TSQ002.....	125
TABELA 4.9	Caso USPWR 16x16, vareta TSQ002 Temperatura central do UO ₂ revestido com AISI-348 /Zr-4.....	126
TABELA 4.10	Caso US-PWR 16x16, vareta TSQ002 Temperatura central do UO ₂ revestido com AISI-348 /Zr-4.....	127
TABELA 4.11	Caso USPWR 16x16 Vareta TSQ002 deformação axial, radial, e circunferencial aço 348 e Zircaloy.....	132
TABELA 4.12	Westinghouse BR-3 Vareta 28i6 –comparação com revestimento de Zircaloy e aço AISI 348.....	138
TABELA 4.13	Westinghouse BR-3 Vareta 30i8 –comparação com revestimento de Zircaloy e aço AISI 348.....	140
TABELA 4.14	Limites de rampa para Super Ramp PK6.....	143
TABELA 4.15	Base de casos, Super Ramp PK6, características das varetas.....	143
TABELA 4.16	Parâmetros de Rampa, SUPER-RAMP varetas PK6-2, PK6-3 e PK6-S.....	144
TABELA 4.17	Parâmetros do combustível utilizado no SUPER-RAMP	145
TABELA 4.18	Resultados térmicos Super-Ramp PK6-S, PK6-2 e PK6-3 / 348.....	146

TABELA 4.19	Resultados térmicos SUPER-RAMP PK6-S, PK6-2 e PK6-3 Revestimento de aço 348.....	146
TABELA 4.20	Resultados SUPER-RAMP PK6-S, PK6-2, PK6-3, aço 348.....	147
TABELA 4.21	Dimensões físicas da vareta, HBO5 PWR 17X17.....	149
TABELA 4.22	HBO5 transiente de reatividade.....	152

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 3.1	Sequência de execução do código de desempenho.....	47
FIGURA 3.2	Ciclos de execução do código de desempenho FRAPCON, ciclo de tempo, ciclo de geração de gases, ciclo de nós axiais, ciclo de condutância da folga.....	49
FIGURA 3.3	Evolução dos valores de calor específico para os aços 304, 316 e 348 no intervalo de 27 °C a 1285 °C [3,10]	59
FIGURA 3.4	Calor específico do Zircaloy entre 27 °C a 1285 °C [3,10]	59
FIGURA 3.5	Entalpia do Zircaloy e do aço 348 no intervalo de 27 °C a 1285 °C [3,10]	60
FIGURA 3.6	Condutividade térmica do Zircaloy e do dióxido de urânio [3,10]	61
FIGURA 3.7	Condutividade térmica do Zircaloy 4 e aço 348 na faixa térmica de 300 °C a 1787 °C [1,3,27]	62
FIGURA 3.8	Calor específico dos óxidos de ferro [3,10]	66
FIGURA 3.9	Entalpia dos óxidos de zircônio e ferro [3,10]	67
FIGURA 3.10	Entalpia dos óxidos formados no aço [3,10]	68
FIGURA 3.11	Calor específico dos óxidos de ferro formados no aço Fe ₂ O ₃ , Fe ₃ O ₄ , FeO ₂ e zircônio ZrO ₂ , ZrO [3]	68
FIGURA 3.12	Dados de emissividade, testes aço [49]	70
FIGURA 3.13	Expansão circunferencial e axial do Zircaloy [3,10]	72
FIGURA 3.14	Deformação axial e diametral do Zircaloy e do aço 348 [1,3,10]	73
FIGURA 3.15	Deformação axial e diametral do Zircaloy e do aço 348 [1,3,10]	75
FIGURA 3.16	Módulo de elasticidade dos aço 348, 304 e 316 [1,3,27,28]	78
FIGURA 3.17	Módulo de elasticidade do Zircaloy-4, e aço 348 [1,3,27,28]	79
FIGURA 3.18	Módulo de cisalhamento dos aços 304, 316 e 348 [1,3,27,28]	81
FIGURA 3.19	Crescimento axial e volumétrico do aço 348 [1,2]	83

FIGURA 3.20	Crescimento axial do Zircaloy em função da fluência [3,10]	84
FIGURA 3.21	Dureza Meyer para aço 348 e Zr-4 [1,3]	87
FIGURA 3.22	Coeficiente de Poisson do aço austenítico 348 [1,3,27,28]	89
FIGURA 3.23	Entalpia dos aços austeníticos 304 e 348 [3]	93
FIGURA 3.24	Energia armazenada modelo SED EPRI e PNNL.....	101
FIGURA 3.25	Pulso de energia de 40 MW/ft temperatura de 1000 °C/s	113
FIGURA 3.26	Pulso de energia deformação axial e circunferencial.....	113
FIGURA 3.27	Limite de entalpia em função hidretos no revestimento....	114
FIGURA 4.1	Pastilha utilizada US-PWR TSQ002.....	121
FIGURA 4.2	Potência linear (kW/m) e produtos de fissão gasosos	124
FIGURA 4.3	Queima e um combustível e a fluência US-PWR 16x16...	126
FIGURA 4.4	A temperatura média do revestimento TSQ002.....	127
FIGURA 4.5	A temperatura média do UO2 TSQ002- aço 348 348.....	127
FIGURA 4.6	Acúmulo de hidretos no revestimento TSQ002, Zr-4.....	128
FIGURA 4.7	Fechamento da folga entre o aço e o Zircaloy.....	129
FIGURA 4.8	O estresse circunferencial, Zr-4, 348, folga.....	130
FIGURA 4.9	O estresse axial no revestimento 348, Zr-4.....	130
FIGURA 4.10	Deformação circunferencial nodal do revestimento Zr-4 .	131
FIGURA 4.11	Deformação axial, caso TSQ002, aço e Zircaloy.....	132
FIGURA 4.12	Deformação radial com revestimentos aço e Zircaloy.....	133
FIGURA 4.13	Deformação radial, caso TSQ002, aço e ZR-4.....	133
FIGURA 4.14	Deformação axial nodal caso TSQ002, Zircaloy.....	134
FIGURA 4.15	Deformação axial, caso TSQ002, AISI- 348.....	134
FIGURA 4.16	Deformação circunferencial TSQ002, AISI- 348.....	135
FIGURA 4.17	Energia armazenada no combustível-TSQ002, Zr-4.....	135
FIGURA 4.18	Energia armazenada TSQ002, AISI – 348.....	136
FIGURA 4.19	Deformação axial, caso 28i6 aço AISI-348.....	138
FIGURA 4.20	Deformação axial, vareta 28i6, Zircaloy-4.....	138
FIGURA 4.21	Temperatura central, vareta 30i8, Zircaloy-4.....	140
FIGURA 4.22	Temperatura no centro da pastilha, PK6-2, aço - 348.....	144
FIGURA 4.23	Temperatura central do combustível PK6"-S.....	146
FIGURA 4.24	Folga Zircaloy e aço AISI, PK6/S.....	149

FIGURA 4.25	Perfil de potência da vareta HBO5.....	149
FIGURA 4.26	Temperatura central do combustível e alongação HBO5.....	142
FIGURA 4.27	Deformação a pilha de combustível HBO5.....	150
FIGURA 4.28	Deformação axial no combustível. HBO5 após pulso.....	150
FIGURA 4.29	Deformação radial no revestimento aço 348 e Zr-4.....	151
FIGURA 4.30	Deformação circunferencial no revestimento aço 348 e Zircaloy-4.....	152

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AECI	Atomic Energy of Canada Ltd.
AEC	Atomic Energy Commission
ANL	Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois
B&W	Babcock and Wilcox Company
ANO	Arkansas Nuclear Plant
BR-3	Test Reactor in Belgium
BWR	Boiling Water Reactor
CHF	Critical Heat Flux
CRUD	Chalk River Unidentified Deposits
CSED	Critical <i>Strain Energy</i> Density
DNBR	Departure from Nuclear Boiling Ratio
DNB	Departure from Nucleate Boiling
DOE	Department of Energy (U.S.)
ECCS	Emergency Core Cooling System
EFPD	Effective Full Power Days
EPMA	Electron Probe Microanalysis
ESCORE	EPRI Steady-State Core Reload Evaluation
FGR	Fission gas release
FRAPT-6	Transient analysis code
FRAPCON	Steady State Fuel Rod Performance Code
FRAPTRAN	Fuel Rod Analysis Program Transient
FUMEX	Fuel Modelling at Extended Burn-up
GWd/MTU	Gigawatt Day Per Metric Ton Uranium
HBRP	High Burn up Rim Project
HBS	High Burn-up Structure
HRP	Halden Reactor Project (Noruega)
IAEA	International Atomic Energy Agency
IFA	Instrumented Fuel Assembly
INEEL	Idaho National Eng. and Environmental Laboratory
INL	Idaho National Laboratory (INEEL)
JAERI	Japan Atomic Energy Research Institute

LHGR	Linear Heat Generation Heat
LOCA	Loss of Coolant Accident
LTA	Lead Test Assemblies
LWR	Light Water Reactor
MOX	Mixed Oxide fuel, UO ₂ e PuO ₂
NRU	National Research Universal
NSRR	Japanese Nuclear Safety Research Reactor
OECD	Organization for Economic Cooperation and Development
PBF	Power Burst Facility
PCI	Pellet Clad Interaction
PCMI	Pellet Clad Mechanical Interaction
PHWR	Pressurized High Water Reactor
PIE	Post Irradiation Examination
PNNL	Pacific Northwest National Laboratory
PWR	Pressurized Water Reactor
PWSCC	Primary Water Stress Corrosion Cracking
RIA	Reactivity Initiated Accident
SDM	Shutdown Margin
TD	Theoretical Density
TREAT	Transient Reactor Test Facility
VVER	Water-Water Energetic Reactor

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivação

O aço inoxidável austenítico foi o material escolhido para o revestimento do combustível nos primeiros reatores a água leve pressurizada *Pressurized Water Reactors* (PWRs). A partir da década de 1960, os aços foram substituídos nos reatores comerciais por ligas à base de zircônio, em virtude de sua menor seção de choque de absorção para nêutrons térmicos e temperatura de fusão superior em relação aos aços austeníticos [1]. Uma menor absorção de nêutrons térmicos, permite que núcleos, com combustíveis revestidos de *Zircaloy*, operem com menores custos de enriquecimento do que núcleos com combustíveis revestidos de aço [1]. A maior temperatura de fusão permite ao *Zircaloy* manter uma maior integridade (melhor resistência mecânica) do que o aço durante acidentes extremos nos quais as temperaturas do revestimento possam exceder 1204 °C [1].

Apesar dos fatores acima explicitados, existem algumas vantagens em se utilizar aço como revestimento em PWRs [1]. Durante operação normal ou em transientes controlados, o aço é mais resistente do que o *Zircaloy* e é, então, menos suscetível a danos por causa da interação mecânica entre a pastilha combustível e o revestimento *Pellet-Cladding Interaction* (PCI) [1,2]. O aço é, também, menos suscetível do que o *Zircaloy* à corrosão sob tensão por produtos de fissão gerados no combustível como iodo. Em consequência, a formação de trincas na parede interna do revestimento é menos provável; desse modo, maiores concentrações de produtos de fissão podem ser toleradas em varetas de aço [2]. Durante acidentes de perda de refrigerante primário (APRP), nos quais as temperaturas no revestimento permanecem abaixo de 1204 °C, o aço exibe uma taxa de reação metal-vapor, uma quantidade de hidrogênio liberada e um calor de reação inferiores aos apresentados pelo *Zircaloy*. O potencial de fragilização por oxigênio é quase nulo para o aço. As propriedades materiais tais como a resistência mecânica e a ductilidade, são superiores às apresentadas pelo *Zircaloy*. Disso resulta uma menor deformação do revestimento de aço, bem abaixo dos limites suportados e com reduzido bloqueio do canal de refrigeração [1,2]. Os aços inoxidáveis austeníticos utilizados como revestimento nos primeiros reatores eram dos tipos 304, 347 e 348 [1,2].

Com exceção de pequenas falhas isoladas, o desempenho do aço em PWRs tinha sido excelente. Apesar disso, somente esforços limitados foram feitos para modelar o comportamento termomecânico de varetas combustíveis com revestimento de aço. A década de 1970, marca o início das investigações detalhadas da interligação entre os elementos térmicos, mecânicos e nucleares, como acúmulo de gás de fissão, ou seja, abrange a totalidade das propriedades materiais relativas ao comportamento da vareta combustível sob irradiação [3,4].

Os códigos destinados para o cálculo de desempenho dos combustíveis nucleares surgem em meados década de 1960, entretanto eram propostos também para reatores rápidos. No laboratório *Bettis* foi desenvolvido o código CYGRO em 1966. Inicialmente com baixa aceitação, sendo adaptado pela *Westinghouse*, na versão CYGRO-F. O código o F-MODEL foi desenvolvido nos laboratórios do *Oak Ridge* em 1973. O código BEHAVE foi desenvolvido pela *General Electric* em 1972. O código OLYMPUS proposto pela *Westinghouse* [11]. Na Alemanha surgem os códigos SATURN desenvolvido no instituto *Karlsruhe*, o URANUS pela *Darmstadt* e IAMBUS pela *INTERATOM*. O código FCODE-BETA/SS foi adaptado academicamente, na universidade do Michigan em 1985 [7].

No caso, do código LIFE desenvolvido no Argonne, contava com análise térmica, análise nuclear modelando o inchamento, proposto em 1970. A versão proposta em 1977, LIFE-4 simulava revestimentos de aço inoxidáveis distintos, como AISI 316, HT9 e D9, somente o código COMETHE é destinado para ambos reatores térmicos e rápidos [11]. A US-NRC no papel de órgão regulatório, incumbiu-se da tarefa de patrocinar e desenvolver os códigos particulares para os reatores térmicos refrigerados por água leve, com a série de códigos FRAP.

Analisando-se os códigos da época, somente alguns foram reportados na década de 1980, como capazes de modelar varetas combustíveis com revestimento de aço inoxidável austenítico [2,4]. Entre esses códigos estão o COMETHE, SLEUTH-SEER, BEHAVE IV, LIFE, THERMAL-1, URANUS, IAMBUS e FCODE-BETA/SS [1,7].

Prever com confiabilidade o comportamento sob irradiação de combustíveis do tipo vareta para reatores a água leve *Light Water Reactors* (LWRs) tem sido um dos maiores objetivos dos programas de pesquisa na área de segurança de reatores.

Para atingir esses objetivos, a *US-Nuclear Regulatory Commission* (US-NRC) fomentou um extenso desenvolvimento de programas computacionais, assim como testes *in-pile* e *out-of-pile* para validar a capacidade analítica desses códigos [5-6].

Um dos códigos desenvolvidos com fomento da US-NRC para avaliar o comportamento de combustíveis de LWRs sob irradiação foi o programa FRAPCON [5-6]. O FRAPCON, já na sua versão (3) e atualização (4), FRAPCON-3.4, é uma ferramenta analítica que calcula o comportamento sob irradiação de uma vareta combustível de LWRs, quando as variações de potência e as condições de contorno são suficientemente lentas para que o termo regime permanente seja aplicado. Isso inclui situações, tais como longos períodos à potência constante e rampa de potência com subidas lentas, típicas da operação normal de um reator nuclear [8,9].

O código FRAPCON-3.4 calcula a variação no tempo de todas as variáveis significativas da vareta combustível, incluindo temperaturas no combustível e no revestimento, deformações e oxidação no revestimento do combustível, densificação, inchamento, geração de produtos de fissão gasoso no combustível e variação da pressão na vareta. Além disso, o código é projetado para gerar as condições iniciais para a análise de transientes da vareta combustível pelo código *Fuel Rod Analysis Program Transient* (FRAPTRAN) [3,8,9]. O código FRAPTRAN-1.4, na versão distribuída em 2010, é um programa computacional codificado em linguagem *FORmula TRANslation* (FORTRAN), desenvolvido pelo *Pacific Northwest National Laboratory* (PNNL); foi homologado pela US-NRC, em regime transiente destinado para varetas combustíveis de reatores de água leve.

O FRAPTRAN é utilizado para avaliar o comportamento do combustível durante transientes de potência ou de refrigeração no reator, tais como acidentes relativos ao aumento da reatividade *Reactivity-Initiated-Accident* (RIA), ou acidentes de perda de refrigerante *Loss of Coolant Accident* (LOCA) em queimas de até 65 GWd/MTU. Os códigos FRAPTRAN e FRAPCON são acoplados à biblioteca de propriedades dos materiais empregados em reatores de água leve. As correlações de materiais para reatores de água leve, *Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis* (MATPRO) é uma biblioteca de funções codificadas em FORTRAN formando um pacote com as propriedades dos materiais utilizadas nos códigos de desempenho [3-15].

1.2 Objetivo da tese

O objetivo desta tese de doutorado consistiu na construção de dois programas computacionais de análise de desempenho do combustível nuclear para modelar o comportamento térmico e mecânico em regimes permanente e transiente de varetas combustíveis de PWRs revestidas com aço inoxidável austenítico. Uma ênfase particular foi dada à utilização do aço austenítico como revestimento. As bases para esses novos programas computacionais foram os programas FRAPCON-3.4 e FRAPTRAN-1.4. Desde que esses programas estão restritos à análise de varetas combustíveis com revestimento de ligas à base de zircônio, eles foram modificados nesta tese para analisar varetas combustíveis com revestimento de aço inoxidável austenítico, especificamente o aço 348.

O capítulo 2, apresenta a revisão bibliográfica relativa à experiência adquirida na utilização de aço inoxidável, como revestimento de varetas, em reatores de potência PWRs e uma revisão dos conceitos fundamentais necessários para análise do desempenho de combustíveis revestidos de aço inoxidável austenítico. Também se verifica a arquitetura de *software*, empregada nos códigos de desempenho FRAPCON e FRAPTRAN, os quais formalizam a base dos novos códigos desenvolvidos.

O capítulo 3, apresenta a modelagem termomecânica dos programas, aqui denominados IPEN-CNEN/SS. Nas versões interligadas entre os regimes permanente IPEN-CNEN/SSP e o regime transiente IPEN-CNEN/SST. Cada propriedade material modificada pertencente ao aço é tratada nesse capítulo.

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos em simulações relativas ao regime permanente e transiente referente ao desempenho e ao comportamento termomecânico, das varetas combustíveis revestidas com aço inoxidável AISI 348, pertencentes ao programa *Fuel Modelling at Extended Burnup* (FUMEX) e à base experimental *International Fuel Performance Experiments* (IFPE). Apresentam-se um estudo comparativo dos resultados obtidos, com aqueles alcançados por meio de simulações de varetas combustíveis originalmente revestidas de *Zircaloy*, com as mesmas dimensões geométricas características relativas ao combustível e sujeitas aos mesmos históricos de potência das varetas revestidas de aço inoxidável analisadas.

O capítulo 5 apresenta as conclusões obtidas na simulação dos casos escolhidos; desenvolvendo-se análises comparativas entre os comportamentos das ligas à base de zircônio e do aço austenítico.

O capítulo 6 delinea os próximos passos do trabalho científico. Analisa-se a possibilidade de uma futura validação dos combustíveis com revestimento de aço austenítico 348, em reatores térmicos de água leve. Em seguida, são sugeridos tópicos de pesquisas complementares visando trabalhos futuros em potencial.

1.3 Aspectos relevantes e originalidade

Os códigos de desempenho FRAPCON-3.4 e FRAPTRAN-1.4 utilizam as propriedades materiais para combustíveis, revestimento do combustível, revestimento das varetas de controle contendo absorvedores de nêutrons e também os materiais estruturais empregados nos elementos combustíveis, como grades espaçadoras e misturadoras por meio das rotinas do MATPRO [3,10]. Essas rotinas vêm sendo atualizadas constantemente, visando incluir novos materiais e suas respectivas propriedades por meio de correlações empíricas. Desse modo, segue-se a finalidade básica almejada, ou seja, o licenciamento dos códigos adaptados para combustível nuclear revestido de aço inoxidável austenítico AISI-348. Os códigos de desempenho do combustível IPEN-CNEN/SSP destinado à condição permanente, e, sequencialmente, o código IPEN-CNEN/SST, destinado à condição transiente. Ambos os códigos apresentam comportamento dual, portanto, com escopos operacionais idênticos aos códigos FRAPCON e FRAPTRAN, sendo interligados por meio de um arquivo de reinicialização gerado automaticamente na condição permanente.

As atualizações são decorrentes do ciclo estendido de queima, com à inclusão das propriedades materiais dependentes da irradiação. Essas correlações são atualizadas para ciclos de até 65 GWd/MTU, no caso do regime permanente e até 62 GWd/MTU, no caso do regime transiente, abrangem as propriedades das ligas à base de zircônio avançadas, tais como *Zirlo* e M5, em adição às ligas do tipo *Stress Relief Annealed* (RXA), ou *Zircaloy-2* específico para reatores BWRs e *Cold Work Stress Relief Annealed* (CWSRA), ou *Zircaloy-4* específico para reatores PWRs [26]. No processo de conversão dos programas para o aço, foi necessário desenvolver novas correlações codificadas em linguagem FORTRAN.

As referências são as propriedades térmicas e mecânicas do aço inoxidável austenítico AISI 348, dependentes da temperatura e da irradiação. As alterações promovidas são compatíveis com a arquitetura dos sistemas originais, os quais mantiveram os critérios de segurança vigentes para as ligas à base de zircônio. As distinções entre o desempenho sob irradiação de varetas combustíveis revestidas de *Zircaloy* e de aço inoxidável podem ser verificadas comparando-se as propriedades desses materiais. A partir das várias simulações desenvolvidas nesta pesquisa, para o comportamento da vareta combustível em regimes permanente e transiente, foi possível estabelecer um paralelo entre o desempenho do *Zircaloy* e comparativamente, ao aço inoxidável como revestimento, definidos para combustíveis de reatores de água leve.

As novas versões dos códigos de desempenho devem suportar o aço austenítico como revestimento, possibilitando alterações complementares com novas modelagens, permitindo inclusão e adequação da teoria da plasticidade, da fluência mecânica, de modelos robustos de fricção ou de difusão de gases produzido na fissão. Desta maneira, inicia-se um novo passo para a pesquisa investigativa e para o desenvolvimento de novos combustíveis e revestimentos. Ainda viabiliza-se uma nova perspectiva no campo da pesquisa de sistemas computacionais, destinados a simulação do desempenho de combustíveis e materiais nucleares para reatores térmicos, refrigerados com água leve.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os primeiros reatores a água leve *Light Water Reactors* (LWRs) usaram varetas combustíveis revestidas por aço inoxidável austenítico. Todos esses reatores estão desligados, por várias razões, contudo, nenhuma delas está relacionada à utilização de revestimentos de aço inoxidável austenítico. Em conjunto com *Electric Power Research Institute* (EPRI) a empresa *S. M. Stoller Corporation* (SMSC), a qual desenvolveu durante a década de 1980, uma investigação extensa sobre combustíveis revestidos de aço inoxidável austenítico da série AISI 300 [1,2]. A revisão do projeto, do licenciamento e do desempenho dos combustíveis de aço inoxidável foi concentrada em PWRs, por causa do melhor comportamento dos combustíveis de aço inoxidável nesse tipo de reator. Os reatores incluídos na revisão foram *Haddam Neck*, também conhecido como *Connecticu Yankee*, *San Onofre-1*, *Indian Point-1* e *Yankee Rowe* [1,13].

Essas quatro plantas são formadas por reatores de água pressurizada com ciclos de queima de 25 GWd/MTU a 40 GWd/MTU [1,13]. O *Indian Point-1* foi também incluído em virtude da experiência acumulada com aço 348 [1,13]. O reator *La Crosse*, um *Boiling Water Reactor* (BWR), com arranjo 10x10 e ciclos irradiação de até 30 GWd/MTU, utilizou aço 347 como revestimento entre 1972 a 1987. Durante 25 anos a partir de 1968, registraram-se 1729 varetas revestidas de aço para PWRs e 333 varetas para BWRs [13]. Inicialmente, o material utilizado como revestimento nesses reatores foi o aço inoxidável austenítico com costura AISI 304, ou tipo 304, com 12% de encruamento, com exceção do *Yankee Rowe*, que utilizou aço AISI 348 [1,13]. A economia de nêutrons foi o incentivo para se utilizar o tubo com costura, uma vez que, com esse tipo de tubo, podem ser obtidas tolerâncias mais próximas da espessura do revestimento necessária em relação àquelas que poderiam ser obtidas com tubos sem costura, reduzindo-se a quantidade do material absorvedor de nêutrons.

O material encruado é também mais resistente do que o material recozido, o que reduz a espessura necessária do revestimento [1]. A planta *Connecticut Yankee* (CY), iniciando a operação em 1968, localizada em *Haddam Neck*, com um PWR 15x15, foi o único que apresentou falhas, foi convertido para *Zircaloy*, em três anos entre 1992 a 1995 [1,13].

As falhas foram relatadas no oitavo ciclo em 1979, depois no nono ciclo em 1989 e no décimo quinto ciclo em 1991. O reator continha 157 elementos combustíveis, com um total de 32028 varetas [13]. Nessa época, o reator *Haddam Neck* utilizou elementos combustíveis revestidos de aço de três fornecedores distintos: *Nuclear Materials and Equipment Corporation* (NUMEC); *Gulf States Utilities Company* (GULF) e *Babcock Wilcox* (B&W). Os núcleos revestidos de aço continham em média 408 kg de urânio e de *Zircaloy* 366 kg, desta forma demonstrase a economia de urânio enriquecido [13].

2.1 Experiência adquirida com revestimento de aço

Verificam-se pelo menos quatro materiais potenciais para aplicações como revestimento das pastilhas combustíveis em reatores de água leve: ligas à base de alumínio, ligas à base de zircônio, aços austeníticos e berílio. O berílio pode ser utilizado como revestimento, com boas características mecânicas, com baixa seção de choque, e com módulo de elasticidade de 303 GPa, sendo 48% maior que o aço inoxidável, apresenta baixo ponto de fusão de 1285 °C, abaixo daquele do aço austenítico, que é de 1425 °C a 1450 °C [3,10].

Os reatores de pesquisa com fluxo de nêutrons térmicos, utilizados desde a década de 1970, empregam o alumínio como revestimento. Em 1975, contavam-se com 375 reatores de pesquisa em 55 países, até 2007 cerca de 675 já haviam sido construídos em 70 países. Nesses reatores, utiliza-se o combustível do tipo placa, *Material Test Reactor* (MTR). A partir de 1978, foi criado o programa de enriquecimento reduzido, limitando até 20%. O MTR é formado por uma dispersão de urânio na matriz de alumínio U-Al, U₃O₈-Al, com densidade máxima de 3,2 gU/cm³. A partir da década de 1980, desenvolvem-se as ligas UMo-Al com 6-10% de peso de Mo, com densidade de 9 gU/cm³, ou U₃Si₂-Al com densidade de 4,2 gU/cm³. Os reatores de pesquisa apresentam baixa potência, com temperaturas inferiores à da ebulição da água 100 °C, por serem tipo piscina e apresentarem fluência em torno 2x10¹⁴ n/cm².

O alumínio empobrece a resistência à corrosão. No final da década de 1970, foram investigadas uma vasta gama de ligas binárias para revestimento, como zircônio-titânio e zircônio-alumínio.

O combustível de baixo enriquecimento formado por urânio-zircônio hidratado (UZrH) é destinado para os reatores de pesquisa do tipo, *Training Research Isotopes General Atomic* (TRIGA).

A primeira geração de reatores britânicos utilizou a liga de magnésio-alumínio, *Magnesium Oxide Aluminum* (Magnox). A liga Magnox (99,20%Mg; 0,798%Al; 0,002%Be), com ponto de fusão de 650 °C foi utilizada para revestir urânio metálico natural iniciado em 1956. A desvantagem da liga à base de magnésio é a reação exotérmica com água, e limita-se a temperaturas abaixo de 550 °C. O combustível formado de urânio metálico sofre troca de fase cristalina apresentando comportamento anisotrópico. Outras ligas, como zircônio-magnésio, também foram testadas. Nos reatores MAGNOX o revestimento era formado por uma liga de magnésio e alumínio. Na segunda geração de reatores britânicos, os reatores avançados refrigerados a gás *Advanced Gas cooled Reactor* (AGR), o revestimento era constituído de aço inoxidável, com combustível UO₂ enriquecido de 2,5% a 3,5% e temperatura do revestimento de 800 °C.

Nos reatores térmicos refrigerados com água leve empregam-se revestimentos formados por ligas à base de zircônio, mas nos reatores refrigerados gás e nos reatores rápidos, predominam os aços inoxidáveis austeníticos. A escolha do aço é motivada pelas particularidades da energia do espectro de nêutrons e temperatura de operação. Os reatores avançados refrigerados a gás os AGR. Nesse caso, para o aço austenítico, a temperatura é de 780 °C, se refrigerado por dióxido de carbono. Os reatores regeneradores são capazes de transformar ²³⁸U em ²³⁹Pu, o *Liquid Metal Fast Breeder Reactors* (LMFBR). O aço austenítico 316 é definido para operar na temperatura máxima de 750 °C, os reatores rápidos regeneradores são refrigerados por metais no estado líquido, tais como sódio ou NaK.

Os aços austeníticos representam mais de 2/3 da produtividade mundial de aços, são essencialmente ligas ternárias ferro-cromo-níquel, contendo cerca de 16 a 25% de cromo, com 7 a 20% de níquel e cerca de 66% de ferro [27,28]. Na década de 1960, optou-se como revestimento, o aço AISI-304, 347 e 348, ou seja, os aços inoxidáveis austeníticos [28]. Os elementos de liga normalmente adicionados aos aços inoxidáveis são: (i) nióbio; (ii) vanádio; (iii) titânio. Nesse caso, reagem fortemente com o carbono, ocorrendo a formação de carbetos.

Os elementos de liga consolidam metalurgicamente o aço e reduzem a velocidade de transformação da austenita em martensita, em outras palavras, aumenta a estabilidade e a resistência a corrosão intergranular da liga [27,28].

As investigações relativas ao comportamento sob irradiação das ligas Fe-Cr-Ni pesquisa-se o fenômeno da corrosão sob tensão assistida por irradiação (IASCC) [28]. A degradação por irradiação do aço desenvolve-se pelo efeito da fluência de nêutrons rápidos, ambiente agressivo e efeitos associados a radiação gama, são os responsáveis pelo surgimento da fratura frágil. Os mecanismos estruturais envolvidos são a segregação induzida por irradiação (RIS), com redução dos teores de cromo, molibdênio, ferro e acréscimo de silício, fosforo e enxofre.

O desenvolvimento dos aços nucleares remonta o projeto militar desenvolvido pelo *Argonne National Laboratory* (ANL), na localidade de *Fort Belvoir*, no Estado da Virgínia.

O projeto teve início em 1952, liderado por *Walter Henry Zinn*, o primeiro diretor do ANL. Posteriormente *Zinn* supervisionou primeiro projeto para um reator rápido, posteriormente o reator *Experimental Breeder Reactor* (EBR) [2]. A utilização do revestimento do combustível por aço austenítico mostra vantagens em relação à fragilização por precipitação de hidretos no revestimento, mas também apresenta uma seção de choque alta e, adicionalmente, um maior enriquecimento de ^{235}U

Em 1951, temos primeiro reator experimental regenerador EBR-1, utilizou-se o aço tipo 347, refrigerado a sódio e potássio, NaK na faixa térmica de 228 °C a 316 °C. Em 1961, iniciam-se os testes no reator avançado ATR [2]. Nos reatores rápidos de teste ETR ou ATR e, também nos reatores regeneradores EBR desenvolvidos nas décadas de 1950 e 1960, foram utilizados os aços estabilizados com nióbio e tântalo, sujeitos a fluência de nêutrons rápidos ($E > 1\text{MeV}$) variando de $5 \times 10^{21} \text{ n/cm}^2$ a $3 \times 10^{22} \text{ n/cm}^2$.

Os reatores EBR utilizaram o aço 347 com grãos de 12 μm , já os reatores ETR e ATR utilizaram o aço 348 com grãos de 10 μm . O *Army Package Power Reactor* (APPR), um reator de água pressurizada, com potência de 2 MWe, foi revestido por aço austenítico [14]. O combustível escolhido foi o dióxido de urânio disperso no aço. O APPR-I contou com núcleo de combustíveis revestidos com aço austenítico 304. Na TABELA 2.1 apresentam-se os LWRs que utilizaram varetas combustíveis de aço inoxidável [1].

TABELA 2.1 - Resumo dos LWRs que usaram aço inoxidável no passado [1]

Tipo	Nome	Localização	MW _{th}	Revestimento	Observações
BWR	Dresden 1	USA	700	304	1° núcleo de <i>Zircaloy</i> e vários posteriores de aço e retorno para <i>Zircaloy</i>
	La Crosse	USA	165	348	Desligado permanentemente
	Big Rock	USA	240	304	Núcleos iniciais de aço e substituição gradual por <i>Zircaloy</i>
	Humbolt Bay	USA	220	304L	
	Elk river	USA	58	304	Desligado permanentemente
	Pathfinder	USA	189	316L	Desligado permanentemente
	VBWR	USA	50	304L	Desligado permanentemente (também experimentou com 310, 347 e 348)
	EVESR	USA		SS	
	Borax-V	USA	20	304	Desligado permanentemente
	Kalh1	FRG	60		Algum aço utilizado no início
	APS-1	USSR	30	321	Combustível metálico
	Beloyarsk	USSR	286&560	SS	Combustível metálico
	VK-50	USSR	250	SS	
PWR	Connecticut Yankee	USA	1825	304	Desligado permanentemente
	San Onofre	USA	1347	304 12% cw*	Desligado permanentemente
	Trino	Italy	825		Desligado permanentemente
	Sena	France	1040		Desligado permanentemente
	Indian Point1	USA	600	304	Desligado permanentemente
	Yankee Rowe	USA	600	348	Aço utilizado em 11 ciclos e <i>Zircaloy</i> começou a substituir o aço no ciclo 7.
	Saxton	USA	20	304	
	N.S. Savannah	USA		304	Reator de navio, desligado permanentemente
	SM-1, 1-A	USA	10&20	304	Combustível placa, reatores militares
	PM-1	USA	9	347	Vareta combustível
	PM-2A	USA	10	304L	Placa combustível, fora de operação
	NS Mutsu	Japan	36	304	Reator de navio, inativo
	Reatores de Teste	ETR	USA		304, 304L e outros
GETR		USA			
WTR		USA			
SPERT-3		USA		304L	Instalações de teste de segurança. Desligada permanentemente
FR-2		FRG		Vários	Experimentos com combustível

O primeiro núcleo de aço austenítico 304 foi substituído por outro de aço 347, esse estabilizado contra corrosão intergranular pela adição de nióbio e tântalo, em 0,08% [14]. Os aços 347 e 348 são estabilizados, para minimizar a corrosão intergranular, *Intergranular Corrosion Cracking* (IGC), reduzindo a depleção do cromo, um dos elementos que torna o aço resistente a corrosão [48]. O primeiro núcleo de aço austenítico 304 foi substituído pelo aço 347 estabilizado contra corrosão intergranular pela adição de nióbio e tântalo, em 0,08% [14]. Os aços 347 e 348 são estabilizados, para minimizar a corrosão intergranular, dessa maneira reduzindo a depleção do cromo, um dos elementos que torna o aço resistente a oxidação. O projeto APPR fez parte de um grande esforço, o *Army Nuclear Power Program* (ANPP), iniciado em 1954, cujo primeiro objetivo foi a construção do primeiro submarino com propulsão nuclear, o *USS - Nautilus* (SSN-571).

O combustível revestido de aço foi utilizado nos Estados Unidos, França, Rússia, Bélgica, Inglaterra e Itália, com combustíveis de dióxido de urânio enriquecidos entre 2,6% a 93%; também alguns testes experimentais com óxidos mistos de urânio, tório e plutônio foram realizados. A Rússia experimentou revestimento de aço com combustíveis formados por ligas de urânio-molibdênio moderados com grafite e refrigerados a água, na Planta de Potência Atômica (APS-1), em *Beloyarsk*. Inglaterra, a planta *Windscale Advanced Gas Reactor* (WAGR) utilizou varetas revestidas de aço, com diâmetro de 15 mm, comprimento de 1 metro, moderado a grafite e refrigerado com CO₂ e combustível de dióxido de urânio enriquecido a 2,5%. Na França, na região fronteira próxima à Bélgica, a planta nuclear de *Chooz*, em 1967, utilizou revestimento de aço em reatores de água pressurizada, *Société Energie Nucléaire Franco-Belge des Ardennes* (SENA). Apresentavam como combustível UO₂ enriquecido a 3,5% revestido de aço 304 [1].

Nesses casos, registram-se que os reatores do tipo PWR e BWR inicialmente, revestidos com aço 304 inoxidável, mas não estabilizado e posteriormente, com a troca por aços estabilizados, desta forma, usando os aços 347 e 348. O revestimento de aço foi substituído pelas ligas de zircônio. No continente europeu na mesma época, registram-se na Bélgica, o reator MOL, UO₂ - 3,7%. Na Itália, o reator do tipo PWR de 260 MWe conhecido como *Trino Vercellese*, utilizando o combustível UO₂ enriquecido a 2,73%, em operação de 1964 a 1990 [1].

Inicialmente, com revestimento de aço 304, o qual se substituiu por *Zircaloy* em 1967. Ainda na Itália, o reator *Garigliano* um BWR também utiliza o aço, em 1968, posteriormente, sendo substituído por *Zircaloy-2* [1].

2.2 Estado permanente com revestimento de aço

Até abril de 1981, um total de 550.000 a 600.000 varetas combustíveis revestidas de aço inoxidável tinham sido irradiados em reatores *PWRs*, tanto nos Estados Unidos como no continente europeu [1]. Antes de se avaliarem os dados obtidos dessas irradiações e sua aplicação nos reatores mais modernos, foi reconhecido que:

- (i) Nenhuma restrição operacional relacionada ao desempenho do combustível foi aplicada durante as manobras de potência em qualquer dos reatores, com exceção dos três últimos ciclos da usina *Connecticut Yankee*. O histórico de rampas de potência sofrido pelo combustível nesse reator foi, em alguns momentos, severo; a corrosão acelera-se com a temperatura e pode ter sido responsável pelas falhas [1,13].
- (ii) A taxa de geração de calor linear média no combustível *Average Fuel Linear Heat Generation Rate* (LHGR) foi baixa para todas as usinas, com exceção de *Connecticut Yankee*, em comparação às taxas atingidas pelos combustíveis com revestimento de *Zircaloy*. Isso resultou em uma carga termomecânica menor nesse tipo de combustível durante operações em regime permanente. As exceções foram feitas para alguns elementos experimentais[1,13].
- (iii) Somente os combustíveis irradiados que foram utilizados em períodos próximos à década de 1980, continham aspectos de projeto mais modernos, tais como pré-pressurização de gás hélio nas varetas combustíveis, chanfros nas pastilhas e maiores folgas pastilha-revestimento com o objetivo de minimizar a carga termomecânica no combustível.

A maioria das experiências adquiridas foi relativa aos projetos de combustíveis mais antigos, com potência linear reduzida, os quais eram menos conservativos com respeito ao desempenho termo-mecânico.

O desempenho das varetas combustíveis de aço inoxidável foi excelente, com exceção de um grupo limitado de elementos combustíveis utilizados na planta *Haddam Neck* e a ocorrência de falhas no reator francês *SENA*. As operações em *Yankee Rowe*, *Indian Point-1*, *San Onofre-1* e *Trino* foram essencialmente sem falhas; também nas operações em *Haddam Neck* nos primeiros 6 ciclos, as varetas falhadas eram revestidas com aço 304 [1].

Esse bom desempenho foi atingido sem a imposição de restrições nas operações e nas manobras de potência. Entretanto, os níveis de potência foram geralmente, inferiores em relação àqueles dos PWRs modernos, com varetas combustíveis revestidas de ligas à base de zircônio.

Os ciclos de irradiação de até 46 GWd/MTU foram atingidos no reator *Yankee Rowe*, e ciclos estendidos de até 70 GWd/MTU, em varetas experimentais individuais no reator BR-2 [1]. Quanto aos níveis de potência tão altos quanto 740 W/cm foram mantidos por 11 GWd/MTU; em revestimentos com espessuras de 0,25 mm, operando com sucesso até queimas de 10 GWd/MTU. Essas operações em condições extremas, combinadas com a boa tolerância do aço inoxidável em manobras de potência, indicavam para as varetas de aço inoxidável, com um alto potencial para maiores margens dos limites mecânicos de PWRs em relação a varetas de *Zircaloy*. Isso também indicava que o aço inoxidável teria excelente desempenho durante manobras de seguimento de carga [1].

Deve ser notado, entretanto, que as máximas taxas de geração de calor média alcançadas nas operações desenvolvidas com as varetas revestidas de aço eram aproximadamente 25% menores, comparativamente àquelas proporcionadas pelas varetas de *Zircaloy*. Então, a boa experiência de desempenho obtida pelas varetas de aço advinha de uma menor carga termomecânica, se comparada com as varetas similares de *Zircaloy* utilizadas comercialmente na época, ou seja, nos núcleos de reatores PWR 15x15 revestidos de *Zircaloy*.

Os reatores modernos apresentam-se com alguns parâmetros distintos, em relação às usinas que utilizaram os aços 304, 347 ou 348 como revestimento no passado. Atualmente, a potência linear na vareta é maior, o ciclo de irradiação é mais longo, maior quantidade urânio núcleo, os combustíveis atuais suportam espectro de nêutrons rápidos, mais intensos com adição de absorvedores de nêutrons, e coexistem com grades espaçadoras, misturadoras e filtros de debris.

Os reatores PWR, mesmo em regime permanente, são sujeitos a condições adversas, a um expressivo fluxo térmico, a alta fluência de nêutrons e a cadeias de transmutação com geração de isótopos ativos. As temperaturas internas do núcleo variam de 280 °C a 327 °C, a temperatura máxima central da pastilha UO₂ no eixo axial central, que atinge com facilidade 1220 °C e a pressão interna do núcleo nominal é de 15,5 MPa [30].

2.3 Aspectos do comportamento do aço e zircaloy

A incidência de falhas em varetas revestidas de ligas a base de zircônio se reduz nas últimas cinco décadas, em 1960 era de 1/100, já em 2005 verifica-se a taxa de 1/10⁵. O esforço tecnológico ocorre na química da água e ligas resistentes a corrosão. Desde a década de 1980, verificou-se uma tendência de fundo econômico, direcionada para a extensão dos ciclos de irradiação. Objetivando-se um menor do custo do KWh produzido. Na época, já era reconhecido que as varetas revestidas de *Zircaloy*, utilizadas em plantas comerciais suportavam condições superiores de potência linear, pressão interna, gradientes térmicos, fluxo de calor e fluxo de nêutrons. Em relação ao comportamento elástico e plástico, ou seja, o comportamento mecânico, o do aço ainda é superior ao do *Zircaloy*. No caso do revestimento de aço não seria viável a extrapolação direta relativa à experiência adquirida no passado, para os novos requisitos mais rigorosos exigidos pelos PWRs com ciclos até 45 GWd/MTU e maiores potências lineares.

Aspectos importantes e complementares se pesquisam para varetas revestidas de aço em relação ao revestimento de *Zircaloy*, por exemplo, a liberação e a difusão de trítio ³H, o único isótopo radioativo do hidrogênio, com meia vida de 12,33 anos, sendo um fraco emissor beta, (β 18,6 keV) [16,17,18]. A fração do inventário de trítio formado no dióxido de urânio pela fissão, com uma taxa de 8 x 10⁻⁵ átomos/fissão, gerado em reatores do tipo PWR estima-se que seja de 12 Ci a 21 Ci MWe/ano.

O trítio difunde-se pelo aço com facilidade, sendo liberado para o refrigerante do primário, formado basicamente, pela reação ternária do dos isótopos de urânio (²³³U, ²³⁵U) ou plutônio (²³⁹Pu, ²⁴¹Pu) e por interações alfa e captura, com boro ¹⁰B(n,2 α) ³H, hélio ³He(n,p) ³H e lítio ⁶Li(n, α) ³H [19].

Calcula-se que cerca de 10% do trítio seja produzido no combustível, sendo motivado pelos seguintes fatores:

- (i) A migração ou difusão do ^3H para fora das pastilhas de UO_2 [19].
- (ii) A penetração na superfície do revestimento por difusão.
- (iii) A difusão através do revestimento e de sua camada protetora de óxidos de ferro e cromo para o aço.
- (iv) A exposição ao trítio por ser um emissor β fraco, apresentando meia-vida longa de 12,33 anos [1,18].

Uma vez no refrigerante, o trítio continua a formar moléculas de água, e é inseparável por meios químicos. A fuga de água ou de vapor do núcleo pode expor o pessoal à radiação. Adicionalmente, a disposição apropriada da água contaminada por trítio é onerosa. A produção contínua de trítio no núcleo, combinada com sua meia-vida, manteria a sua alta atividade, em condição de operação. Mesmo que a radiação do trítio não possa ser controlada, a expressiva liberação do isótopo ^3H (1 próton e 2 nêutrons) é claramente indesejada.

A formação de trítio no refrigerante, neste caso, a água, ocorre em parte, pela captura no isótopo de boro, ^{10}B , estima-se que cerca de 90% do ^3H seja formado no refrigerante em PWRs. A difusão desenvolve-se pela lei de *Fick*, em que o trítio difunde-se através do de aço inoxidável. O coeficiente de difusão é variável, o Inconel 600 apresenta maior difusividade que o Inconel 690. A difusividade no aço é significativamente superior em relação ao *Zircaloy*, resultando em maiores inventários de trítio disperso no refrigerante em núcleos com combustíveis revestidos de aço [17,18].

Os filmes formados por óxidos aderentes às paredes interna e externa do revestimento de *Zircaloy*, desempenham um papel fundamental na captura e liberação do trítio. As medidas efetuadas para o trítio, apresentam cerca da metade dos valores previstos pela teoria da difusão, os quais são apurados em varetas de aço inoxidável, cerca de um nono dos valores previstos para varetas de *Zircaloy*. A razão postulada para essa ocorrência é que o filme de ZrO_2 é uma barreira mais efetiva para a difusão de trítio que o filme de óxido rico em Cr_2O_3 desenvolvido no aço inoxidável [1,2]. A alta solubilidade do hidrogênio no *Zircaloy*, é cerca de 150 ppm a 350 °C, comparada com 5 ppm no aço inoxidável, está associada à formação de Xe, que contribui para uma reduzida liberação de trítio no *Zircaloy*.

Então, as liberações de trítio no *Zircaloy* devem ser mínimas, mesmo para períodos de tempo maiores, associados com ciclos de queima estendida até 18 meses [3].

Na década de 1980, iniciam-se os programas de extensão dos ciclos de irradiação, com a substituição do aço inoxidável pelo *Zircaloy*. Desse modo, as liberações de trítio, não se tornaram um problema ambiental. Em 1980, as plantas nucleares no território americano produziam cerca de 150 GWe. Em 2010, somam-se 104 reatores em operação, os quais conjuntamente produzem 400 GWe. Para os combustíveis com revestimento de aço inoxidável, a liberação de trítio no meio ambiente demandaria controles adicionais onerosos para reduzir o risco da exposição radiológica [1].

Uma avaliação abrangente relativa ao comportamento e desempenho do aço inoxidável como revestimento de varetas combustíveis destinadas a reatores PWRs, complementa-se pela análise dos seus resultados, tanto em regime permanente de operação, como em transientes ou acidentes postulados. Nessas avaliações, foram investigadas e confrontadas, em primeiro lugar, as propriedades termomecânicas das varetas revestidas de aço inoxidável da série AISI 300 versus *Zircaloy*. Analisa-se o desempenho do combustível, em todas as escalas térmicas, em operação normal de 288 °C a 327 °C, ou em temperaturas elevadas até 1204 °C.

Apresentam-se as vantagens do aço como a sua estabilidade cristalina, maiores limites de tensão de escoamento, maior tensão de ruptura e reduzido acúmulo de hidretos proveniente da radiólise da água. Fundamentalmente, o propósito dessas avaliações comparativas serve para se definir as diferenças intrínsecas concernentes às propriedades neutrônicas e termomecânicas, para ambos os tipos de revestimento. Avaliam-se as repercussões no comportamento mecânico, tais como fluência e ductilidade do revestimento durante o curso dos acidentes postulados.

O desempenho da integridade do combustível sobre as diversas condições de operação é semelhante, diferindo quanto à extensão do ciclo de queima. A substituição do aço pelas ligas à base de zircônio foram realizadas na década de 1980, em parte por motivos econômicos. Acoplado-se a redução do preço do *Zircaloy* e do alto custo para o enriquecimento, o aço apresenta captura parasitária de nêutrons, acúmulo de carbeto intermetálicos, do tipo C_6M_{23} [3].

Os carbetos se alojam na região intergranular, associada a corrosão sob tensão induzida por irradiação, o aço torna-se quebradiço, além de sofrer à ativação radiológica do aço, esse foi um dos fatores da troca do aço 304 pelo 348.

Nos reatores norte-americanos da década de 1980, registra-se uma redução da quantidade de urânio no núcleo foi de 10% do utilizado com revestimento de aço [13]. Ao se considerar a substituição de aço inoxidável por *Zircaloy* como material de revestimento, existem três efeitos potenciais, os quais devem ser ponderados, para se determinar o impacto em condições de regime transiente ou acidentes postulados. Tais efeitos incluem:

- (i) Modificações nas características neutrônicas do núcleo (por exemplo, envenenamento por boro solúvel e as margens de desligamento), que podem alterar o curso de transientes e acidentes postulados.
- (ii) Diferenças nas propriedades térmicas da vareta combustível, que afetam potencialmente as condições operacionais do combustível no início dos transientes ou acidentes postulados. Durante os acidentes, a condutividade do revestimento e, a condutância da folga, se relacionam com a energia térmica armazenada.
- (iii) Diferenças nas propriedades mecânicas dos dois revestimentos, que poderiam afetar os limites, definidos para danos no combustível.

Os impactos desses efeitos foram revistos para um espectro completo de transientes e acidentes postulados para uma usina PWR típica de 1200 MWe, com exceção dos valores da redução da reatividade promovidos pela barra de controle (e, em consequência, da margem de desligamento) e do valor da concentração do boro solúvel.

O reator produzido pela *Babcock Wilcox (B&W)* em 1962, foi revestido com aço 304. O reator era um PWR com arranjo 14x14, localizado em *Buchanan*, o *Indian Point -1*. No primeiro núcleo o *Core-A*, operando de 1962 a 1965, utilizava como combustíveis o dióxido de urânio e tório, sendo que a quantidade do isótopo ^{235}U era reduzida de 1100 Kg, não eram adicionados absorvedores de nêutrons no combustível. A configuração desse reator constava de 120 elementos combustíveis com 195 varetas. No *Core-B* fabricado pela *Westinghouse* iniciado em 1966, constavam de 120 elementos e 173 varetas, mas com dióxido de urânio [1].

Uma vez que a concentração de boro dissolvido no refrigerante, formando uma solução aquosa oscile de 100 ppm a 2000 ppm, ou seja, não é constante, a concentração de boro não é contabilizada nos códigos de desempenho.

No caso dos códigos FRAPCON e do FRAPTRAN, onde a temperatura de operação do *Zircaloy* é de no máximo 360 °C, se refrigerado com água leve. Os parâmetros neutrônicos dos núcleos com revestimento de aço e de *Zircaloy* são similares, diferenciando-se quanto à seção de choque do aço com 2,9 barns, superior ao *Zircaloy*, com 0,0023 barns, para nêutrons térmicos, [4,15,16].

A conclusão é baseada na hipótese de que, em um sentido geométrico, os dois tipos de combustíveis são similares, quanto ao enriquecimento e às dimensões geométricas da pastilha. A razão fundamental para o efeito da vareta de controle e um valor de boro solúvel reduzido sendo o espectro mais duro nos núcleos de aço inoxidável. A maior captura parasitária de nêutrons térmicos no revestimento de aço inoxidável, esse tende a aumentar a energia média do espectro de nêutrons. O isótopo ^{10}B solúvel na água, é um forte absorvedor na faixa de energia dos nêutrons térmicos, torna-se menos efetivo quando a energia média dos nêutrons aumenta.

Da mesma forma, quando a energia média do espectro dos nêutrons é aumentada. Os materiais das barras de controle, tais como os da liga Ag-In-Cd, tornam-se absorvedores de nêutrons térmicos menos efetivos [3,10,].

As diferenças nas propriedades térmicas e mecânicas do aço inoxidável e do *Zircaloy* em condições de operação normal, podem impactar o curso dos transientes e acidentes postulados. De acordo com a SMSC, essas propriedades foram revisadas para verificar se nelas existiam alterações significativas e, qual é a extensão, essas diferenças poderiam afetar as condições do combustível no início dos transientes. As condições iniciais, na vareta combustível, tais como as faixa térmica de operação normal de 288 °C a 327 °C e, a pressão interna 15,5 MPa na vareta combustível, podem ter um impacto significativo no curso dos eventos postulados [1].

Os resultados dessas investigações mostraram que, na comparação entre o aço inoxidável e o *Zircaloy*, as diferenças nas propriedades térmicas, consideradas isoladamente, têm apenas um impacto secundário nas temperaturas de operação da vareta combustível e na pressão interna do gás.

Essa conclusão foi baseada na hipótese de que as características das pastilhas combustíveis e a geometria das varetas são as mesmas para os dois tipos de varetas. Por outro lado, diferenças nas propriedades mecânicas, principalmente na taxa de deformação por fluência (*creep*), podem ter um efeito maior [20-24].

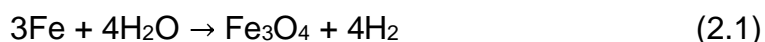
A deformação por fluência pode ter um impacto significativo na temperatura de operação do combustível e, por conseguinte, na liberação de gases de fissão e na pressão da vareta combustível, como resultados dos efeitos de realimentação termomecânica [23]. No início do ciclo de irradiação, as temperaturas de operação são governadas pela condutância da folga, ou seja, o espaçamento entre pastilha e o revestimento. Se o revestimento é resistente à fluência, a condutância da folga diminui com a irradiação, quando a pastilha combustível sofre densificação, o que, em consequência, aumenta a folga pastilha-revestimento. O aumento da folga aumenta a temperatura do combustível e a liberação de gases para o volume livre na vareta combustível. A presença de outros produtos de fissão gasosos, diluem o gás hélio pressurizado, diminuindo a condutância da folga, aumentando a temperatura do combustível e, em consequência, a liberação de gases [3].

Com revestimento de *Zircaloy*, o aumento inicial da folga pastilha-revestimento, por causa da densificação, é parcialmente compensado pela fluência do revestimento [21]. As temperaturas de operação em regime permanente e a energia armazenada no combustível atingem um valor máximo na faixa entre 4 a 10 GWd/MTU nos combustíveis com revestimento de *Zircaloy*. Em revestimentos de aço inoxidável, é esperado que a temperatura máxima em regime permanente ocorra na mesma faixa de queima e que a energia armazenada seja a mesma, caso a deformação por fluência, nesse caso seja similar àquela do *Zircaloy* [22]. Na prática, o projetista tem a possibilidade de ajustar a folga inicial, a pressão interna da mistura gasosa na folga, etc., de forma que as diferenças térmicas entre os dois tipos de combustíveis sejam mínimas. Na avaliação das propriedades mecânicas sob condição de acidentes postulados, foram discutidas para os dois tipos de revestimento as reações metal-água, oxidação, fusão, reação com outros componentes, ruptura e a deformação (*ballooning*) do revestimento [24,25]. Testes fora do reator foram conduzidos no ANL utilizando-se um forno autoclave de alta pressão, construído especialmente para essa finalidade, o qual já tinha sido utilizado para testar *Zircaloy-UO₂* na presença de vapor de alta temperatura.

Os resultados desses testes mostraram que, para o aço inoxidável a quantidade de hidrogênio aumenta com a temperatura da amostra em função do tempo de teste.

A quantidade de hidrogênio era simplesmente uma medida da quantidade de aço inoxidável que reagiu. Ela não era dependente da vazão de vapor ou da pressão no teste, implicando que a taxa de reação era limitada pela cinética na superfície aço-água. Os testes demonstraram que as varetas de aço-UO₂ nas temperaturas acima de 1400°C reagem com o vapor produzindo um aço inoxidável oxidado com aparência de espuma (*foamy*), rico em Fe₃O₄. O processo foi chamado de espumante (*foaming*) [1]. Nas temperaturas abaixo de 1400 °C, somente uma reação aço-água moderada ocorreu nos 8 minutos de teste. Esse tipo de espuma formada no aço inoxidável é acompanhado de grandes aumentos em volume. Nas áreas em que essa reação ocorreu, os produtos dessa reação expandiram dentro dos canais entre as quatro varetas, gerando alguma conexão entre elas. Uma interação entre o aço inoxidável e o UO₂ foi observada naquelas áreas que atingiram temperaturas por volta de 1400 °C ou maiores. A reação entre o combustível e o aço inoxidável não foi preocupante, e não limitava o desempenho do combustível ou diminuía a temperatura de pico do revestimento [1].

A reação de aço inoxidável com a água produz óxidos ricos em ferro FeO, Fe₂O₃ e Fe₂O₄, assim como significativas quantidades de Cr₂O₃ e NiO₂. [3] Para propósitos analíticos, no cálculo de calores de formação e quantidade de hidrogênio liberada, a maioria dos investigadores assumiram que a oxidação do ferro para a magnetita (Fe₃O₄) dá uma representação adequada da reação aço-água [10].



Do mesmo modo, $\text{Zr} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{ZrO}_2 + 2\text{H}_2$ dá os produtos da reação *Zircaloy*-água, apesar de que outros gêneros se formam quando o *Zircaloy* reage com a água ou o vapor. Desde que quantidades iguais de hidrogênio sejam geradas por unidade de água que reagiu, diferenças entre aço e *Zircaloy* durante um dado acidente serão determinadas pela cinética das reações, e não por considerações estequiométricas.

Os valores do calor de reação para formar a magnetita e a zircônia em função da temperatura mostram entalpias menores para as reações do aço quando comparadas com as reações com zircônia e acopladas com reduzidas taxas de oxidação abaixo de 1075 °C.

As entalpias resultam em um menor aumento de temperatura nos revestimentos de aço inoxidável em consequência das reações metal-água [3,10]. A fragilização por oxigênio é uma consideração limitante para revestimentos de *Zircaloy* durante os acidentes postulados. Para aços inoxidáveis, ao contrário, a fragilização por oxigênio não é um fator limitante, uma vez que a solubilidade do oxigênio em aço é insignificante, comparada aos 30% que podem ser absorvidos por zircônio [5,8]. Para o aço, as condições limitantes são a completa perda de resistência que ocorre a temperaturas maiores do que 1300 °C e a rápida reação com vapor que ocorre acima de 1400 °C.

O mais baixo ponto de fusão dos aços inoxidáveis austeníticos, 1425-1450 °C, comparado com o do *Zircaloy*, 1850 °C, mostrou não ser fator limitante para suas aplicações como revestimento. Foi demonstrado que as reações aço inoxidável e UO₂ não ocorrerão a taxas apreciáveis nas temperaturas abaixo de 1204 °C. Reações químicas em alta temperatura entre aço inoxidável e UO₂ são limitadas. Nenhuma reação ocorreu entre UO₂ e aço inoxidável abaixo de 1400 °C, e o aço inoxidável pode fundir em contato com UO₂ sem grandes reações.

Os revestimentos de aço inoxidável foram usados em conjunto com grades espaçadoras de Inconel - 600, liga à base de níquel e/ou aço inoxidável. Então, não haveria uma preocupação maior com a formação de fases com menores pontos de fusão entre o aço inoxidável e as grades desses tipos.

Ao contrário, *Zircaloy* foi utilizado em elementos combustíveis usando grades com ligas à base de níquel. Diagramas de fase binários mostraram que zircônio pode formar fases com pontos de fusão menores com ferro a 930 °C e com níquel a cerca de 960 °C. As grades espaçadoras do reator da *Westinghouse* AP1000 um PWR 17x17, atualmente, são fabricadas de (Zr;1%Nb) ou Zirlo [38,42].

Vários testes foram conduzidos comparando-se aço inoxidável e *Zircaloy* em condições de transientes/acidentes [1]. Para acidentes de perda de refrigerante primário (APRP) por grande ruptura, foi demonstrado que aço inoxidável apresenta uma melhor integridade para esse tipo de acidente, pelas seguintes razões:

- (i) Até temperaturas na faixa de 1072 °C a 1194 °C, a taxa parabólica para reação metal-água é menor para aço inoxidável do que para *Zircaloy* [3,10].
- (ii) O calor da reação exotérmica é significativamente menor para aço inoxidável do que para *Zircaloy*, gerando uma menor contribuição nas excursões de temperatura no revestimento.
- (iii) A mais baixa ductilidade do aço inoxidável resulta em uma menor deformação do revestimento e em um bloqueio de canal mais reduzido o que pode melhorar o resfriamento do núcleo durante o período de remolhamento nesse acidente, comparado ao revestimento de *Zircaloy*. Isso também tende a mitigar a transferência de calor associada com as grandes deformações (*balloning*) [9].
- (iv) Para temperaturas abaixo do ponto de fusão (1400°C), a tensão máxima de resistência mecânica *Ultimate Tensile Strength (UTS)* do aço é maior do que a do *Zircaloy* [27]. Desse modo, resulta em um número menor de varetas rompidas durante um APRP [21]. Essas temperaturas não são bem definidas, mas são de pelo menos 1204 °C. Isso reduz ainda mais a quantidade de reação metal-água, desde que, após a ruptura, as reações metal-água e os calores das reações exotérmicas têm de ser calculados para as superfícies interna e externa do revestimento.

2.4 Análise de transiente por excesso de reatividade

Os casos de falhas com revestimento de aço relatados ocorreram em reatores *BWRs* como o *La Crosse*. A causa determinada fora devido à corrosão sob tensão assistida por irradiação a *Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking (IASCC)* adicionada à corrosão sob tensão *Stress Corrosion Cracking (SSC)*, conjuntamente com à interação mecânica entre pastilha e revestimento, *Pellet-Cladding Mechanical Interaction (PCMI)* [1]. O impacto da PCMI é um fator de licenciamento da planta e deve constar no relatório final de segurança, *Final Safety Analysis Report (FSAR)*.

O aquecimento rápido do revestimento pode ultrapassar o fluxo crítico de calor *Critical Heat Flux* (CHF) e iniciar a partida da ebulição nucleada *Departure from Nucleate Boiling* (DNB). A PCMI pode iniciar as condições de um acidente postulado LOCA e/ou um acidente do tipo RIA [42,73,80].

Os testes foram realizados pela empresa *General Electric* (GE), fornecedor de reatores e varetas combustível para BWRs.

As varetas foram irradiadas nos reatores *Dresden*, *Big Rock* e *Humboldt Bay*. Os resultados das análises de pós-irradiação, apontaram para uma forte dependência das falhas com a queima de forma secundária, com a potência linear de 5,3 kW/m a 9,0 kW/m. Essencialmente, com revestimento de aço, todas as varetas que falharam estavam em condições limítrofes dos ciclos de irradiação da época, com valores de até 30 GWd/MTU para BWRs.

Os ciclos de irradiação, em parte dos casos acima são de até 20 GWd/MTU, quando ocorre o fechamento da folga. Desse modo, desenvolve-se o contato rígido entre o aço e o dióxido de urânio, o qual tende a se expandir, deformando o revestimento de aço já fragilizado pela redução da taxa de fluência (*creep*) e pela perda da ductilidade [1].

Os projetos de pesquisas internacionais que apresentam como objetivo o comportamento do combustível nuclear no estado transiente contabilizam um total de 140 casos de acidentes RIA sendo 13 com combustível *Mixed Oxide Fuel* (MOX). Os casos pesquisados abrangem reatores PWR, BWR e VVER. Os critérios de segurança aceitos são resultados empíricos obtidos por projetos de pesquisa internacionais.

Nesses casos, alguns fenômenos se sucedem sequencialmente, a temperatura do aço torna-se mais elevada e intensifica-se o ataque por corrosão intergranular, formando M_6Cr_{23} , depletando o cromo e facilitando a ruptura do revestimento [91]. As tensões internas são intensas e a alta temperatura reduzem a fluência mecânica do material. A deformação em virtude do inchamento do combustível pode romper o aço nessas condições. Para reduzir os danos da corrosão intergranular no aço inoxidável 304 Cr (8-11%), o Ni (18-20%), sem estabilização, foi usado quase que na totalidade dos reatores PWRs do passado, com exceção da planta *Yankee Rowe*, um PWR que fez uso do aço 348 Cr (9-13%), Ni (17-20%), estabilizado com tântalo e cobalto.[51]

Quanto, ao reator *La Crosse*, um dos poucos reatores produzidos pela *Allis Chalmers*, a empresa produzia tratores e desenvolveu um BWR-10x10, na cidade *La Crosse* em *Wisconsin*, utilizou o aço 347 estabilizado com tântalo e nióbio, com ciclos de irradiação de 11 a 22 GWd/MTU [1].

A polêmica do aço versus Zircaloy inicia-se em 1979, novamente o tema ressurge em 2010, no caso de Fukushima pelos mesmos motivos. Na década de 1980, poucos reatores utilizavam aço como revestimento.

Nas investigações preliminares para o acidente de *Three Mile Island* (TMI), um PWR de 800 MWe projetado pela B&W, colocado em estado crítico em 1974, foram exibidos alguns aspectos, como a potencialidade apresentada pelo zircônio de oxidar-se formando uma bolha de (1000 pés³) de hidrogênio ou 28,17 m³, em um acidente por perda do líquido refrigerante, devido uma pequena ruptura. Existe a possibilidade do revestimento de zircônio oxidar-se completamente antes de derreter. O núcleo do reator TMI foi atingido na região central derretendo em sequência as grades de Inconel, o *Zircaloy* e o dióxido de urânio nas varetas centrais, formando compostos cerâmicos (U, Zr) O₂ com varetas intactas na periferia, desse modo, demonstra-se que:

- (i) Nas temperaturas do revestimento abaixo de 816 °C, os dois materiais comportam-se adequadamente, e existe pouca razão em se preferir um outro do ponto de vista de um acidente[1].
- (ii) Com o revestimento nas temperaturas de 816 °C a 1204 °C, o aço inoxidável austenítico tem um comportamento melhor do que o *Zircaloy* [1].
- (iii) Com o revestimento em temperaturas acima de 1204 °C, o *Zircaloy* oferece certas vantagens sobre o aço inoxidável. As taxas da reação água-*Zircaloy* são menores e essa liga tem resistência maior perto e acima do ponto de fusão do aço inoxidável considerada de 1400 °C a 1450 °C.[1].
- (iv) Para um acidente da severidade do TMI com picos de temperatura no revestimento acima de 1204 °C, o aço inoxidável não ofereceria vantagem sobre o *Zircaloy*. A rápida oxidação do aço inoxidável nas temperaturas acima de 1316 °C, junto com a sua baixa resistência mecânica próxima do ponto de fusão, tenderia a favorecer o *Zircaloy*.

Se o aço inoxidável fosse substituir o *Zircaloy* em usinas comerciais, ele estaria sujeito a: maiores cargas termomecânicas; pressões mais elevadas no sistema; potência linear mais elevada; maiores temperaturas no refrigerante e maiores fluxos de calor em comparação aos valores utilizados pela indústria nuclear. Sendo assim, nas varetas combustíveis de aço inoxidável, os efeitos dessas variáveis sobre a confiabilidade do aço são desconhecidos.

Comparações econômicas para ciclos de irradiação do combustível em um reator do tipo PWR de 4 circuitos (*loops*) mostraram que os custos do combustível de aço inoxidável são significativamente maiores do que os do combustível revestido de *Zircaloy* em condições razoáveis, uma vez que o combustível deve apresentar maior enriquecimento [1,29,30]. A corrosão uniforme do aço inoxidável austenítico não é um problema em PWRs. O armazenamento de longa duração de combustíveis queimados revestidos de aço inoxidável em piscinas requer cuidados com a química da água adequada e controle para minimizar o potencial para corrosão sob tensão [15].

A difusividade do trítio através do aço inoxidável é maior do que a mensurada no *Zircaloy*, e contribui para o fato de que a liberação de trítio para PWR com varetas de aço inoxidável seja significativamente maior do que para usinas com varetas de *Zircaloy*. A questão de se escolher entre o *Zircaloy* ou o aço inoxidável, no que concerne ao fornecimento de melhor integridade durante um acidente postulado depende do acidente a ser considerado. As seguintes conclusões gerais se aplicam para aço inoxidável e *Zircaloy* sob condições de acidentes em temperatura elevada: A oxidação rápida do aço inoxidável em temperaturas acima de 1316 °C e sua baixa resistência mecânica próxima ao ponto de fusão tendem a favorecer o *Zircaloy*.

Após reagir com a (H₂O) em temperaturas acima de 1400 °C, o aço inoxidável produz um material oxidado com a aparência de uma espuma, rica em Fe₃O₄. Essa reação resulta em um acréscimo de volume, o que, eventualmente, levando o bloqueio do canal de refrigeração.

O uso extensivo de revestimento de aço inoxidável em PWRs modernos irá requerer o licenciamento de fabricação e instalações de armazenagem para manipular enriquecimentos maiores. Testes de segurança adicionais seriam necessários para desenvolver novos modelos os quais seriam incorporados em códigos de análise de desempenho do combustível, seguindo normas específicas.

Na década de 1970, iniciam-se os testes relativos aos transientes de reatividade com revestimentos de *Zircaloy*, mostrando que a preocupação já despontava com o comportamento da liga, a qual deveria suportar condições de trabalho superiores às do aço. As pesquisas relativas a transientes balizaram os testes realizados com revestimento de aço, sumariamente, tem-se:

- (i) O INL desenvolveu em *Scoville, Idaho*, de 1969 a 1970, um projeto de pesquisa de transientes denominado *Special Power Excursion Reactor – Capsule Driver Core* (SPERT-CDC) [76].
- (ii) Inicia-se, em 1975, no Japão, um projeto de pesquisa de transientes desenvolve-se em Tokai, no reator *Nuclear Safety Research Reactor* (NSRR). O reator NSRR é do tipo TRIGA, exclusivo para pesquisa de segurança e desempenho de combustível nuclear com mais de 3.150 operações de pulso e mais de 1330 experiências de irradiação de combustível já concluídas.
- (iii) O INL desenvolveu também na localidade de *Scoville, Idaho*, de 1978 a 1980, um projeto denominado *Power Burst Facility* (PBF). O reator PBF operou de 1972 a 1985 [76,80].
- (iv) O Instituto *Kurchatov* desenvolveu no Cazaquistão, de 1990 a 1992, um projeto denominado *Pulse Grafite Reactor* (IGR) um reator de testes para transientes de reatividade com pulsos longos [76].
- (v) O Instituto *Kurchatov* desenvolveu em *Sarov*, de 1997 a 2000 um segundo projeto de pesquisa denominado *Fast Pulse Graphite Reactor* (BIGR) [76].
- (vi) O projeto investigativo francês voltado para transientes de reatividade desenvolvido na localidade de *Cadarache*, de 1993 a 2002, (CABRI), utilizou refrigeração por sódio.

2.5 Análise de transientes por perda do refrigerante

A condição de acidente mais temível, num reator nuclear, é a fusão dos elementos combustíveis. Portanto, é imperativo que, sob quaisquer situações, não falte uma refrigeração adequada ao núcleo do reator.

Uma análise da árvore dos estados possíveis, demonstra-se a possibilidade de falta de refrigeração no núcleo, obviamente, a condição mais severa seria causado pela ruptura do circuito primário do reator [29,30]

A deficiência de refrigeração pode ser causada por inúmeros eventos, desde abalos sísmicos, ruptura de dutos ou a falta de energia elétrica possibilitando falha na bomba do primário. Na década de 1960, iniciam-se o esforço para modelar os escoamentos monofásico e bifásico, com conexão das equações da cinética pontual para reatores. Os códigos apresentam soluções numéricas para um sistema de equações diferenciais, capaz de simular a perda da capacidade de refrigeração. Os modelos numéricos utilizavam volumes de controle associados a soluções por métodos de diferenças finitas, acoplados a sistemas de equações diferenciais parciais discretas no tempo.

Os códigos são resultados da iniciativa conjunta dentre institutos de pesquisas tais como: ANL, EPRI, PNLL, CEA e desenvolvedores como Babcock & Wilcox, Westinghouse AREVA e EDF [80]. O código FLASH destinava-se ao cálculo de um acidente postulado de perda do refrigerante, escoamento, pressão e temperatura do sistema primário. A primeira geração foi desenvolvida pela Babcock & Wilcox, o código FLASH-1 (1966) sequencialmente o FLASH-2 (1967).

A série de códigos FLASH foram os antecessores ao código REALP. As investigações iniciaram-se em 1966, relativas aos acidentes postulados por perda do fluido refrigerante, o código FLASH, foi codificado em linguagem FORTRAN-IV. O núcleo do sistema é composto por um grupo de equações da cinética de reatores e decaimento do calor da irradiação, divide o circuito primário em três volumes de controle. O modelo de transferência de calor era unidimensional e o fluido é tratado como uma mistura homogênea de líquido e vapor.

Aperfeiçoando o código "FLASH 2" pela *Babcock & Wilcox*, em 1973, desenvolveu o código CRAFT, esse utiliza-se até 40 volumes de controle, para simular e um reator sob a influência de um LOCA [42,73,80]. O código posterior FOAM foi baseado no anterior CRAFT. A *Westinghouse*, por sua vez, desenvolveu na década de 1970, os códigos LOCTA e SATAN-V e VI (1974) com 43 volumes. Promovendo o acoplamento e a interação de 3 modelagens: (i) um módulo de cinética nuclear; (ii) um módulo de análise da barra combustível; (iii) um módulo de termo hidráulica.

O RELAP foi desenvolvido em 1975, pela empresa *Aerojet General Corporation*, mas o reconhecimento do poder de simulação solidifica-se na década de 1980, com o RELAP se calcula o escoamento, a pressão e temperatura no sistema primário de um reator. A primeira versão suportava até 193 volumes. Sinteticamente a evolução da versão do código RELAP4, atualizado novamente, em 1985 para o RELAP 5 e finalmente, em 2005 para a versão atual RELAP5/3D [3]. No decorrer da evolução, através de gerações, apontam-se outros códigos similares ao RELAP, utilizados desde de a década de 1980 como:

- i. O código desenvolvido na França, pela EDF, CEA e AREVA-Np, destinado a reatores PWR e VVER *Code for Analysis of Thermal-Hydraulics during an Accident of Reactor and safety Evaluation* (CATHARE);
- ii. Os códigos *COolant Boiling in Rod Arrays* (COBRA), desenvolvido no PNLL.
- iii. O código desenvolvido no *Los Alamos National Laboratory* (LANL) *Transient Reactor Analysis Code* (TRAC)
- iv. O código desenvolvido na Alemanha pela empresa GRS, *Analysis of Thermal-hydraulics of LEaks and Transient* (ATHLET).

2.6 Análise de propriedades do aço

Em geral, os aços austeníticos são empregados nos reatores térmicos e rápidos, como elementos estruturais. Entre as aplicações temos: revestimentos internos do vaso de pressão, revestimento do combustível nuclear, dutos e acessórios. Os aços da série 300 são designados para temperaturas entre 650 °C a 750 °C [28]. A austenita não é suscetível ao processo de endurecimento por tratamento térmico [56]. Sua composição química é de 6% a 26% de níquel, de 16% a 30% de cromo, com menos de 0,03% de carbono [28]. Os aços austeníticos apresentam, em temperatura ambiente, baixo limite de escoamento, alto limite de resistência à fratura e elevada ductilidade, também apresentam boa soldabilidade e resistência à corrosão [27,28].

Os reatores de fluxos térmicos refrigerados por água leve diferem dos reatores de nêutrons rápidos regenerativos refrigerados a sódio líquido ou NaK. Verifica-se que as ligas à base de zircônio não são apropriadas para altas temperaturas, fluência e o espectro de nêutrons rápidos [2].

Entre 1970 a 1980, desenvolve-se um ciclo de construção de reatores rápidos, os *Liquid Metal Fast Breeder Reactors* (LMFBR), na França, o reator PHENIX (1973/74) e, no Japão, MONJU (1985), o revestimento adotado foi o aço austenítico AISI 316, empregado para fluências de até 60-80 dpa ($6-8 \times 10^{22}$) n/cm², uma vez que, para fluência superiores, verifica-se inchamento substancial do aço. Nesses casos, o diâmetro do combustível é menor, e o enriquecimento, é maior. A queima do combustível em um reator de água leve enriquecido até 5% proporciona um rendimento de até 4% sobre o enriquecimento, com adição de gadolínio na forma Gd₂O₃. Nos reatores rápidos, a queima chega a 15%, e o combustível apresenta maior durabilidade. Nos reatores rápidos, a altura da pastilha é de 7 mm, e o diâmetro, de 6 mm. O diâmetro externo do revestimento tem de 6 mm a 8 mm. O revestimento do combustível de reatores rápidos é o aço austenítico 316, com trabalho a frio de 20%, contendo de 16% a 18% de cromo, de 10% a 14% de níquel e de 2% a 3% de molibdênio, com baixos teores de carbono, nióbio, silício e fósforo; em geral, o combustível é composto de óxido misto de urânio e plutônio. A faixa térmica de operação nos reatores rápidos é superior à dos reatores térmicos. Na TABELA 2.2 apresentam as propriedades do aço e do zircaloy.

TABELA 2.2 - Propriedades do Zircaloy 2/4 e aços 348 e 347

Propriedades Físicas	Zr-4	Zr-2	348	347
Densidade (g/cm ³)	6.56	6.56	8.0	8.0
Módulo de Poisson	0.370	0.370	0.27	0.27
Módulo de elasticidade (GPa)	99.3	99.3	200	200
Limite de resistência (MPa)	413	413	515	500
Limite de escoamento (MPa)	241	241	205	210
Módulo cisalhamento (GPa)	36.2	36.2	77	80
Elongação (%)	20	20	42	40
Dureza (HRB)	89	89	88	85
Ponto de Fusão (°C)	1850	1850	1430	1400
Expansão térmica (10 ⁻⁶ m/°C)	5.7	5.7	17.3	16.5
Condutividade térmica (W/m-K)	21.5	21.5	16.3	15
Calor específico (J/Kg-K)	285	285	500	500
Resistividade (Ωmm ² /m)	0.73	0.73	0.75	0.73

Os efeitos da irradiação diferem quantitativamente entre o aço e as ligas à base de zircônio, porém qualitativamente são os mesmos.

Inicialmente, verifica-se que a transformação de fase do *Zircaloy* gera uma instabilidade no material na faixa térmica, de 810 a 975 °C; a temperatura de 865 °C é considerada de transição. Os efeitos da irradiação do aço inoxidável foram pesquisados inicialmente, nos aços AISI 304, 347 e 348. As pesquisas foram realizadas para aferir alterações das propriedades mecânicas, limite de tensão e escoamento e ruptura [27]. Os resultados dos ensaios em amostras irradiadas no reator ETR para fluências de nêutrons rápidos ($E > 1\text{MeV}$) foram desde 5×10^{21} a 3×10^{22} n/cm² [2].

O objetivo é resistir à corrosão intergranular desenvolvida pela precipitação de carbeto metálicos, $M_{23}C_6$, ou ainda M_7C_3 na forma $(Cr, Fe, Mn)_7C_3$, ou evitá-la [92]. Os carbeto podem ser compostos de cromo, níquel, ferro ou nióbio $(Cr, Ni, Fe, Nb)_{23}C_6$, sendo o cromo o mais significativo, $Cr_{23}C_6$. A formação de carbeto promove redução no teor de cromo e adição de elementos com afinidade pelo carbono, tais como nióbio, tântalo, tálio ou titânio, caso sejam elementos presentes na liga [28]. O processo de sensibilização desenvolve-se por adição de elementos na liga, elementos que reagem com carbono e desenvolvem carbeto.

O aço AISI tipo 321 é estabilizado com titânio, contendo acima de 17% de cromo [28]. A precipitação do titânio evita a redução do cromo. Outra solução é reduzir o teor de carbono para teores percentuais abaixo de 0,03% C, em peso. Entretanto, a redução do carbono abaixo desse limite compromete a dureza e a resistência mecânica do material [28]. Os aços inox, por oxidação do cromo, desenvolvem uma fina película apassivadora, de espessura de 0,02 µm. Existem aços resistentes à corrosão, como as ligas cromo-níquel-manganês, no aço tipo 304, no qual o manganês aumenta a resistência à corrosão por ácido sulfúrico.

O aço não sofre alteração na estrutura cristalina, a austenita é metaestável, com arranjo cúbico de face centrada (CFC), mas sofre pequenas transformações martensíticas localizadas em baixas temperaturas [27,28]. O ponto de fusão do aço é inferior ao do *Zircaloy*, tornando-se uma desvantagem, [30,31].

O níquel acelera também a aspereza dos precipitados, fazendo com que a resistência à fluência seja reduzida a longo prazo. O manganês estabiliza a austenita. O níquel conta com maior capacidade de estabilização, mas tem o mesmo efeito dos carbonetos, reduzindo a força de deslizamento.

O cobre também tem um efeito estabilizador austenítico, embora sua finalidade principal na liga seja melhorar a resistência à fluência (creep) [23]. O cobre, quando irradiado em aços ferríticos, agrega precipitados, fragilizando o aço.

As seguintes propriedades sofrem um decréscimo com a irradiação:

- i. Massa específica densidade;
- ii. Condutividade térmica;
- iii. Condutividade elétrica, resistência ao impacto;
- iv. Resistência à ruptura.

As propriedades elasto-plásticas também se alteram, contudo de modo distinto. As seguintes propriedades sofrem acréscimo: (i) módulo de elasticidade;

- i. Limite de escoamento;
- ii. Limite de tensão de ruptura; (iv) taxa de fluência em alta temperatura;
- iii. Alteração da temperatura de transição dúctil frágil.

O calor específico do zircônio metálico é 285 J/(g-K) e o calor específico do aço é 500 J/(g-K). O *Zircaloy*, durante a transformação de fase, apresenta um valor máximo, por causa do balanço energético [21-26].

Durante a alteração cristalina, na fase ($\alpha+\beta$), entre 809,75 °C e 974,85 °C, o calor específico sofre um acréscimo, para a 816 J/(g-K), na temperatura de 920 °C, sendo superior ao do aço inoxidável. O aço 348, na mesma temperatura, apresenta calor específico de 545 J/(g-K) [31,32].

Numa análise de dados experimentais, observa-se que a condutividade térmica do *Zircaloy-4* é ligeiramente superior à do *Zircaloy-2* [8,33,37]. A deposição de hidrogênio fragiliza o revestimento, sendo considerado seguro o limite empírico de 400 ppm, ou quando a camada de óxido atinge 100 μm , em ciclos de irradiação longos [3].

A solubilidade do hidrogênio no *Zircaloy* é limitada e, quando ultrapassada, obtêm-se precipitados, os hidretos de zircônia. A fragilização por hidrogênio pode ser definida como a perda de ductilidade ou a redução da capacidade de absorver energia mecânica de um material devido à presença do hidrogênio [5,6]. O coeficiente de dilatação térmica linear do *Zircaloy* é menor do que o do combustível dióxido de urânio, contribuindo para o fechamento da folga.

A expansão térmica do Zircaloy é mais pronunciada em uma direção devido à anisotropia da liga. Embora a anisotropia se reduza com a temperatura, na fase Zr(β), o *Zircaloy* apresenta-se como cúbico de corpo centrado, sendo isotrópico.

2.7 Acúmulo de hidrogênio

Os transientes de reatividade têm como resultado um rápido aumento de energia depositada na vareta. O gradiente térmico produz um aquecimento adiabático nas pastilhas. O pulso de energia potencialmente produz uma interação mecânica, em que o dióxido de urânio aquecido produz tensão de contato na parede interna do revestimento.

A oxidação do zircônio em altas temperaturas produz quantidades consideráveis de hidrogênio; no caso do aço, não ocorre da mesma forma. As causas imediatas do acidente sucedido na usina nuclear de *Fukushima Daiichi*, localizada no Japão, em março de 2011, sucedeu-se a fusão do núcleo dos reatores e as explosões do gás hidrogênio, após os sistemas elétricos terem sido atingidos por um maremoto e tsunami. Durante o processo de fusão do dióxido de urânio, o zircônio no revestimento do combustível reagiu com a água, produzindo uma grande quantidade de hidrogênio.

Esse hidrogênio, combinado com materiais radioativos voláteis, vazou da área de contenção e penetrou no edifício do reator, resultando em explosões nos edifícios das unidades 1, 2 e 3. Atualmente, o aço inoxidável austenítico tem-se apresentado com uma possível solução para os problemas de segurança relacionados à produção e à explosão do hidrogênio acumulado resultante da oxidação. O uso de aço inoxidável austenítico tem a vantagem de não apresentar as reações de oxidação violentas semelhantes às que ocorreram com as ligas de *Zircaloy* em altas temperaturas. [4,11].

No que tange à vulnerabilidade das ligas à base de zircônio, é decorrente da oxidação e do efeito da radiólise da água, produzindo concentrações de hidrogênio dissolvido no refrigerante, resultado de irradiação. Em temperaturas acima de 900 °C, o processo de oxidação e a cinética química acumulam altas quantidades de hidrogênio.

A importância do zircônio na tecnologia nuclear está ligada à sua baixa seção de choque de absorção de nêutrons térmicos de 0,0023 barns. Contudo, o zircônio tem baixa ductilidade. Quando o zircônio atinge 400 °C, o coeficiente de difusão do oxigênio duplica-se. A 1100 °C, o zircônio reage exponencialmente com o vapor da água, sendo o zircônio um dos metais mais reativos quimicamente.

São aplicadas duas estratégias de mitigação de risco do acúmulo de hidrogênio produzido pela oxidação do zircônio. A estratégia proposta na década de oitenta promovia a diluição de atmosfera de contenção com um gás inerte para evitar a combustão e a ignição do hidrogênio. Na década de noventa uma opção alternativa surgiu com a oxidação catalítica, tentando remover hidrogênio antes de chegar a frações inflamáveis. A oxidação catalítica é adotada pelos recombinadores autocatalíticos passivos.

Os *Passive Autocatalytic Recombiners* (PAR) são dispositivos de segurança que combinam o hidrogênio e o oxigênio produzindo vapor de água, e são fabricados pelas empresas AREVA (França/Alemanha), NIS (Alemanha) e AECL (Canadá). Os recombinadores de hidrogênio provocam a redução com acúmulo abaixo de 4%, limite seguro de concentração. Os recombinadores de hidrogênio não estavam instalados em Fukushima.

3 CONSTRUÇÃO DOS PROGRAMAS IPEN-SSP e IPEN-SST

Em virtude do grande número de interações entre os fenômenos físicos, químicos e termomecânicos que ocorrem em uma vareta combustível, durante a irradiação, é necessário desenvolver os cálculos utilizando-se programas computacionais.

3.1 Modelagem dos materiais nucleares

Neste trabalho, as alterações de rotinas codificadas em linguagem FORTRAN foram adequadas, de maneira que se possibilite o uso do aço inoxidável, como revestimento da vareta combustível em reatores PWRs e BWRs.

A biblioteca contendo as propriedades dos materiais para reatores de água leve, é descrita nos guias regulatórios, contendo os resultados das pesquisas publicadas mantidas e atualizadas pela US-NRC, nos documentos denominados de NUREGs. A biblioteca de propriedades é descrita nos guias homologados:

- (i) NUREG/CR-0497 [10], NUREG/CR-6150, MATPRO [3];
- (ii) NUREG/CR-6534, FRAPCON volumes 1 - 4, [33-36];
- (iii) NUREG/CR-6739, FRAPTRAN, volumes 1 e 2, [8,29];
- (iv) NUREG/CR-7024, FRAPCON/FRAPTRAN [37].

Documentos específicos e internacionalmente aceitos como base das especificações utilizadas foram pesquisados para modelagem do aço austenítico. Entre esses organismos, seguimos os dados disponibilizados pelos órgãos reguladores ou associações internacionais de fornecedores, [27,28,31,32], aqui enumerados:

- (i) *American Standard Testing Materials* (ASTM), Associação Americana de Teste de Materiais; atualmente a ASTM disponibiliza cerca 12000 normas utilizadas internacionalmente.
- (ii) *American Iron and Steel Institute* (AISI), Instituto norte-americano de Ferro e Aço. O AISI desempenha um papel essencial na expansão e no crescimento dos mercados para as aplicações empregando aço.
- (i) *Electric Power Research Institute* (EPRI), Instituto de Pesquisa de Potência Elétrica, norte-americano, o qual desenvolve o código de desempenho *Fuel Analysis and Licensing Code* (FALCON).

- (ii) *International Atomic Energy Agency* (AIEA), sediada em Viena, é organismo internacional de cooperação mais importante, fundado em 1957. Mantém e atualiza programas internacionais de colaboração relativos a segurança e operação e a tecnologias de combustíveis.
- (iii) US-NRC a Comissão Regulatória Nuclear Americana, praticamente normatiza, encarrega-se das NUREGs relativas a operação, segurança e licenciamento das plantas nucleares.

Em relação à experiência com aço relatam-se os documentos produzidos em parceria com o EPRI e a SMC [1]. Desenvolve-se uma análise comparativa entre os aços, destinados para revestir o dióxido de urânio; verificam-se que os aços dos tipos 304, 347 e 348 foram utilizados em reatores de 1960 a 1990, paulatinamente substituídos por ligas de zircônio [1,3,10].

Dessa forma, analisam-se as modelagens pertinentes ao combustível e ao revestimento e às suas repercussões nos estados permanente e transiente. Analisam-se ao mesmo tempo a compatibilidade dinâmica, que envolve a fissão do combustível enriquecido, o processo de transferência de energia térmica produzida e os aspectos concernentes aos fenômenos de transporte de calor e massa, contemplando o comportamento elástico, plástico e termomecânico. As propriedades do aço são complementadas aos efeitos do espectro de irradiação de nêutrons rápidos ($E > 1\text{MeV}$). As novas correlações abrangem propriedades como: o endurecimento por irradiação, a perda da ductilidade e o crescimento por irradiação, dentre outras [3,37].

3.1.1 Análise das variáveis de entrada

Os códigos de desempenho adequados, aqui denominados de IPEN-CNEN/SS, são alimentados com as variáveis de entrada, descritas por um arquivo do tipo texto chamado de arquivo de entrada. Nesse arquivo, são descritos o número de nós axiais, com limite máximo de 18 nós para o comprimento ativo da vareta e o número de nós radiais da pastilha, com limite de 40 nós. As variáveis referentes à irradiação, como o perfil de queima, são descritas por meio das taxas lineares de potência em cada nó.

Quanto ao aspecto dimensional, praticamente todas as dimensões geométricas da pastilha e revestimento são descritas. No que se refere ao aspecto termodinâmico, define-se a cada incremento de tempo um fluxo mássico do refrigerante correspondente, da mesma forma, a temperatura de entrada do refrigerante e a pressão interna. Quanto aos materiais, definem-se o tipo de revestimento e a classe de reator escolhido, ou seja, reatores PWRs e BWRs. Definem-se, em caráter complementar, a rugosidade e temperatura de sinterização do revestimento. Seleciona-se a opção dos modelos disponíveis para os gases de fissão e adota-se um dos modelos mecânicos. A Tabela 3.2 mostra as variáveis de entrada do FRAPCON os dados são de um reator típico PWR-17x17 [30].

TABELA 3.1 – Variáveis de entrada para simulação PWR -17x17

<u>Característica</u>	<u>Valor Padrão</u>
Potência Térmica	3800 MWT
Calor gerado no UO ₂	97,40%
Temperatura de entrada do refrigerante	294 °C
Pressão Nominal	15,5 MPa
Taxa de geração linear de potência máxima	73 kW/m
Geometria do núcleo	17x17
Quantidade de Elementos Combustíveis	193
Distância entre varetas (Pitch)	12,59 mm
Número de varetas UO ₂	264
Peso do UO ₂	118387,6 kg
Peso do revestimento Zr-4	28667,04 kg
Grade espaçadora	12
Número de varetas combustível	50952
Diâmetro externo do revestimento	9,45 mm
Integral Fuel Burnable Absorber (IFBA)	0,0065 mm
Diâmetro da pastilha	8,1915 mm
Espessura do revestimento	0,4699 mm
Comprimento da pastilha	9,8298 mm
Densidade teórica	95%
Material do revestimento	Zr-4 - Zirlo
Número de tubos guias (varetas absorvedoras)	24
Material das varetas absorvedoras	Hf ou Ag-In-Cd
Revestimento da barra de segurança	304-316L-SS

Para sua construção, os arquivos de entrada destinados aos testes podem ser escritos em unidades do sistema internacional ou em unidades inglesas. Portanto, são utilizados parâmetros geométricos determinados pela engenharia do combustível. Esses valores formalizam as variáveis de entrada dos códigos de desempenho. A análise dos parâmetros de entrada é a etapa na qual todos os detalhes nucleares, mecânicos ou particulares do combustível devem ser definidos.

Os códigos de desempenho IPEN-CNEN/SS devem suportar totalmente, todas as características dos reatores térmicos moderados por água leve, definidos por múltiplos desenvolvedores para a geração de energia núcleo-elétrica. Nessa investigação em particular se destaca os reatores de água pressurizada e fervente, alguns detalhes não são definidos, assim como a concentração de boro diluído, ou mesmo, a localização espacial da vareta no núcleo e a configuração dos arranjos dos elementos combustíveis, na forma direta [33-36].

Os códigos de desempenho adequados IPEN-CNEN/SS suportam os modernos PWRs com arranjos atuais como 17x17, ou mesmo os produzidos no passado, sendo também eficientes para os BWRs. Deste modo, as potencialidades apresentadas suportam pastilhas de óxidos mistos (U-Pu)O₂, também à adição de absorvedores de nêutrons, como urânia-gadólínia (UO₂-Gd₂O₃) tecnologia introduzida pela Siemens, da mesma forma a tecnologia desenvolvida na *Westinghouse*, a camada externa à pastilha de ZrB₂ ou *Integral Fuel Burnable Absorber* (IFBA) [38]. A disposição da distribuição de absorvedores neutrônicos pode ser heterogênea, no caso das varetas a absorvedoras ou homogênea quando é disperso no combustível.

As principais características do reator genérico são definidas na forma conceitual. Seguindo esta filosofia de projeto a *Westinghouse* disponibiliza o (PWR-XL/PLANT-17x17), cuja capacidade de potência elétrica produzida é de 1154 MWe [38]. As especificações desse reator indicam, que 94,7% da potência térmica gerada, é em razão da fissão produzida no combustível. Nesse caso o núcleo é organizado por 193 elementos combustíveis com 264 varetas cada, os quais se subdividem em: 65 elementos com baixo enriquecimento 2,10%, 64 elementos com médio enriquecimento 2,60% e 64 elementos com alto enriquecimento 3,10% [30]. O arranjo do combustível é 17x17, com 264 varetas por elemento combustível, as quais têm comprimento ativo de 3,6576 m, no conjunto total, são 50952 varetas [30]. As varetas têm comprimento total de 4,2 m [38].

Os elementos mais enriquecidos encontram-se nas extremidades ou bordas do núcleo [30]. O código de desempenho FRAPCON estabelece limites de irradiação de até 62 GWd/MTU.

Os reatores PWRs de terceira geração conhecidos como *European Pressurized Reactor* (EPR), são desenvolvidos pela tecnologia compartilhada entre as seguintes empresas europeias: *Framatome-Np* (AREVA-Np), *Siemens AG* e *Electricité de France* (EDF). O primeiro reator EPR iniciou o ciclo de operação, em 2009, localizado na Finlândia, a 120 km de Helsinque, o reator *Olkiluoto-3*; na mesma planta já havia 2 BWRs. Nesse caso, o EPR suporta pastilhas de dióxido de urânio enriquecido em até 5%. Nas varetas, encerram-se as pastilhas cerâmicas na forma cilíndrica com 9,8298 mm, de altura, diâmetro de 8,1915 mm e densidade teórica de 95%. O diâmetro externo do revestimento é de 9,4996 mm, e a espessura do revestimento é de 0,5715 mm. As especificações do fabricante apontam para ciclos de até 70 GWd/MTU, a vida útil é de 60 anos com eficiência de 37%. O reator AP1000 especifica-se sua eficiência em torno de 36%. As paradas para recarga devem ser de 15 a 18 meses, com recargas de cerca de 1/3 do combustível do núcleo [38,42].

O mecanismo de acionamento de barras de controle conta com 24 tubos-guia por elemento combustível e um total de 80 varetas de controle, um padrão para reatores 17x17. As varetas absorvedoras são formadas por elementos com alta seção de choque de captura, contendo os elementos prata, índio e cádmio, na proporção de (Ag-80%; I-15%; Cd-5%), ou carbeto de boro B_4C , utilizado em reatores térmicos e rápidos; as varetas de controle são revestidos por aço 316L ou aço 304 não estabilizado, o aço 316 apresenta baixo teor de carbono. A reação de captura $^{10}B(n,\alpha)$ produz hélio; o hélio difunde-se no aço e produz inchamento no volume da barra de controle, produzindo a condição de barra presa. Nesse caso inicia-se um transiente, quando a barra engasta-se no mecanismo de acionamento das varetas de controle *Control Rod Drive Mechanism* (CRDM).

O interior da barra de controle é pressurizado com gás inerte hélio. O fluxo de nêutrons térmicos ($E < 0,25\text{eV}$) gerado no núcleo é da ordem de 10^{18} a 10^{22} $n/(m^2\cdot s^1)$, com cerca de 10^{26} fissões/ m^3 [32]. O revestimento é submetido à fluência de nêutrons rápidos da ordem de 10^{22} $n/(cm^2)$, com energia ($E > 1\text{MeV}$).

Nos reatores modernos, observam-se algumas tendências atuais, as unidades são do tipo PWR e potência mínima é (1 GWe), em crescimento no continente asiático.

As ligas à base de zircônio com 1% de nióbio (Zr-1%Nb) predominam como revestimento. A *Westinghouse* utiliza o *Zirlo* e à *AREVA* a liga M5. No interior do núcleo, relatam-se núcleos com 95 toneladas de dióxido de urânio e 19 toneladas de ligas de zircônio, operando nas temperaturas de 280 °C a 327 °C. A pressão interna do núcleo nominal é de 15,0 MPa [38].

Quanto à modificação acentuada da condutividade térmica do UO₂ em ciclos de queima estendidos, uma nova geração de modelos deve ser proposta, uma vez que, as correlações atuais foram obtidas por aproximação numérica de dados experimentais, visto que os ciclos de irradiação atingiam até 45 GWd/MTU [30,31]. Os reatores modernos tendem a suportar ciclos de irradiação estendidos de até 75 GWd/MTU, com uma média de 55 GWd/MTU. Os reatores descritos na Tabela 3.1 são dados públicos do *Power Reactor Informations System (PRIS)*, AIEA, estes podem ser simulados pelos códigos FRAPCON e FRAPTRAN, assim como, os códigos IPEN-CNEN/SS.

TABELA 3.2 - Reatores em construção e licenciamento

Reator	Desenvolvedor	Potência (GW)	Tipo	Primeira versão
ABWR	General Electric	1,37	BWR	Japão, 1996
AES-92	OKB Hidropress	1,00	PWR	Índia, 2009
EPR	AREVA	1,60	PWR	Finlândia, 2012
AP600/1000	Westinghouse	0,65 - 1,12	PWR	China, 2013
APR-1400	KHPN	1,30	PWR	Coreia, 2013
APWR	Mitsubishi	1,50 - 1,70	PWR	Japão, 2016
ESBWR	General Electric	1,55	BWR	Licenciamento
ACR-1000	AECL	1,20	PHWR	Licenciamento

Analisando-se qualitativamente as tendências e inovações tecnológicas do combustível nuclear, verificam-se novos materiais. Além disso, os combustíveis sofrem alterações dimensionais e estruturais. Os elementos combustíveis suportam cada vez mais varetas, com alterações diametrais; desta forma, as distâncias entre varetas se reduzem. O comprimento ativo das varetas e o enriquecimento isotópico estão aumentando, abaixo do limite de 5%.

A adição de materiais absorvedores de nêutrons, os quais transmutam-se em outros elementos como baixa seção de choque, viabiliza a extensão do ciclo de irradiação, tornando-se um procedimento comum. A utilização de combustível do tipo MOX é uma outra opção atual [39].

Os reatores comerciais por volta de 1980, apresentavam queimas de 40 GWd/MTU. A partir do novo milênio, a extensão dos ciclos se ampliam para ciclos de até 62 GWd/MTU. As atualizações de projetos, em geral, apresentam mais material físsil, ao mesmo tempo as configurações são cada vez mais complexas, com arranjos 14x14, 15x15, 16x16, 17x17 e 18x18. No caso dos reatores BWRs, relatam-se as configurações 8x8, 9x9 e 10x10 e o enriquecimento do combustível é levemente superior para os reatores PWRs.

3.1.2 Arquitetura dos códigos de desempenho do combustível

A arquitetura modular foi adotada na origem dos códigos de desempenho, nesse caso rodavam em máquinas de grande porte produzidas nas décadas de 1960 até 1980. Com o surgimento dos microcomputadores, criam-se novas versões. A migração de plataformas ocorreu no início da década de 1980, quando surgiram os computadores pessoais, e as primeiras versões dos códigos FRAPCON e FRAPTRAN foram lançadas, para essa plataforma. Os programas eram conversões das versões do FRAP-S, destinado ao regime permanente, o código FRAP-T, para os transientes.

As falhas do revestimento são razoavelmente aferidas no estado estacionário. [8,9,10]. O código FRAPCON tem como saída um arquivo de condições iniciais, denominado de RESTART, destinado ao processo de inicialização do FRAPTRAN. O código usa um único canal de resfriamento. Na série *FRAPCON*, o modelo de condução de calor foi substituído por um modelo comum de condução de diferenças finitas de calor, semelhante ao RELAP5, nos quais se utilizam espaçamentos de malha variável para acomodar a potência de pico nas bordas da malha [8-10]. Os módulos de execução do FRAPCON. As sub-rotinas FRAPCON foram agrupadas em pacotes. Observa-se que cada execução requer rotinas específicas definidas nos módulos FRPCON e MATPRO; o primeiro contém a rotina de *driver*, com as rotinas de instalação e os modelos térmicos e mecânicos como FRACAS ou FEA [35,36].

O módulo FRACAS é o módulo mecânico, sendo resultado evolutivo das versões FRACAS-I e FRACAS-II [35-38]. O módulo utiliza o critério de *Von Mises* fundamentado na energia da distorção. O FRAPCON suporta a opção de elementos finitos, *Finite Element Analysis* (FEA). Na opção FEA, a quantidade de nós pode fazer com que a simulação não obtenha a convergência numérica.

A Tabela 3.3 apresenta os pacotes do FRAPCON, destaca-se a biblioteca MATPRO [3].

TABELA 3.3 Estrutura das sub-rotinas do FRAPCON e FRAPTRAN

FRAPCON-3.4		FAPTRAN-1.4	
Módulos	Arquivos	Módulos	Arquivos
FRAP	91	FRAP	187
MATPRO-11	62	MATPRO-11	23
MECH	55	MECH	55
Planilhas Excel	2	Planilha	2

Tradicionalmente, os códigos de desempenho são subdivididos em dois estados: o estado permanente e o transiente.

Durante o primeiro estado, ocorre a irradiação do combustível em um reator comercial. No final do ciclo de queima, retira-se a vareta do núcleo. Após análise de irradiação, ocorre uma segunda montagem, com parte dessa mesma vareta, em um reator de teste. Portanto, tem-se uma descontinuidade da fissão, fato motivador de críticas. Em geral, o estado estacionário utiliza-se o cálculo fundamentado na metodologia das diferenças finitas, já o cálculo do estado transiente é efetuado pelo método dos elementos finitos.

No conjunto dos objetivos dos códigos de desempenho, verifica-se a incorporação e homologação de novos modelos de queima estendida, no projeto investigativo para a região de alta queima *High Burnup Rim Project* (HBRP), verificou-se as seguintes características como: aumento da porosidade; formação e deposição de hidretos; a geração de gases por fissão; evolução da região de borda para alta queima *High Burnup Structure* (HBS).

O revestimento do combustível com a liga M5, está sendo irradiado em 80 reatores, distribuídos em 13 países.

A segunda versão, FRAPCON-2, envolvia três opções para modelagens mecânicas, quatro opções relativas à liberação de gases de fissão e uma opção destinada à análise de incertezas [15]. As versões atuais foram resultados de atualizações consecutivas, em que duas necessidades são atendidas à extensão da queima e o suporte para ligas (Zr;1%Nb). A biblioteca MATPRO é comum em muitos códigos desenvolvidos para desempenho de combustível e cálculo termo-hidráulico [3].

O código FRAPCON é semelhante aos códigos FALCON (EPRI, EUA) [40], e ao código TRANSURANUS (ITU, Alemanha) [41], em ambos, fazendo uso de modelos propostos na biblioteca, simulam os estados estacionários e transientes em apenas um código. Os códigos são considerados conservadores, com aspectos generalistas. Apresentam modelos independentes das configurações específicas dos reatores. Novas correlações empíricas são adicionadas nas versões atualizadas [20,21,22].

Uma crítica é a carência de modelos exclusivos destinados ao estado transiente. Na biblioteca não existem correções acuradas para a transição entre o regime estacionário e transiente. Por outro lado, nota-se o aspecto prático, uma vez que as modelagens foram desenvolvidas com dados experimentais, em que alguns fenômenos não são equacionáveis em espaços de tempo reduzidos.

A Tabela 3.4 apresenta as modelagens do revestimento, divididas por fenômenos e propriedades.

TABELA 3.4 - Modelagens para o combustível e revestimento
para os estados estacionário e transiente

Crescimento do grão, porosidade
Aumento da densidade, ou densificação do UO ₂
Inchamento por produtos gasosos e sólidos
Fluência do combustível e revestimento
Elasticidade e plasticidade
Relocação do combustível
Fratura do combustível e revestimento
Relação Xe/Kr, no estado estacionário
Relação Xe/Kr, no estado transiente)
Formação de ¹³¹ I
Deformação em formato de balão do UO ₂ .

No arquivo de entrada não se leva em conta o arranjo dos elementos combustíveis. Negligencia-se a quantidade de boro dissolvida. Os cálculos neutrônicos sofrem limitações dimensionais. Ambos os códigos não são tridimensionais [29,30]. Os códigos referem-se a uma vareta única no interior do núcleo. A localização geométrica não leva em conta o arranjo do combustível ou as camadas de enriquecimento [42]. Na realidade, podemos utilizar três tipos de reatores com, pelo menos, três tipos de revestimentos, o que acarreta dificuldade em se obter resultados extremamente precisos [30]. Verificam-se as principais correlações desenvolvidas e disponíveis para o combustível. Os códigos de desempenho seguem uma sequência de interações numéricas a cada incremento de tempo, que, espera-se que sejam convergentes [33-36]. Caso estas não ocorram, limitam-se as condições de entrada.

A Tabela 3.5 apresenta a estrutura interna das modelagens dos códigos de desempenho. Os modelos propostos são codificados tanto para o estado permanente como para o estado transiente.

TABELA 3.5 - Modelagem para o revestimento

Estacionário e Transiente

Crescimento por Irradiação

Endurecimento por Irradiação

Deformação Plástica

Baloneamento e Ruptura

Interação mecânica entre pastilha e revestimento

Oxidação à baixa temperatura

Oxidação à alta temperatura

Condutância gás/sólido - PCMI

Escoamento estacionário

Escoamento Transiente

Pós CHF

Entre as finalidades dos códigos computacionais, uma dessas é ajustar a capacidade de simulação, supondo as condições de contorno necessárias para convergência, a cada passo de tempo. O conjunto de rotinas interdependentes incrementa a complexidade do código. As propriedades do revestimento são restritas às ligas de zircônio (Zr-2, Zr-4, Zirlo e M5), [34-36].

A Tabela 3.6 apresenta as rotinas codificadas em FORTRAN específicas para o combustível, definida na biblioteca MATPRO e documentada na NUREG-6150 [3].

TABELA 3.6 – Rotinas destinadas ao combustível - MATPRO

Nome	Descrição da finalidade	Regime
1 FCP	Calor específico	Permanente/Transiente
2 FCREEP	Deformação, fluência do combustível	Permanente
3 FEMISS	Emissividade do combustível	Transiente
4 FENTHL	Entalpia do combustível	Permanente/Transiente
5 FGASRL	Geração de gases de fissão	Permanente
6 FHOTPS	Pressão do combustível aquecido	Permanente
7 FPOIR	Razão de Poisson	Permanente
8 FRESTR	Reestruturação do combustível	Permanente
9 FSWELL	Inchamento do combustível	Permanente
10 FTHCON	Condutividade térmica do combustível	Permanente/Transiente
11 FTHEXP	Expansão térmica do combustível	Permanente/Transiente
12 FUDENS	Densificação do combustível	Permanente
13 FVAPRS	Vapor de pressão do combustível	Permanente

As correlações propostas para as pastilhas e os revestimentos, são correlações que dependem da fluência de nêutrons rápidos e do gradiente térmico. Os fenômenos de densificação, geração de gases por fissão e inchamento são inerentes ao combustível. As correlações consideradas térmicas, apresentam uma reduzida dependência com a fluência de nêutrons, sendo fortemente alteradas pela temperatura. As variações da condutividade térmica e o coeficiente de dilatação do dióxido de urânio são obtidas por correlações calculadas em função da irradiação ou queima.

A estrutura dos códigos e seus mecanismos de acoplamento alusivos às propriedades correlacionadas devem ser revistos. O cálculo da remoção efetiva do calor gerado nas varetas combustíveis requisita da biblioteca MATPRO as 13 rotinas definidas para o combustível e as 26 definidas para o revestimento. O código suporta o cálculo para apenas uma vareta de combustível no caso particular de um transiente operacional, em acidentes hipotéticos até 65 GWd/MTU.

Uma das características é a diferença nas condições de contorno do estado estacionário fundamentado em um sistema dinâmico e o comportamento não linear sob condições de transientes. Particularmente, em um transiente têm-se as equações diferenciais parabólicas relativas ao transporte de massa e energia [8,9]

3.1.3 Módulos do FRAPCON

O FRAPCON calcula os principais parâmetros térmicos e mecânicos com as malhas, levando em conta os nós radiais relativo à pastilha de combustível e nós axiais em relação à vareta combustível, sendo condicionados a intervalos de tempo. A condutividade térmica entre a pastilha e o revestimento e a folga é calculada a cada incremento de tempo. A transferência de calor no combustível é calculada em cada nó. Na Tabela 3.7, apresentam-se os módulos do FRAPCON descritos na NUREG-7022.

TABELA 3.7 – Estrutura do código FRAPCON, pacotes de rotinas

Pacotes	Funcionalidades
FRPCON	A principal seção do código, incluindo todos os modelos térmicos; também inclui modelo mecânico e de materiais
FRACAS	Contém sub-rotinas que compreendem o modelo mecânico.
MATPRO	Propriedades dos materiais nucleares, biblioteca MATPRO combustíveis, revestimento ligas de zircônio.

Os fenômenos da cinética química, a oxidação e a deposição de hidretos precipitados são discretos, ou seja, não são calculados na forma de malhas nodais. O FRACAS é um modelo mecânico que inclui os efeitos da expansão térmica e da pressão interna do gás. Um modelo considerado generalista simplifica e negligencia a deformação induzida, por tensões no combustível; portanto, representa o modelo rígido de contato [9,10]. A Figura 3.1 apresenta os módulos de execução do FRAPCON

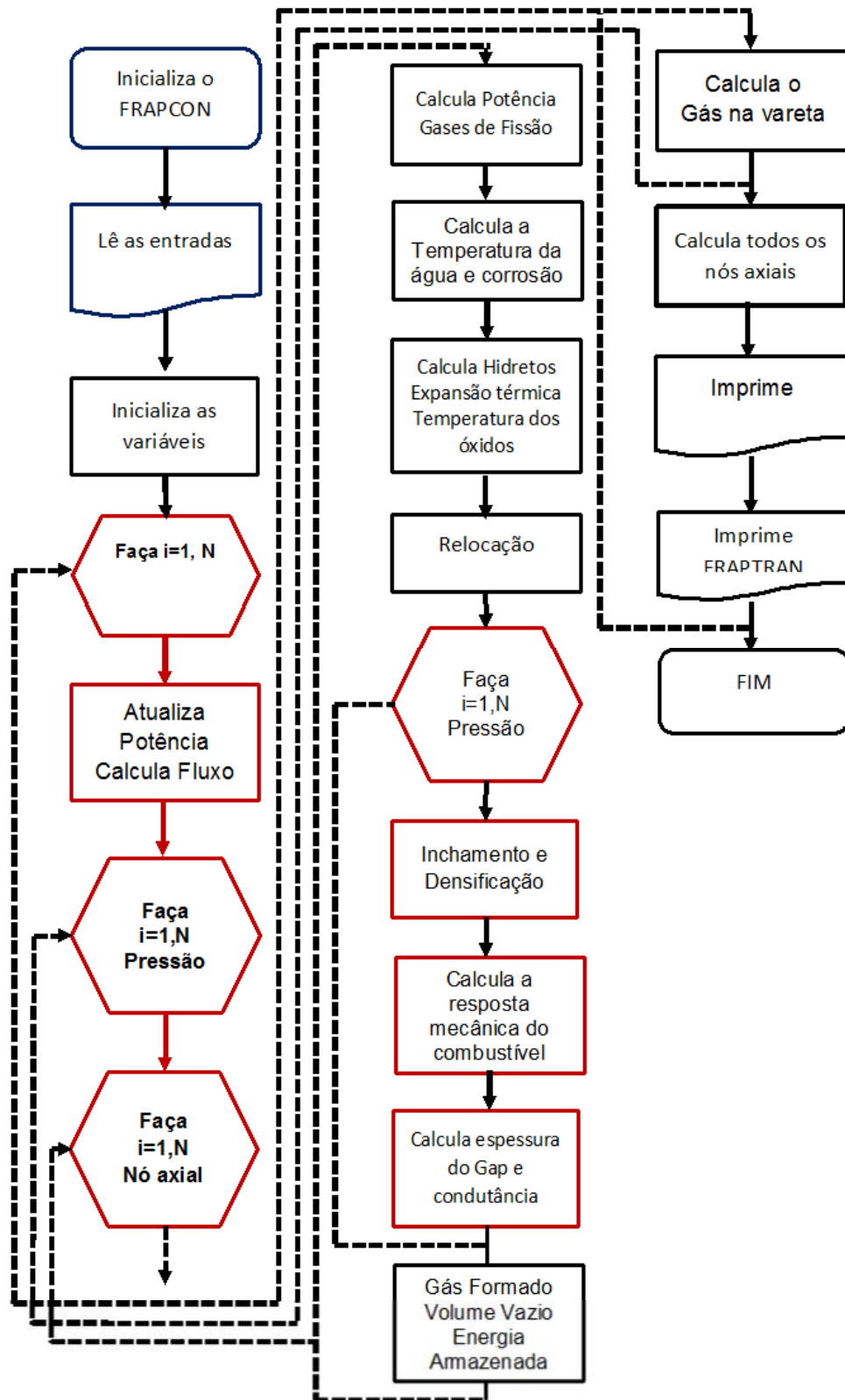


FIGURA 3.1 - Sequência de execução do código de desempenho

Fonte – *FRAPCON Modifications to Fuel Rod Material Properties and Performance Models for High-Burnup Application-NUREG/CR-6534-1997*.

O FRACAS separa duas situações: tanto quando a folga (*gap*) está aberta, como quando está fechada [35-38].

Nesse caso, os laços de execução (*loops*) chamam as rotinas várias vezes na execução; portanto, quando o efeito não é conhecido, deve-se fazer um julgamento das implicações do retorno dessas rotinas. Na modelagem do *Zircaloy* tem-se particularidades que não são adaptáveis ao aço. Em contrapartida o aço apresenta formação de hélio que não é significativa no caso do *Zircaloy*. A rotina CHUPTK calcula a média da concentração de hidrogênio no revestimento. O fenômeno ocorre nas faces interna e na externa em contato com a água, o cálculo é executado para cada incremento de tempo. No caso do *Zircaloy*, recomenda-se que a quantidade máxima de hidretos depositados não ultrapasse, o limite de 400 ppm. No aço, não se disponibilizam dados relativos à hidretação com precisão.

Na literatura existem registros de que as barras de controle ou varetas absorvedoras sofrem deformações e engastam no dispositivo de acionamento. As varetas absorvedoras são revestidas de aço 304, no AP1000 da *Westinghouse* ou 316L, no EPR da AREVA, os quais incham com a alta fluência [38,42]. A rotina CBRTTL descreve o fenômeno de fragilização do *Zircaloy* por causa da absorção de oxigênio. Para o aço 304, considerou-se que o aço não tem afinidade com oxigênio e portanto, as quantidades de oxigênio na água são insuficientes para fragilizá-lo.

A rotina COBILD calcula a espessura de ZrO_2 na parede externa do revestimento. Os mecanismos de oxidação do aço, formam óxidos de ferro e cromo, portanto, divergem daqueles do *Zircaloy* [3,10]. A US-NRC define os limites de segurança destinados ao revestimento. Esses são especificamente definidos para ligas à base de zircônio, não existem menções ao revestimento de aço ou de outras ligas [3,15]. A temperatura central da máxima da pastilha é limitada em função da queima. A temperatura máxima do *Zircaloy* é limitada a 1204 °C. As espessuras das camadas de óxidos na face externa e interna não devem ultrapassar os 17%, segundo a relação *Equivalent Cladding Reacted* (ECR).

A temperatura de 1204 °C é chamada de *Peak Cladding Temperature* (PCT), para o aço deve ser inferior, ao ponto de fusão do aço de 1425 °C a 1450 °C, no caso do *Zircaloy* é 1850 °C.

A Figura 3.2 apresenta o ciclo de execução do código de desempenho FRAPCON.

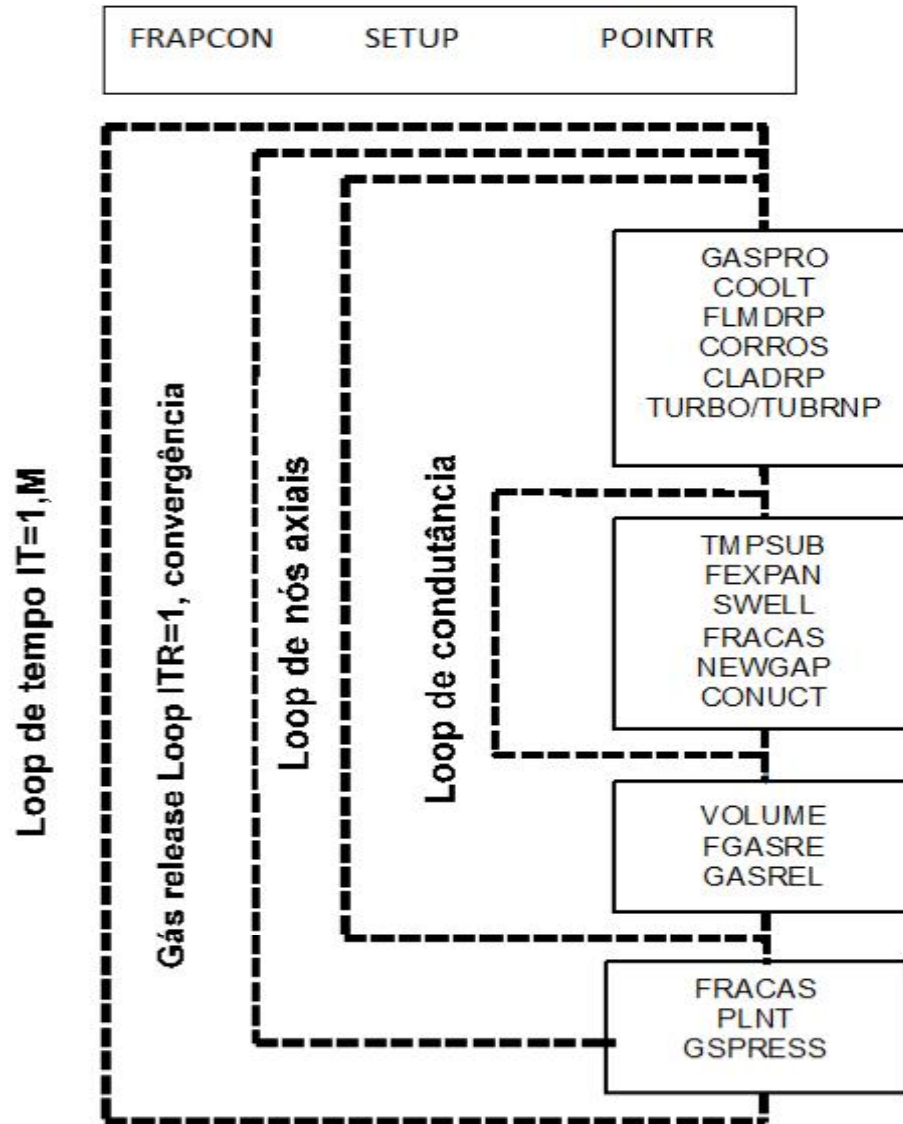


FIGURA 3.2 - Ciclos de execução do código de desempenho *FRAPCON*, ciclo de tempo, ciclo de geração de gases, ciclo de nós axiais, ciclo de condutância da folga.

Na situação de contato da pastilha-combustível com o revestimento, chamado de contato rígido, tem-se a interação térmica e mecânica entre o combustível e o revestimento [3,15]. A estratégia da avaliação do código IPEN-CNEN/SSP, já adequado para revestimento de aço consiste em avaliar um conjunto limitado de dados bem qualificados. Há casos que abrangem toda a gama de condições limitantes e operacionais para reatores comerciais de água leve, para verificar se o código prevê adequadamente os dados integrais.

Os dados integrais de interesse são as temperaturas de combustível, os gases produzidos por fissão, a corrosão, os volumes vazios e a deformação do revestimento.

Os casos nesse grupo relativamente limitado foram selecionados de acordo com critérios a respeito da integridade e da qualidade dos dados de desempenho das varetas selecionadas. Para a escolha do modelo de liberação de gases de fissão, o usuário pode selecionar o modelo *Massih*, ou o modelo ANS-5.4, proposto pela *American Nuclear Society (ANS)*, em 1982. O modelo de *Massih* é recomendado pelo PNNL sendo o modelo padrão útil para calcular a liberação de núclídeos de gás radioativo de curta duração. O modelo FRAPFGR é útil para inicializar o modelo de liberação de gás no caso de transientes. O código FRAPCON trabalha em execução cíclica para produzir a saída. Cada passo incremental de tempo tem a mesma função e pode ser chamada mais de uma vez, mas uma única vez dentro de cada ciclo. A execução cíclica tende à convergência de valores de saída [8].

O sistema trabalha com quatro ciclos principais cada um atuando, em um nível. O ciclo mais externo é o ciclo do passo incremental de tempo. O ciclo abaixo do principal é o ciclo que calcula os gases produzidos por fissão [8]. O ciclo dos nós axiais calcula o estado de cada nó axial definido nas variáveis e entrada. O ciclo mais interno é o ciclo de condutância da folga, sendo o ciclo mais atualizado. O ciclo de condutância da folga é calculado um grupo de rotinas, as mais executadas. O ciclo de rotinas dos nós axiais contemporiza três grandes grupos de execução. O ciclo de intervalo e tempo faz com que todas as rotinas sejam executadas [8].

A arquitetura do sistema conta com três laços de execução encaixados, (*loops*). O primeiro ciclo encontrado é chamado de laço do intervalo de tempo. No segundo nível, executa-se o ciclo da liberação de gases de fissão. Esse ciclo é executado até que o valor calculado para a pressão interna do gás na vareta (dependendo da temperatura, do volume e da liberação dos gases de fissão) seja convergente. O módulo FRACAS calcula a resposta mecânica para deformação permanente. A rotina PLNT calcula a pressão e a temperatura na folga (*gap*) e na câmara de contenção (*plenum*). A rotina GASPRESS calcula a pressão interna na vareta

O próximo ciclo interno na codificação é o ciclo dos nós axiais. Para cada execução desse ciclo executa-se o ciclo da liberação de gás. A rotina BURNUP calcula a queima local do combustível. A rotina GASPRO calcula os produtos gasosos de fissão. A rotina COOLT calcula a temperatura do refrigerante. A rotina FLMDRP calcula a queda de temperatura no contato com a água. A rotina CORROS calcula a corrosão no revestimento. A rotina CLADRP calcula a queda de temperatura entre as interfaces do revestimento. A rotina TUBRNP calcula a potência radial gerada.

O laço mais interno calcula a condutância térmica na folga. Esse laço interage com todos os outros, primeiro com cada nó axial, até o equilíbrio térmico na direção radial. O coeficiente de transferência de calor entre a pastilha combustível e o revestimento, a condutância da folga, é um dos parâmetros mais importantes na definição da temperatura do combustível, reduz-se com a queima.

A influência não é tão pronunciada como no início do ciclo de irradiação. Mesmo assim, a folga ainda conservar-se como uma barreira térmica. Os modelos de transferência calórica da folga dependem da temperatura, da emissividade, da composição da mistura gasosa, da pressão de contato do gás e da morfologia da superfície, ou seja, das rugosidades externas do combustível e do revestimento. A condutância da folga se reduz em função da composição da mistura gasosa composta por He, Xe, Kr e o iodo, um produto corrosivo. No caso de ciclos com irradiação com potência moderada, mas superior a 20 GWd/MTU, propicia-se o fechamento da folga, quando a condutância da folga se reduz.

As atualizações promovidas nos códigos de desempenho, são relativas:

- i. A condutividade térmica do dióxido de urânio em alta temperatura.
- ii. Novos equacionamentos para geração de gases de fissão para ciclos de irradiação estendidos acima de 50 GWd/MTU.
- iii. Novos modelos de falhas aceitos pelo PNNL, o método da densidade de energia crítica por unidade de volume, *Critical Strain Energy Density* (CSED), adotado pelo PNNL e no FALCON [39,41].
- iv. Na versão de 2011, foram adicionados os revestimentos de Zirlo e M5.
- v. Os modelos de gases utilizados são: ANS-5.4, fundamentado na equação de difusão de *Booth*, com o modelo de gases de fissão proposto por *Forsberg e Massih* [45].

A solução é fundamentada na execução de ciclos segundo um processo de interações convergentes. A solução para cada intervalo de tempo é constituída por uma sequência de execuções as quais devem: (i) calcular a temperatura do combustível e do revestimento; (ii) calcular a deformação do combustível e do revestimento; (iii) calcular o inventário dos produtos fissão gasosos; (iv) calcular o volume de vazio; (vi) calcular a pressão interna do gás na vareta de combustível. Cada cálculo é feito por uma rotina específica, mas de forma interdependente.

3.1.4 Módulos do FRAPTRAN

A hierarquia das rotinas contidas no código FRAPTRAN é apresentada na Tabela 3.8, juntamente com a função de cada rotina. No topo da hierarquia tem-se o FRAPTRAN. O nome do programa chama a rotina FRAP, sendo a sub-rotina principal do código FRAPTRAN [9,10]. Portanto, o FRAPTRAN apresenta três rotinas que gerenciam a execução do programa [8,9]. Na Tabela 3.8 apresenta-se os módulos do FRAPTRAN.

TABELA 3.8 - Rotinas principais do código FRAPTRAN

IOFILES	Lê os dados do arquivo de entrada e reescreve no arquivo de saída chamadas pela rotina CARDIN
ECHO1	Ecoa as entradas no arquivo e saída
FRAP	Rotina principal que faz a análise do transiente

A US-NRC define os limites de segurança para simulação do combustível com os códigos de desempenho. Nessa situação, os limites de segurança são os normatizados pela US-NRC, tais como: (i) limite de temperatura do revestimento, PCT de 1204 °C; (ii) camada de óxido limitada a 17% da espessura, descrita na relação de *Baker-Just*, (iii) máxima deformação plástica de 1% axial, e circunferencial de até 2,5% [46]. O código FRAPTRAN disponibiliza dois modelos de corrosão para altas temperaturas, que são selecionados ou ativados por meio de variáveis de entrada. Além disso, existe a possibilidade da troca dinâmica do modelo de corrosão. As duas modelagens são *Cathcart-Pawel*, proposta, em 1977, e o modelo *Baker-Just*, de 1962. O modelo *Cathcart-Pawel* é ativado quando a temperatura do revestimento ultrapassa 800 °C.

O modelo de *Baker-Just* é ativado quando a temperatura do revestimento ultrapassa, 727 °C. Na Tabela 3.9, apresentam-se os módulos do FRAPTRAN.

TABELA 3.9 - Módulos do FRAPTRAN - NUREG/CR-7023

STHSXI	Apresenta as propriedades da água
STARTT0	Na inicialização é a frio, inicializa as variáveis
CARDIN	Faz a leitura e o processamento das entradas
INITIA	Faz a inicialização das variáveis
CRANK6	Coordena a solução dentro de um passo de tempo
SETUP	Inicializa as variáveis
COMPUT	Calcula o valor das variáveis
STORE6	Armazena o estado atual das variáveis

O processo é semelhante ao utilizado nos demais códigos de desempenho, como o código FALCON, nesse caso adota-se o modelo de elementos finitos. O código FALCON é o resultado da união dos códigos *Steady-State Core Reload Evaluation* (ESCORE), com o código de transientes FREY. O método dos elementos finitos abrange quase a totalidade dos códigos, desde do final da década de 1980. A técnica de Monte Carlo foi utilizada no CARO (1991) desenvolvido na *Kraftwerk Union AG* (KWU), para cálculo de incertezas usado também no RODEX, sendo continuado pela AREVA.

Uma breve visão das funcionalidades desses códigos é dada na Tabela 3.10, apresentam-se os códigos internacionais mais referenciados e seus modelos para a investigação do estado transiente.

TABELA 3.10 - Códigos utilizados para cálculo de transientes

Código	FRAPTRAN	SCANAIR	TRANURANUS	RANNS
País	EUA	França	Alemanha	Japão
Mantenedor	PNNL	IRSN	ITU	IAEA
Modelo FGR	Transiente	Transiente	Permanente Transiente	Transiente Permanente
Modelo PCI	Axial	Axial	Fricional	Fricional
Dimensões	1D	1 ½D	1 ½D	1 ½D

As agências regulatórias, também impõem limites regulatórios nacionais possibilitando pequenas variações. Na Rússia, os limites para ligas de zircônio com (1-2,5%) de nióbio, estipulam o limite da máxima oxidação, ECR de 6% [9,10]. Já no Japão, adota-se o valor de 15%, esses limites se refletem nos códigos [44,45]. O código RANNS é destinado ao estado transiente, em que o estado estacionário é simulado como código FEMAX, ambos suportados e desenvolvidos no Japão, *Japan Atomic Energy Agency* (JAEA). O estado estacionário pode ser simulado com o FRAPCON ou com o ENIGMA. O código SCANAIR é destinado aos transientes, é um código mantido pelo *Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire* (IRSN), sendo bem aceito no continente europeu.

Os códigos TRANSURANUS e FALCON rodam em um único código, tanto para o estado estacionário como o transiente [47-49]. O código TRANSURANUS desenvolvido na Alemanha, portanto, um código europeu e o FALCON norte-americano; essa metodologia que difere dos códigos FRAPCON e FRAPTRAN. Dessa maneira, disponibilizam-se uma vasta gama de códigos, tais como: RAPTA, TRESPAROD e FUROM. Esses são destinados a reatores *Voda Voda Energo Reactor* (VVER) [80]. O código RAPTA é um código russo, desenvolvido no Instituto BOCHVAR que suporta acidentes [80].

3.1.5 Limitações dos códigos de desempenho

Uma análise global da situação relativa aos códigos de desempenho é a customização generalista para cada caso específico. As generalizações necessárias decorrem da conexão da modelagem com o problema reflete-se na abrangência dos modelos. Códigos com uma particularização elevada seriam os propostos pelos grandes desenvolvedores de reatores e combustíveis. Em 2012, a Westinghouse apresentou o código proprietário *FULL SPECTRUM LOCA* (FSLOCA), destinado à modelagem de transientes por perda do refrigerante; designa-se para os 35 reatores PWRs em operação produzidos pela *Westinghouse* [42,73,80]. As características referem-se a rupturas, desde as pequenas até as grandes, cobrindo falhas intermediárias com modelagem proprietária. Iniciado em 1988, esse código foi desenvolvido de 2005 a 2010 [33]. Em 2004, a *Framatone* lança o código RODEX4, destinado a reatores BWRs com revestimento de *Zircaloy* RXA.

No código RODEX4, utiliza-se o modelo de condutividade térmica do ($\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$) do FRAPCON. A AREVA visando avaliar PCI, em tempo real, utiliza o código o XEDOR, com versão proposta em 2010 [43]. Esses códigos são idealizados para os reatores comercializados pelas mesmas empresas que também fornecem o combustível, portanto são bem específicos.

As soluções das equações de transmissão de calor são resolvidas na direção circunferencial e radial; longitudinalmente, a transferência de energia térmica não é calculada tanto regime permanente como no transiente. Em relação ao fluxo crítico de calor no estado permanente é utilizado a mesma correlação para validar os limites do estado transiente. O mesmo ocorre com a transferência de calor na superfície do revestimento. O FRAPTRAN pode ser utilizado para modelar rampas com duração de minutos, ou menores. A temperatura do revestimento, no caso das ligas de zircônio, não deve ser superior a 973,15 °C. Nessa faixa de temperatura, verifica-se a formação de bolhas de oxigênio, aplicando-se a lei cúbica da oxidação.

Os modelos adotados suportam pequenas deformações, inferiores a 5%. Outras limitações referem-se a dispersão de gadolínio (Gd_2O_3) é, no máximo de 8% em peso [33-36]. Uma série de eventos presumíveis são analisados indiretamente, como o sistema de refrigeração de emergência do núcleo o *Emergency Core Cooling System* (ECCS). Esse sistema é formado por bombas, válvulas, trocadores de calor, não são analisados diretamente como transiente e, também as falhas nas bombas ou falha na turbina, não são suportados nos códigos de desempenho.

3.2 Propriedades materiais do aço 348

No código IPEN-CNEN-SS, adequa-se as correlações das propriedades materiais para o combustível nuclear revestido por aço austenítico AISI-348, estas foram remodeladas e adaptadas. O código IPEN-CNEN-SS, desse modo é capaz de realizar a simulação de desempenho do combustível, ou seja, das varetas irradiadas nos estados permanente e transiente. O revestimento escolhido é aço 348 austenítico, estabilizado por nióbio e tântalo contra corrosão intergranular, já utilizado em reatores térmicos no passado [91,92].

Na Tabela 3.11, apresentam-se as rotinas definidas na biblioteca de propriedades para ambos os estados, tanto permanente como transiente, descrita no guia regulatório NUREG/CR-6150, (1976/93) [3,10].

TABELA 3.11 - Rotinas da biblioteca de propriedades materiais destinadas ao revestimento

Propriedades	(FRAPCON-3.4) (FRAPTRAN-1.4)
Condutividade térmica do revestimento	CTHCON
Expansão térmica do revestimento	CTHEXP
Módulo de elasticidade	CELMOD
Módulo de cisalhamento	CSHEAR
Calor específico do revestimento	CCP
Emissividade do revestimento	ZOEMISS
Crescimento axial	CAGROW
Dureza de Meyer	CMHARD
Condutividade térmica do óxido	ZOTCON

A versão IPEN-CNEN-SS, visa prover as alterações das funções pertinentes à biblioteca de propriedades MATPRO. O processo de compilação dos códigos envolve a observação das diferentes origens das rotinas. No código FRAPCON, observa-se que a codificação das rotinas desenvolve-se ao longo dos anos com múltiplas atualizações.

A biblioteca MATPRO foi patrocinada pela US-NRC e DOE, com investigações experimentais ao longo de cinco décadas, produzidas no PNNL e ANL, mas nota-se uma desatualização em relação aos ciclos estendidos. O código-fonte utilizado como base da nova versão apresenta rotinas em versões diferentes da linguagem, versões 77 e 90, codificadas entre 1977 a 1990. Na versão IPEN-CNEN-SS utilizou-se o compilador (INTEL/XE-2011/12). As fontes com alterações, ou seja novas correlações para o aço, foram recompiladas rodando na plataforma de desenvolvimento *Microsoft Visual Studio* (MVS), nas versões 2008/2010. O compilador denomina-se INTEL FORTRAN STUDIO, sendo que, teoricamente, compatibiliza-se com processadores de 32 e 64 bits e qualquer versão da linguagem FORTRAN.

O aspecto genérico do compilador INTEL obriga uma escolha relativamente complexa nas opções de compilação. O sistema operacional foi *Microsoft Windows* versões 7 e 8.

3.2.1 Calor específico do aço (ccp)

O calor específico é a quantidade de energia fornecida para alterar a temperatura em um grau *Celsius*. A unidade do calor específico é (J/g-K). A rotina CCP da biblioteca de propriedades dos materiais calcula o calor específico à pressão constante para o revestimento. A rotina CCP é chamada no FRAPCON-3.4 e no FRAPTRAN-1.4 [8,9,37].

As propriedades térmicas das ligas metálicas são coerentemente relacionadas com a composição dos seus elementos metálicos de liga. A relação proposta por *Dulong-Petit*, afirma que o calor específico é inversamente proporcional ao mol do composto. O mol do ferro equivale a 55,845 gramas, do zircônio, 91,22 gramas; portanto o calor específico do *Zircaloy* deve ser inferior ao do aço. O calor específico é dado pela equação proposta por *Dulong-Petit*, como: $C_p = 3R/Mol$; nessas condições, são obtidos valores ligeiramente abaixo dos 0,500 J/(g-K). Um mol de aço 316 equivale a 55,9354 gramas, portanto ($C_p = 25,9/55,9354$) [29].

Na temperatura de 27 °C, à pressão constante, o calor específico do *Zircaloy-4* é de 280 J/(kg-K); o aço AISI-348 apresenta um valor de calor específico igual a 500 J/(kg-K). Portanto, obtém-se na temperatura de 27 °C a relação comparativa de 1,78 vezes o calor específico do aço em relação ao *Zircaloy*.

Segundo a regra de *Kopp*, conhecida como regra de *Koop-Newman*, proposta no final do século XIX, o calor específico de um composto sólido é o somatório do produto dos calores específicos parciais dos diferentes átomos que compõem a molécula multiplicado pela frequência do átomo na molécula. Utilizando-se do conceito de *Koop*, para o *Zircaloy* com 98% de Zr, verifica-se que o zircônio apresenta um valor de 285 J/(kg-K).

Para os aços da série 300, com cerca de 66% de ferro, o ferro apresenta um calor específico de 440 J/(kg-K) [1,27,28]. As equações (3.1), (3.2), (3.3), (3.4) e (3.5) apresentam as correlações numéricas convergentes quadráticas e/ou lineares, em relação a esta propriedade para os aços da série 300 [1,3,27,28].

A equação (3.1) apresenta o calor específico do aço 316 utilizado em reatores rápidos e varetas de absorvedoras do EPR. O aço 348 é apresentado pela equação (3.4), utilizado no reator Yankee Rowe. O aço 304, utilizado em varetas absorvedoras do AP1000, também foi empregado como revestimento nos reatores Indiam Point-1, Trino e Sena [1,3].

$$(26,85^{\circ}\text{C} \leq T < 1284,85^{\circ}\text{C})$$

$$\text{Cps}_{304} = 400,2689 + 0,245773 * T - 9,55 \times 10^{-5} * T^2 \quad (3.1)$$

$$\text{AISI} - 316 \quad (26,85^{\circ}\text{C} \leq T < 1284,85^{\circ}\text{C})$$

$$\text{Cps}_{316} = 498,6021 + 0,134 * T \quad (3.2)$$

$$\text{ITER} - 316 \quad (26,85^{\circ}\text{C} \leq T < 1284,85^{\circ}\text{C})$$

$$\text{Cps}_{316} = 365,43 + 0,40649 * T - 1,732 * 10^{-4} * T^2 \quad (3.3)$$

$$\text{AISI} - 348 \quad (26,85^{\circ}\text{C} \leq T < 1284,85^{\circ}\text{C})$$

$$\text{Cps}_{348} = +421,4 + 0,2621 * T - 8,958 * 10^{-5} * T^2 \quad (3.4)$$

$$(T \geq 1284,85^{\circ}\text{C})$$

$$\text{Cps}_{348} = 558,228 \quad (3.5)$$

O calor específico calculado por ajuste numérico do aço 348 é uma função tipicamente quadrática, na fase sólida. Na temperatura de 20 °C, o valor apresentado, é de 500 J/(g-K), na temperatura de fusão atinge o valor de 775 J/(g-K); já a incerteza é de ±5%. O calor latente de fusão na troca de fase sólida para a líquida do aço é 270 kJ/g. Analisando-se a composição química desses aços, constata-se que eles se diferenciam nos teores de estabilização da liga ou contra os ataques da IGC, ou seja, nas concentrações de nióbio, tântalo, titânio ou cobalto, tais teores representam frações mínimas, não produzindo alterações significativas nas propriedades térmicas. O calor específico do aço 348 se altera de 400 J/(kg-K), para um valor igual a 600 J/(kg-K), no ponto de fusão; sendo uma curva crescente no intervalo.

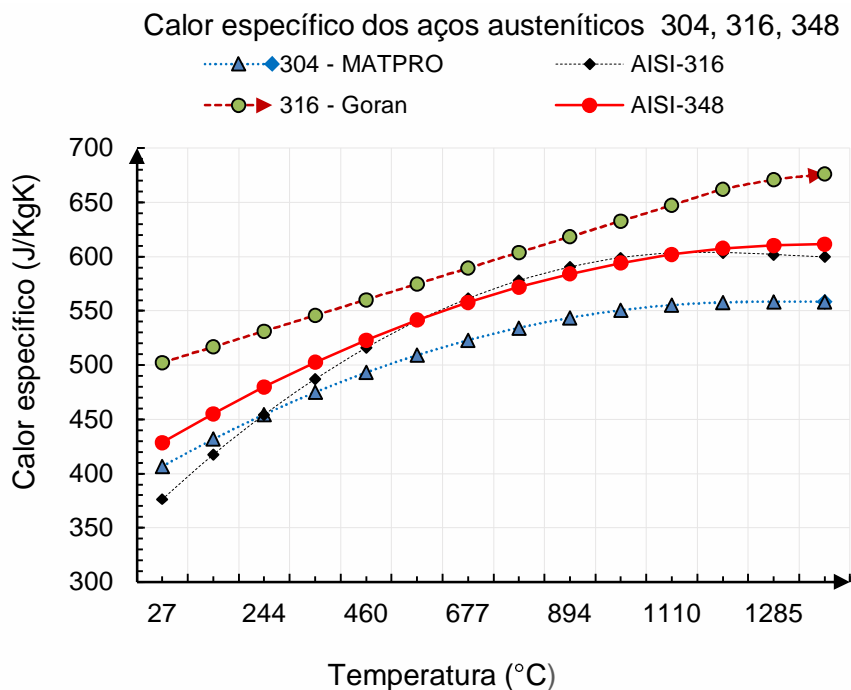


FIGURA 3.3 – Evolução dos valores de calor específico para os aços 304, 316 e 348 no intervalo de 27 °C a 1285 °C [3]

A Figura 3.3 apresenta o calor específico dos aços 304, 316 e 348. O Zircaloy, durante a transformação de fase, apresenta um calor específico superior. As Figuras 3.4 e 3.5 apresentam as curvas numericamente ajustadas para o Zircaloy e para o aço 348.

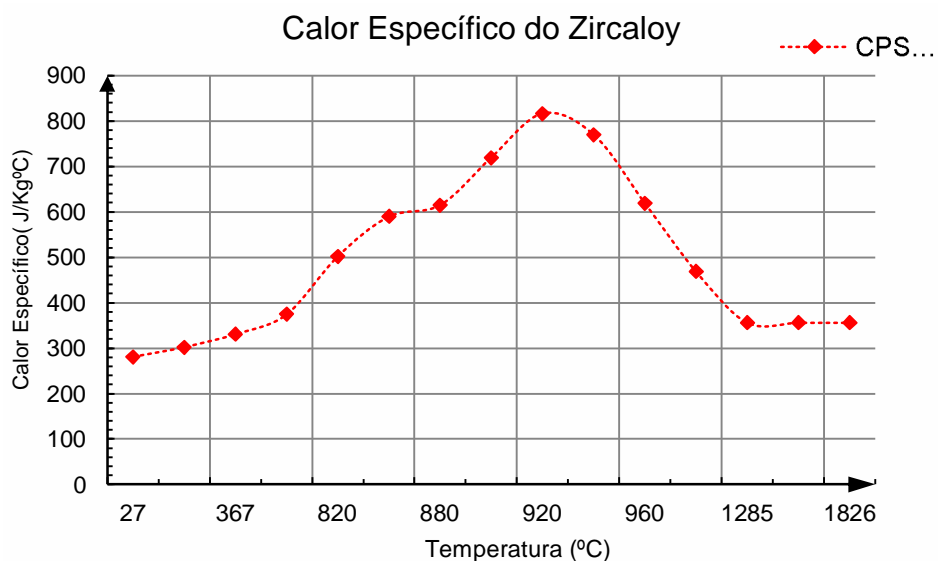


FIGURA 3.4 - Calor específico do Zircaloy de 27 °C a 1285 °C [3]

O aço 348, na temperatura de troca de fase, apresenta calor específico de 545 J/(kg·K). Nesse caso, ocorre uma alteração no calor específico devido à deposição de hidretos. O acréscimo do valor é gerado pela à deposição de hidretos.

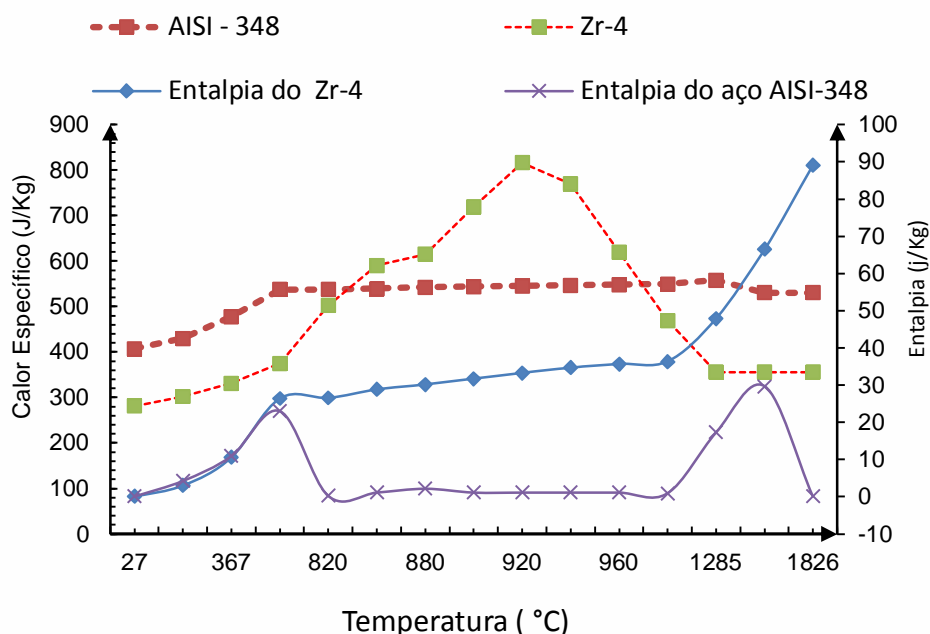


FIGURA 3.5 - Entalpia do Zircaloy e do aço 348 no intervalo de 27 °C a 1285 °C [3]

Na adaptação das correlações verifica-se que alguns fenômenos não se desenvolvem no aço austenítico como no Zircaloy. O calor específico do *Zircaloy* apresenta uma correlação linear de 0 °C a 827 °C. Na faixa térmica de 1047 °C a 1727 °C, verifica-se nessa correlação uma função quadrática. Já na mudança do arranjo cristalino de hexagonal compacto para cúbico de corpo centrado de 827 °C a 941 °C, o calor específico é dado por uma curva exponencial [3,10].

Caso a concentração de hidretos depositados seja de 400 ppm, verifica-se um calor específico superior à concentração de 20 ppm. O fenômeno é descrito em uma rotina específica CHSCP, proposta no MATPRO.

As duas rotinas são usadas para descrever o calor específico aparente do *Zircaloy*. A primeira rotina CCP, descreve o calor específico à pressão constante, o seja o valor verdadeiro. O segundo, CHSCP, descreve a adição aparente de energia para o calor específico devido à energia necessária na dissolução dos hidretos.

A segunda rotina, CHSCP, requer tanto a temperatura como a concentração de hidretos depositados, sendo calculada pela rotina CHUPTK. No caso do aço, não temos a radiólise da água acumulando hidretos no aço; portanto, esclarece-se que não se fazem necessárias estas rotinas complementares.

3.2.2 Condutividade térmica (*cthcon*)

A condutividade térmica é uma propriedade dos materiais atribuída aos parâmetros de rede, no caso de não metais, já para os metais puros é função das características eletrônicas. A condutividade térmica do revestimento é encarregada de transferir o calor gerado na fissão do combustível para o refrigerante. A condutividade térmica é um parâmetro necessário para previsões precisas da temperatura do combustível. A rotina CTHCON do MATPRO é adotada para calcular a condutividade térmica do revestimento. No caso das ligas à base de zircônio, verifica-se pequena variação entre a condutividade térmica do *Zircaloy-2* e do *Zircaloy-4* devido à composição química; a condutividade altera-se na mudança de fase de hexagonal compacto (HCP) para cúbico de corpo centrado (CCC), em 865 °C [3,10].

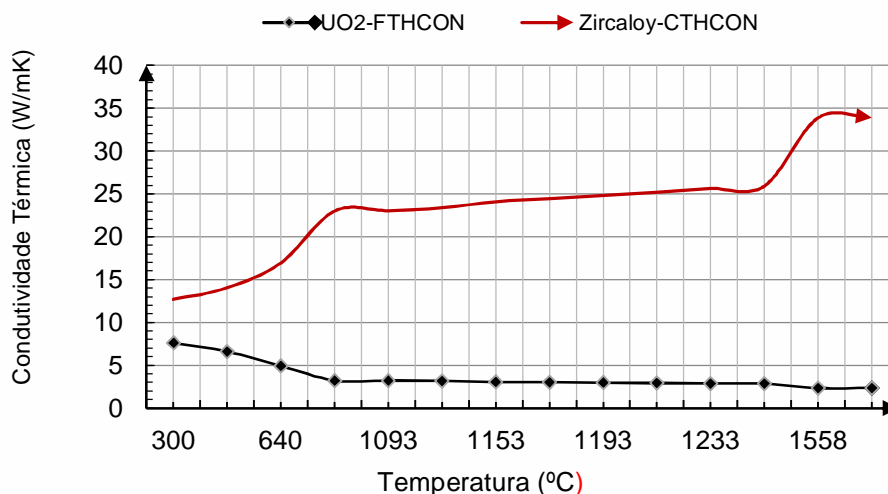


FIGURA 3.6 - Condutividade térmica do *Zircaloy* e do dióxido de urânio [3]

A Figura 3.6 apresenta as curvas referentes às correlações de condutividade térmica do *Zircaloy* comparativamente ao dióxido de urânio UO₂, como definidas na biblioteca MATPRO.

Observa-se que a condutividade do combustível decresce com a temperatura da pastilha. A condutividade térmica do aço 348, apresenta-se uma correlação em função da temperatura, é calculada pela adequação da função CTHCON. A correlação é um ajuste numérico de curvas para os valores conhecidos [3,31,32].

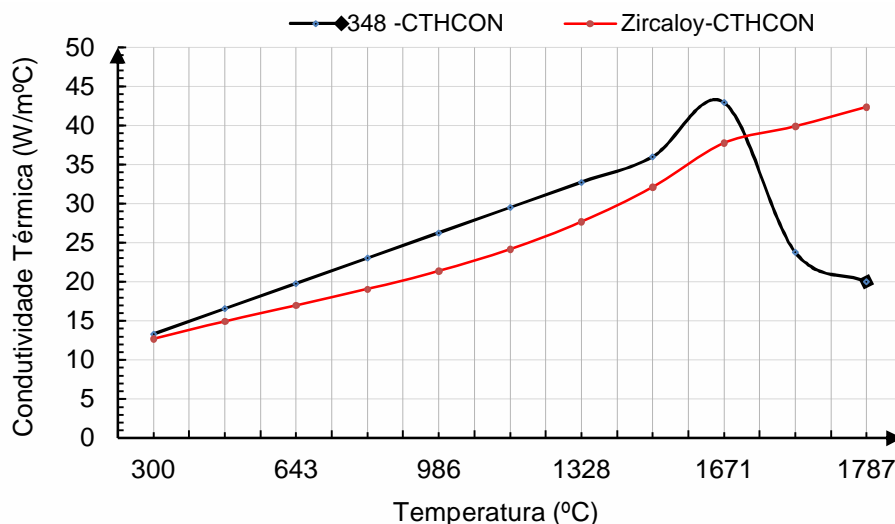


FIGURA 3.7 - Condutividade térmica do Zircaloy 4 e aço 348 na faixa térmica de 300 °C a 1787 °C [1,3,27]

A Figura 3.7 apresenta a condutividade térmica do *Zircaloy* e do aço 348. Verificam-se que ambas são crescentes com a temperatura; somente o dióxido de urânio tem redução na condutividade. A condutividade térmica do aço 348 é superior à do *Zircaloy-4*. A condutividade é apresentada nas equações (3.6), (3.7) e (3.8) [1,3,27,28,31,32].

$$(26,85^{\circ}\text{C} \leq T \leq 1397,85^{\circ}\text{C})$$

$$K_s = 0,0189T + 12,7425 \quad (3.6)$$

$$(1397,25^{\circ}\text{C} < T \leq 1453,85^{\circ}\text{C})$$

$$K_s = 0,0189T + 12,7425 \quad (3.7)$$

$$(1397,25^{\circ}\text{C} < T \leq 1453,85^{\circ}\text{C})$$

$$K_s = -0,3422T + 517,4737 \quad (3.8)$$

$$(T \geq 1453,85^{\circ}\text{C})$$

$$K_s = 20 \quad (3.9)$$

A redução da condutividade do UO_2 consiste em uma nítida desvantagem, uma vez que, alcança as temperaturas limites de operação com grande aumento de volume por dilatação térmica e por deposição de gases de fissão. A rotina CTHCON calcula a condutividade térmica do revestimento, sendo definida para os estados permanente e transiente. A modelagem é puramente dependente da temperatura, não sendo correlacionada, com outros fenômenos inerentes como:

- i. a intensidade do fluxo de nêutrons;
- ii. tensão residual;
- iii. orientações cristalinas;
- iv. alterações na composição do revestimento resultado da transmutação ou ao acúmulo de elementos.

A rotina CTHCON da biblioteca de propriedades MATPRO, considera apenas os efeitos da temperatura, formando um grupo de correlações estritamente térmicas. Nesse caso, não se considera o efeito espectral da energia do fluxo de nêutrons, em particular os nêutrons rápidos ($E > 1\text{MeV}$), estes contribuem para a fragilização do aço. Presume-se que esses efeitos da radiação reduzam a condutividade térmica, desta forma, modifiquem essas propriedades de forma reduzida, porém, não sendo equacionáveis de forma simples, apresentando alterações em longos ciclos de irradiação. Nas correlações, a condutividade, e a temperatura está em Celsius ($T^{\circ}\text{C}$). A Tabela 3.12 apresenta os valores da condutividade térmica do *Zircaloy* e do aço [3,10,27,28,31,32].

TABELA 3.12 - Condutividade térmica do Zircaloy-4 e do aço 348 de 258 a 387 °C

Temperatura T(°C)	Condutividade Térmica (W/m-K)	
	Zr-4	AISI - 348
258	16	18
301	16	18
344	17	19
387	17	20

A metodologia aplicada na biblioteca de propriedades MATPRO adota como propriedades estritamente térmicas, as seguintes correlações, descritas em forma de rotinas: a condutividade térmica; o calor específico; a entalpia e a massa específica. Quando o aço entra na faixa térmica de fusão ou derretimento, a condutividade térmica se reduz à metade, isso ocorre nos metais. Nas proximidades da faixa térmica da fusão, de 1398 °C a 1454 °C; a curva decresce até a metade do valor 35 W/(m-K) e, em seguida, estabiliza-se em 19 W/(m-K) [3,10].

3.2.3 Condutividade térmica dos óxidos (zotcon)

O aço inox 304 sem estabilização foi o mais utilizado nos reatores do passado; portanto, foi tema de um número maior de investigações com dados experimentais disponibilizados. O processo de oxidação foi modelado por dados experimentais do aço 304. Nesse caso, os óxidos formados são compostos por uma série de camadas, ou seja, os óxidos se separam em grupos de camadas sobrepostas; a camada inferior é formada por óxidos de cromo [3,27,28].

A Tabela 3.13 apresenta a cinética da reação de oxidação. O aço oxida-se de forma atenuada em relação ao Zircaloy, mas, em temperaturas elevadas próxima do ponto de fusão do aço, apresentam a mesma percentual de oxidação.

TABELA 3.13 - Oxidação em altas temperaturas
Zircaloy e aços austeníticos

Temperatura	Zr-4 (%)	Aço Austenítico (%)
750 °C	25	10
1050°C	65	30
1150°C	85	60
1250°C	97,5	97,5

O revestimento de aço apresenta pelo menos três óxidos de ferro:

- i. óxido de ferro(I), o monóxido de ferro, FeO;
- ii. óxido de ferro-(II), Fe₂O₃ dióxido de ferro ou hematita;
- iii. óxido de ferro-(III), ou magnetita, é Fe₃O₄, esse um óxido magnético.

A condutividade térmica média dos óxidos de ferro é inferior se comparadas com a dos óxidos de zircônio, como o dióxido de zircônio ZrO₂.

O óxido Fe_2O_3 , com estrutura hexagonal, forma a camada mais externa, com ponto de fusão de 1350 °C. A magnetita, o óxido de ferro-III, é a camada intermediária, um óxido magnético com estrutura cúbica, e ponto de fusão de 1592 °C. No caso do aço, as oxidações do ferro com o oxigênio são exotérmicas; ferro em contato com oxigênio produz óxido de ferro-I, FeO , e libera energia [12, 47].

Para a espessura da camada de óxido formada a incerteza admitida é de ($\pm 50\%$), sobre a espessura prevista. O desvio-padrão do poder de oxidação e o ganho em peso devido à oxidação são um pouco menores que ($\pm 25\%$) do valor predito, porque a composição química do óxido e a densidade não afetam a previsão dessas quantidades. No caso do aço tipo 348, os elementos estabilizadores de liga, como cromo, níquel, manganês e tântalo, são adicionados para consolidar a estrutura cúbica de face centrada (CFC) da austenita. Esses elementos garantem a formação da austenita maleável e resistente à corrosão [47,48].

Os calores específicos dos óxidos de ferro são superiores ao dos óxidos de zircônio. A diferença é cerca de 50% acima dos óxidos de zircônio. Isso significa que os óxidos de ferro sofrem menores alterações térmicas, com a mesma potência linear (kW/m) desenvolvida na vareta, provocando aquecimento proporcional.

A Tabela 3.14 apresenta o calor específico dos óxidos formados no aço e no Zircaloy.

TABELA 3.14 - Calor específico dos óxidos de ferro e zircônio

T(°C)	Zr-4 (J/kg-K)	304 (J/kg-k)
290	447,2	673,1
310	465,3	687,1
330	480,5	701,1
350	493,3	715,1
370	504,3	729,0
390	513,9	743,0
410	522,2	756,9

As características dos óxidos originados no aço são complexas contendo além dos óxidos de ferro, os seguintes óxidos: CrO_3 , Cr_2O_3 e NiO e spinel. O procedimento de cálculo considera três parâmetros cinéticos: (i) a potência linear da oxidação; (ii) a espessura da camada formada; (iii) a taxa de oxidação.

As correlações são referentes aos calores específicos dos óxidos [3,10]. O calor específico dos óxidos de ferro é definido pelas equações (3.10), (3.11), (3.12) e (3.13).

$$\text{CPS}_{\text{Fe}_2\text{O}_3} = 636,0221 + 1,0860 * T - 2,3720 \times 10^{-5} T^2 \quad (3.10)$$

$$\text{CPS}_{\text{FeO}_2} = 715,3151 + 0,1432 * T \quad (3.11)$$

$$\text{CPS}_{\text{Fe}_3\text{O}_4} = 632,6399 + 8,7023 * T - 4,9760 \times 10^{-7} T^2 \quad (3.12)$$

$$\text{Cps}_{\text{SSOX}} = 634,3889 + 0,9467 * T \quad (3.13)$$

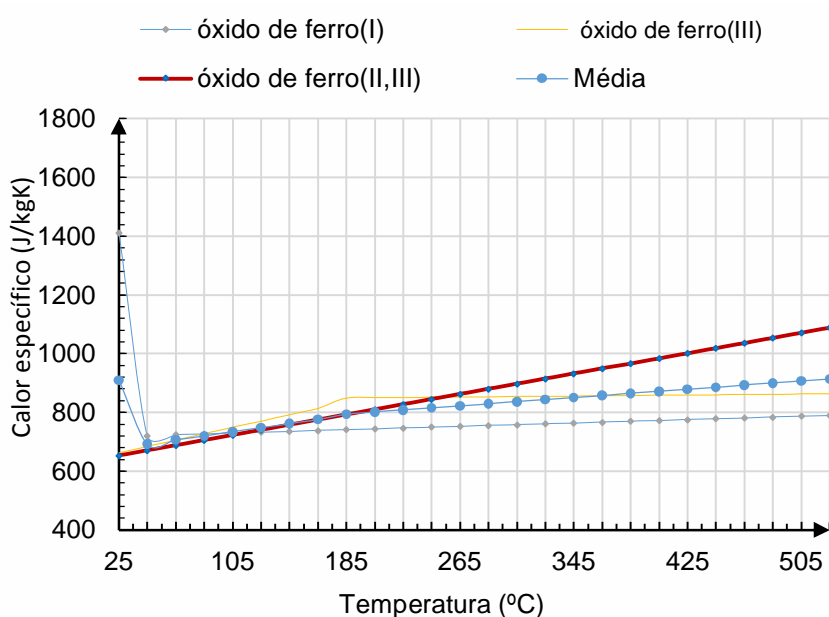


FIGURA 3.8 - Calor específico dos óxidos de ferro [3]

A Figura 3.8 apresenta o calor específico dos óxidos formados no aço.

O ferro precisa de energia para dissociar a molécula de H_2O , aproximadamente $2,4182 \times 10^5$ J/mol, e a formação de óxido de ferro-II produz $2,67 \times 10^5$ J/mol. A modelagem para correlação da energia exotérmica liberada na oxidação é uma função do oxigênio gerado na superfície de oxidação [3,10].

A oxidação é uma reação exotérmica. A potência linear gerada pela oxidação no revestimento é calculada. A equação (3.14) calcula a entalpia dos óxidos formados no aço em função da temperatura $T(^{\circ}C)$.

$$H_{SSO} = 2,6910 * 10^{-6} T^3 + 3,4989 * T^2 + 3,2713 * 10^5 T + 661,35 \quad (3.14)$$

O processo de corrosão desenvolve-se na face externa das ligas metálicas. Os óxidos são resultado do oxigênio reagindo com os metais como: ferro, cromo, zircônio e níquel. No caso das ligas à base de zircônio, a camada de óxido é formada por ZrO_2 .

A Figura 3.9 apresenta a entalpia dos óxidos de zircônio.

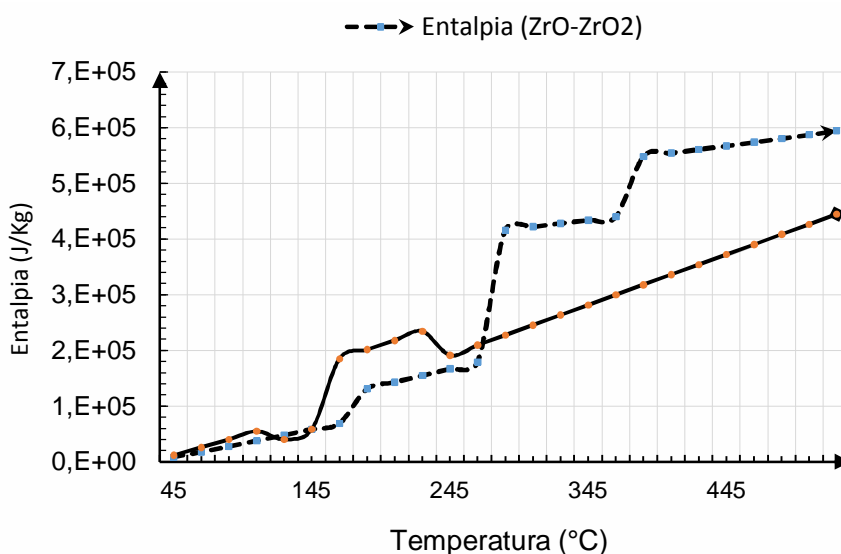


FIGURA 3.9 - Entalpia dos óxidos de zircônio e ferro[3]

Na Figura 3.9 apresenta-se a entalpia dos óxidos formados no *Zircaloy* comparativamente com os formados no aço. No caso dos aços (18%Cr-8%Ni), 348, existe uma composição de óxidos de ferro e cromo FeO , Fe_2O_3 e Fe_3O_4 e de óxidos de cromo Cr_2O_3 .

Para efeito de cálculo, adotam-se somente os óxidos de ferro. O ganho de peso decorrente da oxidação é tomado no final de um intervalo de tempo, e uma estimativa da espessura da camada de óxido, no final de uma etapa de tempo.

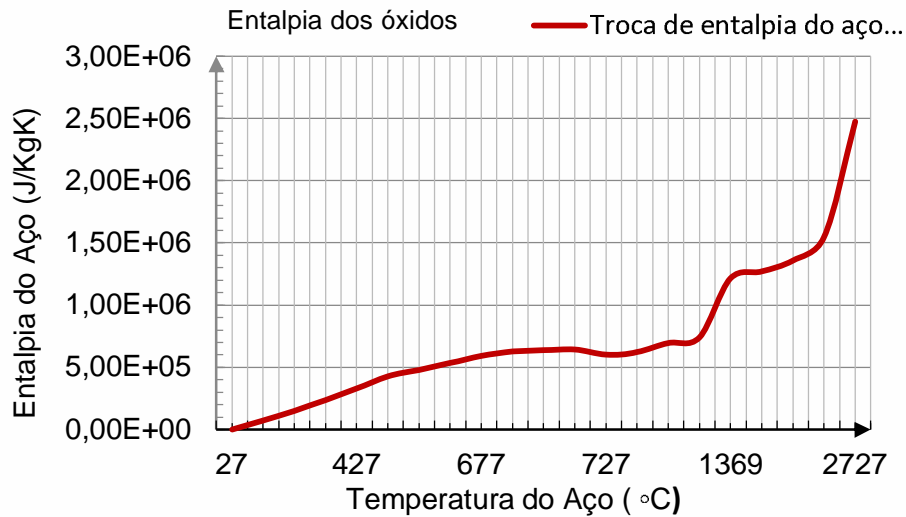


FIGURA 3.10 – Entalpia dos óxidos formados no aço [3]

$$K = 0,046851 + (T) * (3,3292 * 10^{-7} - 2,5618 * 10^{-8} * (T)) \quad (3.15)$$

A equação refere-se à entalpia dos óxidos do aço. A modelagem requer a temperatura do revestimento, a duração do incremento de tempo, o diâmetro externo do revestimento como fabricado, o ganho de peso inicial e a espessura da camada de óxido inicial. Na Figura 3.11, apresenta-se o calor específico dos óxidos de ferro e do zircônio. A condutividade térmica dos óxidos de ferro é inferior aos óxidos de zircônio; portanto, os óxidos de ferro produzem aumento da temperatura do revestimento.

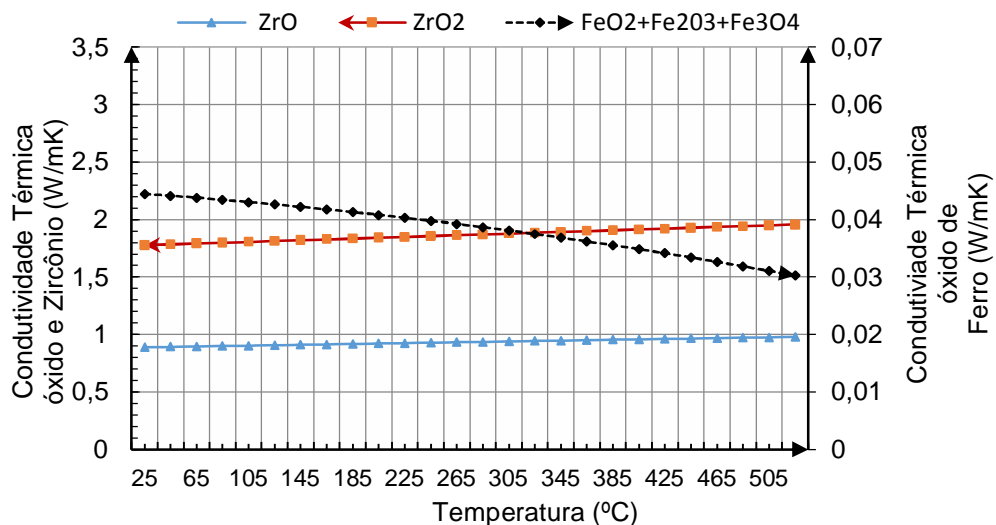


FIGURA 3.11 - Calor específico dos óxidos de ferro formados no aço Fe_2O_3 , F_3O_4 FeO_2 e no zircônio ZrO_2 , ZrO [3]

A modelagem implica no cálculo das constantes de cinética da reação de oxidação, uma curva parabólica para o ganho de peso de oxidação de aços inoxidáveis em função da temperatura. A equação (3.15), a variável $T(K)$ é a temperatura dada em Kelvin.

3.2.4 Emissividade do revestimento (zoemis)

A rotina ZOEMIS retorna à emissividade da superfície do revestimento. A rotina codificada na biblioteca é utilizada no FRAPCON-3.4 e no FRAPTRAN-1.4. Os óxidos formados na face externa do revestimento alteram a emissividade, os corpos negros apresentam emissividade igual à unidade. A camada de óxido formada no aço também reduz os teores de cromo que formam a camada de passivação além da corrosão intergranular que provoca depletação do cromo [3,10].

Os materiais emitem energia radiante como resultado da vibração térmica dos elétrons e íons, dos átomos e moléculas. O processo é chamado de radiação térmica ou energia térmica radiante. A emissividade é importante no caso da transferência de energia térmica em sistemas com gradiente térmico em altas temperaturas. A Tabela 3.15 apresenta dados experimentais de aços da série 300 oxidados em diferentes temperaturas e condições.

TABELA 3.15 - Emissividade experimental de aços austeníticos

Tipo e aço	T (°C)	Experimental	Função de ajuste
310	24	0,56	0,235
321	93	0,27	0,241
350	93	0,18	0,241
321	149	0,18	0,246
350	149	0,11	0,246
17-7PH	149	0,09	0,246
321	427	0,32	0,274
350	427	0,27	0,274
321	815	0,49	0,318
17-7PH	815	0,16	0,318
350	982	0,35	0,339

A emissividade é adimensional e oscila entre zero a um (0-1). A dependência com a diferença de temperatura entre os corpos é relatada pela lei de *Stefan Boltzmann*. A energia radiante atravessa o vácuo. A emissividade divide-se em direcional-espectral e hemisférica-espectral. A camada de óxido presente no aço é distinta da formada nas ligas de zircônio, depositando o ZrO_2 . Na camada externa do revestimento depositam-se os óxidos com origens variadas. Um grupo de óxidos dispersos no refrigerante se acumula na face externa do revestimento, além dos óxidos resultantes da oxidação do se acumulam no próprio revestimento. O revestimento está sujeito a temperaturas altas, à atuação da química da água e aos efeitos deletérios da irradiação.

Os elementos como ferro, cromo e níquel estão presentes nesse processo de oxidação, reagindo com o oxigênio da água.

A emissividade total é a integração de todos os comprimentos de onda emitidos; no caso do *Zircaloy*, adota-se 0,325 para temperaturas inferiores a 1227 °C. A princípio, a emissividade total depende da rugosidade superficial e da espessura do óxido depositado. No entanto, um valor constante de 0,8 é recomendado na biblioteca MATPRO. Quando o revestimento não está oxidado, adota-se emissividade igual a 0,2. Portanto, assume-se o valor da emissividade igual a 0,8. Esses valores são definidos para o *Zircaloy*. Por meio dos valores da Tabela 3.14, define-se a curva da emissividade por uma interpolação exponencial, a equação (3.16), apresentada com dados plotados na Figura 3.12 [49].

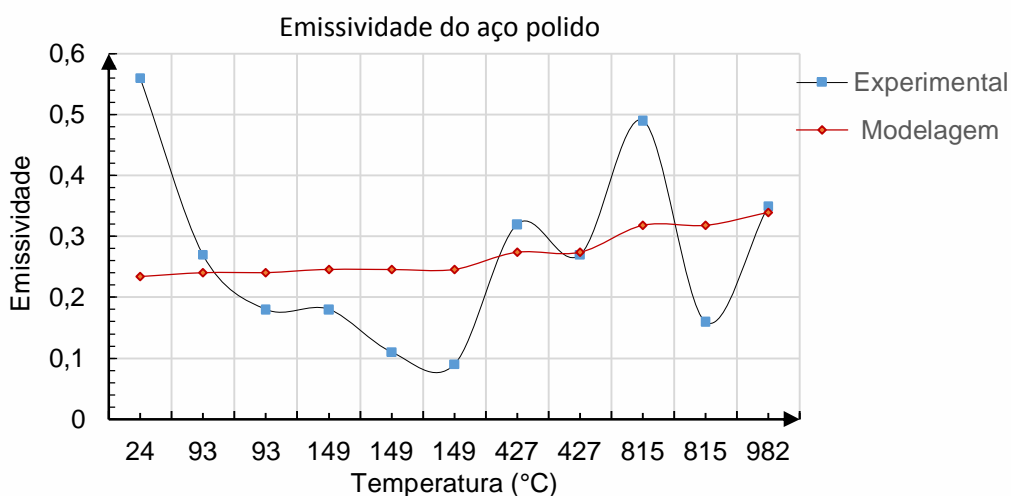


FIGURA 3.12 - Dados de emissividade, testes com aços austeníticos [49]

A emissividade do aço austenítico, quando polido, é variável com a temperatura [49]. Os aços austeníticos polidos apresentam emissividade entre 0,1 a 0,6, se oxidados apresentam emissividade de 0,7 a 0,9. A emissividade reduz quando a superfície metálica é polida. A análise numérica de dados experimentais demonstra que a emissividade aumenta com a temperatura, para aço polido ou oxidado. O aço 316, quando aquecido a 949 °C, apresenta emissividade de 0,66. Quando polido a 24 °C, apresenta emissividade de 0,28 [3,49].

No estado oxidado, nas mesmas temperaturas, os aços da série 300 apresentam uma emissividade maior entre 0,79 e 0,80. O limite da rotina ZOEMISS é particular para os óxidos de zircônio, e com uma camada-limite de oxidação. A correlação é destinada à superfície polida ou lisa, enquanto o material não atingiu a camada de oxidação-limite com espessura de 3,88 µm. A partir dessa espessura, passa-se para a condição de oxidado, muda-se a correlação, com emissividade média de 0,838, caso a camada de óxido seja entre 3,88 µm a 150 µm [3,49].

$$E_{\text{aço}} = 0,2324 * \text{EXP}(0,0003855 * T(^{\circ}\text{C})) \quad (3.16)$$

A camada de oxidação do aço apresenta um acréscimo na emissividade do revestimento. O ferro apresenta emissividade variando entre 0,74 a 100 °C, e 0,82 a 525 °C. A função adotada para a emissividade do aço foi aproximada por valores obtidos em diversos aços na Tabela 3.14 [49]. As equações (3.17) e (3.18) são resultados dos dados tabelados; a variável ε representa a emissividade adimensional e $T(^{\circ}\text{C})$ é a temperatura. As correlações são ajuste numérico dos dados da Tabela 3.15.

$$\varepsilon_{\text{aço-polido}} = 0,09179 * \exp(0,003183 * T) \quad (3.17)$$

$$\varepsilon_{\text{aço-oxidado}} = 0,7699 * \exp(0,0001195 * T) \quad (3.18)$$

3.2.5 Expansão térmica (*chtexp*)

O coeficiente de dilatação térmica linear do revestimento é menor do que o do combustível, cooperando para o fechamento da folga, e para se desenvolver o contato sólido entre combustível e revestimento.

A expansão térmica do Zircaloy é mais pronunciada em uma direção devido à anisotropia da liga na fase hexagonal compacta (HCP) abaixo de 865 °C [70,72]. Os aços austeníticos são considerados como isotrópicos em relação às ligas à base de zircônio, uma vez que o arranjo cristalino da austenita ferro(γ) é cúbico de face centrada (CFC). A expansão térmica do Zircaloy é cerca de 36% da obtida pelo aço, na temperatura de 20 °C, equivalendo a 6,0 $\mu\text{m}/(\text{m}\cdot\text{K})$. A Tabela 3.16 apresenta a expansão térmica axial e circunferencial [3,31,32].

TABELA 3.16 - Expansão térmica axial e circunferencial
do *Zircaloy* e do aço 348 entre 217° C a 788 °C

T(°C)	Zr-Circunferencial	Zr-Axial	348-Axial
217	0,0009	0,0024	0,0081
312	0,0014	0,0036	0,0098
407	0,0019	0,0048	0,0115
503	0,0024	0,0060	0,0132
598	0,0028	0,0072	0,0150
693	0,0033	0,0084	0,0167
788	0,0038	0,0096	0,0186

A Figura 3.13 mostra as curvas relativas à expansão circunferencial e axial do *Zircaloy*, descritas no MATPRO.

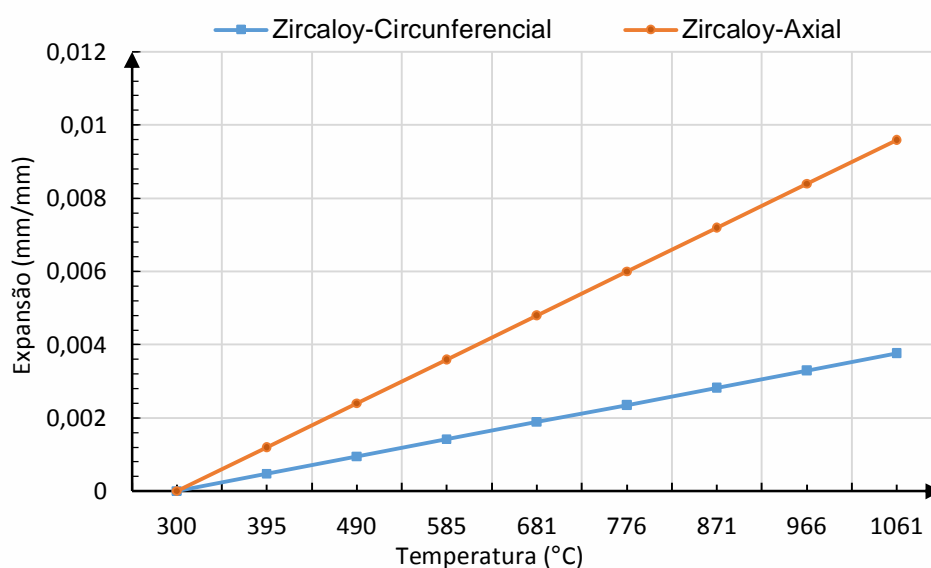


FIGURA 3.13 Expansão circunferencial e axial do Zircaloy [3]

Os aços estabilizados de baixo carbono da série 300, apresentam uma expansão térmica média de $16,6 \mu\text{m}/(\text{m}\cdot\text{K})$; na faixa térmica de $20 \text{ }^\circ\text{C}$ a $100 \text{ }^\circ\text{C}$, a função é crescente com a temperatura. Essa relação é a média dos seguintes aços 321, 347, 348 [69]. Se houver a expansão da faixa de temperatura de $20 \text{ }^\circ\text{C}$ a $600 \text{ }^\circ\text{C}$, o coeficiente de expansão térmica passa a ser $18,9 \mu\text{m}/(\text{m}\cdot\text{K})$. Uma correlação quadrática descreve a expansão térmica [37]. Na prática, a deformação radial é semelhante à axial [70-74]. A Tabela 3.17 reproduz os dados adaptados para aços tipos 321, 347 e 348 [37]. A dilatação axial do aço 348 é cerca de quatro vezes a do *Zircaloy* [3,10]. Na Figura 3.14 apresenta-se expansão térmica linear do aço AISI 348 e do *Zircaloy*.

TABELA 3.17 - Expansão linear do aço 348 e *Zircaloy*

T (°C)	$\Delta L/L$ - 348	$\Delta L/L$ -Zircaloy	348/Zircaloy
290	0,00884	0,00190	4,66
310	0,00916	0,00205	4,48
330	0,00947	0,00220	4,31
350	0,00978	0,00235	4,16

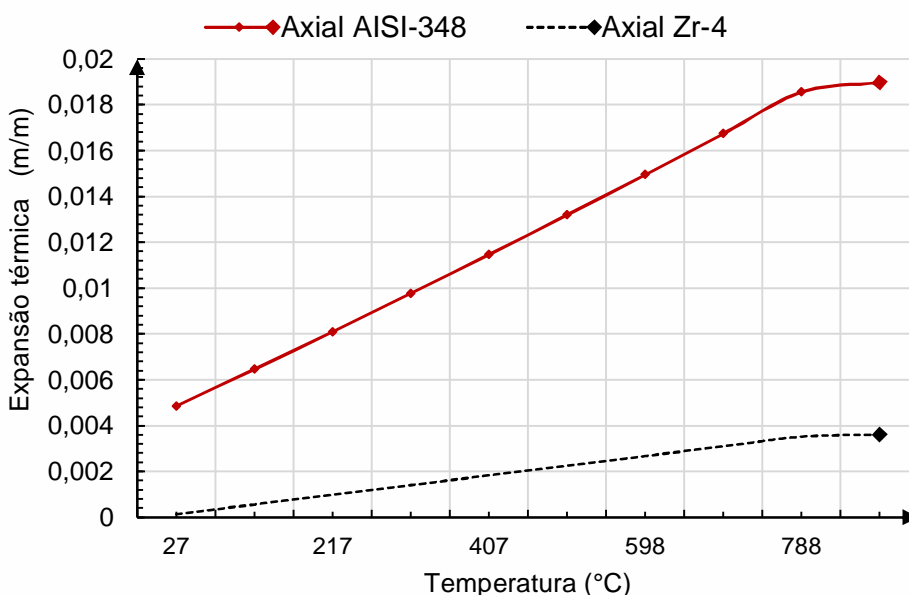


FIGURA 3.14 Expansão térmica linear aço 348 e *Zircaloy-4* [1,3]

A No processo de adequação, a função CTHEXP calcula a deformação produzida pela expansão térmica do aço inoxidável 348; a rotina CDEN calcula a mudança de densidade do material [3,10].

Para o *Zircaloy*, os códigos de desempenho utilizam a correlação de *Mehan-Wiesinger* proposta, em 1961, para temperaturas abaixo de 799,85 °C.

Os valores de expansão térmica entre 799,85 e 999,85 °C são determinados por Interpolação linear. Além disso, as versões atuais incluem, um cálculo da expansão térmica para ligas com 1% de nióbio (Zr; 1%-Nb) [72-75]. A biblioteca de correlações descreve a expansão térmica pela rotina CTHEXP, esta exige que a temperatura do revestimento, seja uma temperatura de referência (para a qual a tensão térmica será zero) [3,10]. A Tabela 3.18 apresenta a expansão térmica e a condutividade dos aços 321, 347 e 348 [1,27,28,74].

TABELA 3.18 Expansão térmica e condutividade dos aços 321, 347 e 348

T(°C)	Expansão térmica $\mu\text{m}/(\text{m}^\circ\text{C})$	Condutividade térmica (W/m-K)
20 -100	16,6	16,3
20 - 600	18,9	21,4
20 -1000	20,5	-

A expansão térmica do aço é superior em relação ao *Zircaloy*, assim sendo pode ser favorável, entretanto pode apresentar desvantagens [3,10,68,69], nas mesmas condições. As equações (3.19), (3.20), (3.21) apresentam as correlações definidas para o aço austenítico 348. Em relação a identificação das variáveis, tem-se a temperatura $T(^{\circ}\text{C})$ e a expansão térmica ε .

$$(26,85^{\circ}\text{C} \leq T < 1397,85^{\circ}\text{C})$$

$$\varepsilon_{\text{aço}} = 1,69 + 9,2325 \times 10^2 T + 1,26092 T^2 \quad (3.19)$$

$$(1397,85^{\circ}\text{C} < T \leq 1453,85^{\circ}\text{C})$$

$$\varepsilon_{\text{aço}} = 1,97257 \times 10^4 T - 0,2986 \quad (3.20)$$

$$(T > 1453,85^{\circ}\text{C})$$

$$\varepsilon_{\text{aço}} = 4,2 \times 10^{-2} \quad (3.21)$$

O cálculo da expansão altera a massa específica, portanto, na temperatura de 20 °C a 800 °C, a densidade do aço tipo 321 é 7,92 g/(cm³).

Os aços dos tipos 347 e 348, apresentam densidade ligeiramente superiores a $7,96 \text{ g}/(\text{cm}^3)$ [27,74,75]. As correlações, as quais se destinam ao cálculo da densidade, requerem somente a temperatura [1,3,27,28]. O aço austenítico não sofre transformação cristalina [74]; portanto, a modelagem é mais simples em comparação à das ligas de zircônio. A expansão térmica do aço 348 em relação a do Zircaloy é cerca de cinco vezes maior.

O fechamento da folga ocorre após o Zircaloy. Verifica-se que a expansão térmica do aço é bem superior à apresentada pelas ligas de zircônio. Para calcular a alteração do volume do revestimento, utilizam-se os resultados da expansão térmica; a incerteza das correlações é de cerca de 6,5%, ou seja, $50 \text{ kg}/(\text{m}^3)$.

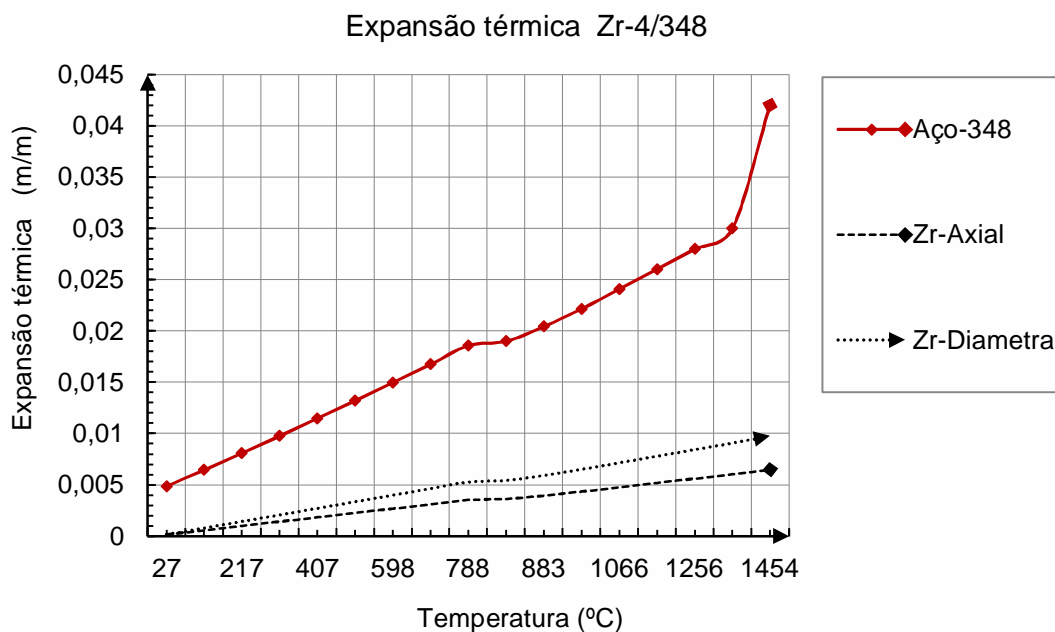


FIGURA 3.15 - Deformação axial e diametral do *Zircaloy* e do aço 348 [1,3,27]

A Figura 3.15 apresenta a deformação axial e diametral do *Zircaloy* e do aço 348 [1,3,27]. Os valores obtidos da expansão térmica calculada por *CTHEXP* serão utilizados para corrigir a densidade. A rotina *CDEN* é encarregada de calcular a densidade do revestimento. No caso do *Zircaloy*, a expansão térmica axial difere da circunferencial devido ao coeficiente de anisotropia. Assim sendo, o cálculo das deformações segue correlações independentes, e calculadas separadamente.

As ligas à base de zircônio demonstram um comportamento fortemente anisotrópico. No caso de as temperaturas serem abaixo de 865 °C, na fase (CCC), a anisotropia é reduzida; o aço inox é considerado anisotrópico abaixo do ponto de fusão. Utilizam-se as correlações examinadas na expansão térmica para se calcular a expansão volumétrica e a densidade do material, em função da temperatura.

3.2.6 Módulo de elasticidade (celmod)

As rotinas destinadas ao cálculo do módulo de elasticidade e cisalhamento são definidas na biblioteca de propriedades. A modelagem é adotada no estado permanente e transiente. O módulo de elasticidade do aço 348 não irradiado é semelhante ao dos aços austeníticos devido à composição. A incerteza da correlação adotada é ($\pm 3\%$) em relação ao valor do módulo de elasticidade. A Tabela 3.19 mostra os valores experimentais obtidos para o módulo de elasticidade publicados pela ASTM [27,28].

TABELA 3.19 - Módulo de elasticidade dos aços: 304, 316, 321, 347

Módulo de Elasticidade (GPa)					
AISI	20 °C	100 °C	200° C	400 °C	600 °C
304	193	191	183	168	148
316	193	192	185	173	151
321	193	192	182	166	151
347	193	184	184	152	152

$$F = \left(\frac{EA_0}{L_0} \right) \Delta L = Kx \quad (3.22)$$

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (3.23)$$

$$\nu = \frac{E}{2G} - 1 \quad (3.24)$$

$$k = \frac{2G(1+\nu)}{3(1-2\nu)} \quad (3.25)$$

A definição fundamental está contida na lei de *Hooke* generalizada, a qual é descrita na equação (3.22); a variável F representa a força $F = Kx$, a variável K é constante de deformação e x é a deformação. As relações entre os módulos de elasticidade (E) e o módulo de cisalhamento (G) e a razão de Poisson (ν) são comumente relatadas na teoria da plasticidade. Tais relações são descritas nas equações de (3.23) a (3.25).

Em geral, o módulo de elasticidade das ligas metálicas se reduz com a temperatura, sendo definido para modelar as tensões em função das deformações na região elástica [53,54]. O coeficiente de elasticidade é definido pela lei de *Hooke* generalizada. O módulo de elasticidade se reduz com o aumento da temperatura para os aços austeníticos [1,3,31,32].

O coeficiente de elasticidade (E) aplica-se na região elástica da curva de tensão e deformação; a região elástica, limita-se abaixo do ponto da tensão limite de escoamento (YS). A composição química desses aços difere quanto aos elementos estabilizadores e quanto à proteção contra sensitização.

O módulo de elasticidade do aço é 1,96 vezes o módulo de elasticidade do *Zircaloy*, na temperatura de 20 °C. Os limites de escoamento e a tensão de ruptura do aço são superiores aos do *Zircaloy*. Nas relações (3.26), (3.27) e (3.28), definem-se o módulo de elasticidade em função da temperatura para os aços 304, 316 e 348. A escala térmica é *Celsius*. O módulo de elasticidade dos aços 348, 304 e 316 são decrescentes com o aumento da temperatura.

O módulo de elasticidade dos aços austeníticos tipos 304, 348 e 316 são semelhantes, na temperatura ambiente sem irradiação equivale 200 GPa. Para o aço 348, a tensão limite de escoamento, na temperatura de 20 °C, equivale a 275 MPa com 0,20% de deformação.

A incerteza das correlações pode ser avaliada considerando-se o mínimo das incertezas atribuídas ao *Zircaloy*. As incertezas das previsões para a rotina CELMOD são definidas com incertezas de 10%; e, no caso do *Zircaloy*, ($E \pm 3,5$) GPa. No caso em que o módulo de elasticidade seja um valor abaixo de 80 GWd/MTU, a incerteza adotada é de 5%.

$$E_{304} = 202,82 - 7,4707 \times 10^{-2} T \quad (3.26)$$

$$E_{316} = 200 - 0,07231T - 1,361 \times 10^{-5} T^2 \quad (3.27)$$

$$E_{348} = 201,6 - 0,08476T + 3,812 \times 10^{-7} T^2 \quad (3.28)$$

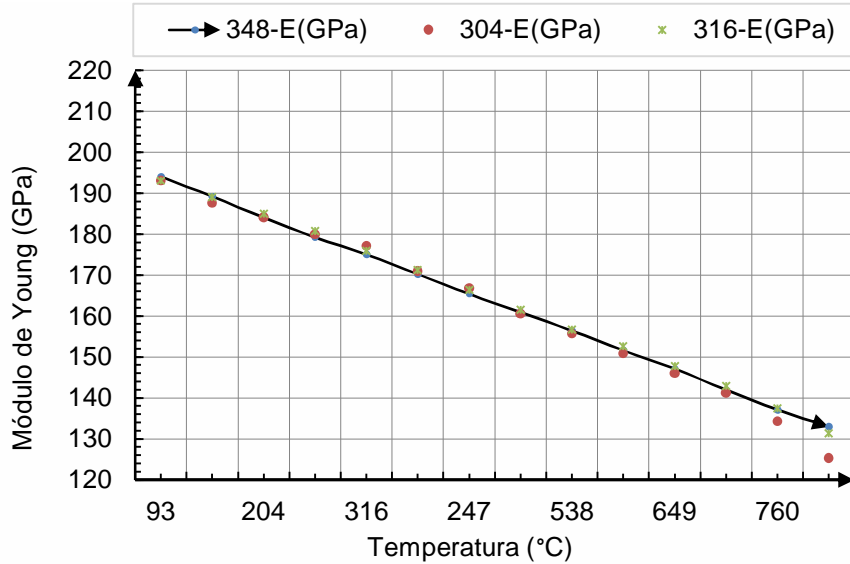


FIGURA 3.16 – Módulo de elasticidade dos aço 348,304,316 [1,3,27,28]

A Figura 3.16 apresenta a curva do módulo de elasticidade relativa à equação (3.28), comparando-se o aço 348 e o *Zircaloy*. Esses valores são definidos para as ligas de zircônio, resultado dos erros de interpolação numérica dos dados experimentais [1,3,27,28].

Para o aço 348, adotam-se as incertezas calculadas para ligas à base de zircônio, supondo que o intervalo de confiança deva ser ligeiramente superior. A resistência à tração é 58,6% superior no aço tipo 348 em relação à do *Zircaloy*. O aço apresenta boas características mecânicas e, também uma fluência superior em relação às ligas à base de zircônio [37, 58]. A Figura 3.17 mostra a curva resultante da correlação para o módulo de elasticidade, com a temperatura $T(^{\circ}C)$.

O módulo de elasticidade é calculado com a tolerância de $(E \pm 10)$ GPa, e o módulo de cisalhamento como $(G \pm 11,6)$ GPa. Em uma análise concernente aos módulos de elasticidade e cisalhamento, nas ligas metálicas, verifica-se uma redução com o acréscimo da temperatura; conforme ocorre o aumento da temperatura, as ligas tornam-se mais flexíveis. Nas pesquisas voltadas para as ligas de zircônio, nas últimas seis décadas, verificou-se que os efeitos da textura cristalográfica são menos importantes, que a influência da temperatura e os efeitos do oxigênio. Esses fatores foram negligenciados para o aço 348

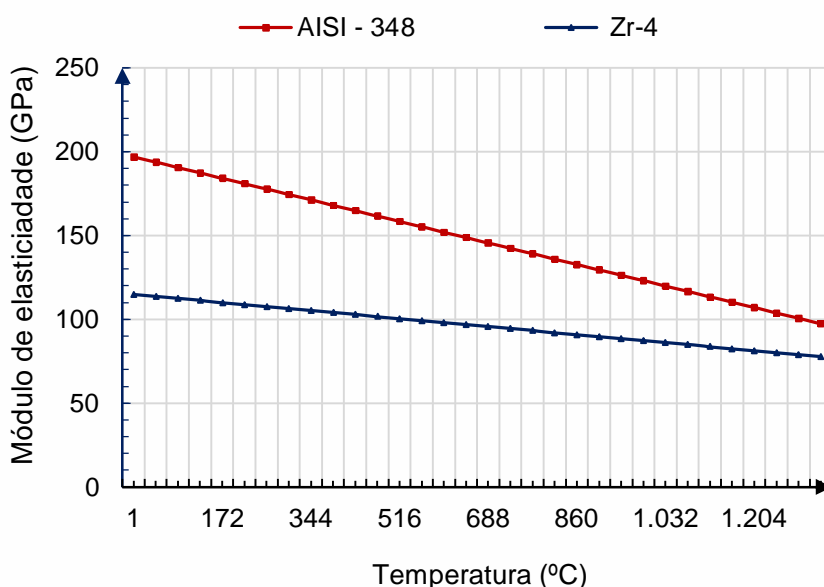


FIGURA 3.17 - Módulo de elasticidade do Zircaloy-4, e aço 348 [1,3,27,28]

3.2.7 Módulo de cisalhamento (*cshear*)

Na biblioteca de propriedades, o módulo de cisalhamento é suportado pela rotina CSHEAR, definida para o estado estacionário e transiente. A rotina foi remodelada para o aço 348 [3,31,32]. O módulo de cisalhamento adota termos alternativos, tais como módulo de rigidez e módulo de elasticidade em cisalhamento. Além disso, o módulo de elasticidade de cisalhamento normalmente é igual ao módulo de elasticidade de torção [3].

O módulo de cisalhamento, também é referenciado como módulo de rigidez é correlacionado por meio do coeficiente de Poisson pela equação (3.29). Na modelagem adotada para o módulo de cisalhamento, verifica-se que o aumento da temperatura reduz a rigidez [3]. Um acréscimo no índice de trabalho a frio ou na concentração de oxigênio produz um acréscimo ao módulo de rigidez. O módulo de cisalhamento é inversamente proporcional à fluência de nêutrons rápidos [53].

O trabalho a frio é acompanhado do encruamento do metal, ocasionado pela interação das discordâncias entre si e com outras barreiras, da mesma forma os contornos de grão, os quais impedem o seu movimento através da rede cristalina. Os aços inox da série 300, sofrem recozimento e trabalho a frio na faixa de temperatura de até 450 °C [53].

Desse modo, verifica-se um decréscimo da resistência mecânica devido ao aumento da temperatura; no entanto, a ductilidade não é reduzida na mesma escala [28,31,32].

O módulo de cisalhamento do aço 348 não irradiado é semelhante aos dos demais aços austeníticos. O aço 348, na temperatura de 1398 °C, inicia a mudança de fase de sólido para líquido. Acima dessa temperatura, os módulos são assumidos como valor nulo. O módulo de cisalhamento é estimado em 30% de incerteza, ($G \pm 4,9$ GPa). A equação (3.28), apresenta o módulo de cisalhamento para o aço 348. A Figura 3.18 mostra a curva resultante da correlação para o módulo de cisalhamento, com a temperatura $T(^{\circ}C)$.

$$G_{304} = 89,5 - 0,03602T - 3,283 \times 10^{-6} T^2 \quad (3.29)$$

$$G_{316} = 86,62 - 0,0513T + 1,676 \times 10^{-5} T^2 \quad (3.30)$$

$$G_{348} = 81,36 - 0,03914T + 2,256 \times 10^{-6} T^2 \quad (3.31)$$

A rotina CSHEAR, em consequência da irradiação, deve levar em conta um acréscimo no limite à tensão de escoamento, e na resistência à tração do aço em função da irradiação. Segue-se os efeitos da propagação dos defeitos cristalográficos, ao longo do plano de deslizamento, o qual induz uma força para o escorregamento; em consequência, reduz-se a mobilidade planar. A saída da função é o módulo de rigidez, com a incerteza associada.

Na codificação destinada para o aço 348, optou-se pela relação fundamental em função da temperatura, supondo-se que os efeitos cristalográficos estejam embutidos na correlação adotada. A equação (3.29) apresenta módulo de cisalhamento para o aço 304. A equação (3.30) apresenta o módulo para aço 316; e a equação (3.31) apresenta o módulo de cisalhamento para o aço 348.

A rotina original calcula o módulo de cisalhamento do revestimento em função de quatro parâmetros de entrada: (i) fluência de nêutrons rápidos; (ii) percentual de trabalho a frio, em geral 12%; (iii) concentração de oxigênio, em que descarta a camada de óxido; (iv) temperatura média do revestimento. A FIGURA 3.18 apresenta o módulo de cisalhamento dos aços 304,316 e 348.

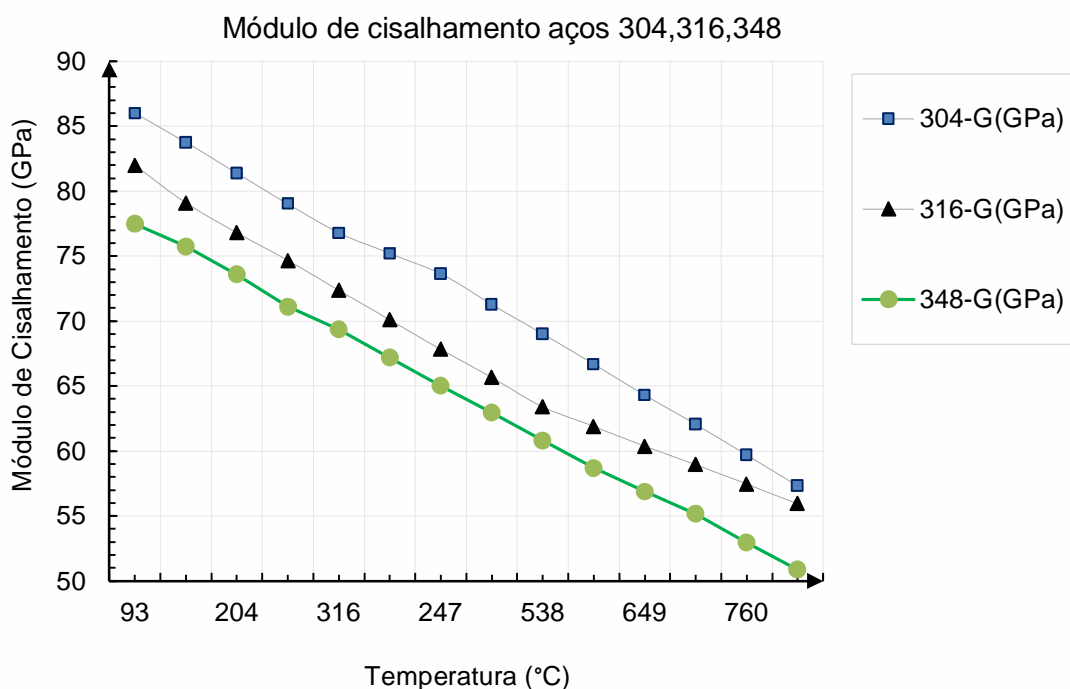


FIGURA 3.18 – Módulo de cisalhamento dos aços 304,316 e 348 [3,28]

3.2.8 Crescimento por irradiação (cagrow)

O crescimento por irradiação na biblioteca de propriedades é suportado pela rotina CAGROW. Esta foi adaptada para aço 348, com os mesmos princípios apresentados para as ligas à base de zircônio. O aço austenítico exibe uma estrutura cristalina cúbica de face centrada (CFC). Os dados experimentais foram abalizados por pesquisas desenvolvidas em reatores rápidos ETR e ATR, realizadas nos anos setenta [47,48,51,52,58]. As correlações foram descritas por Benson [2], para modelar o crescimento por irradiação para o revestimento de aço austenítico 348 [62]; na faixa térmica de temperaturas de 27,85 °C a 1450 °C.

As equações que demonstram a modelagem proposta são apresentadas na equação (3.32), fornecendo a expansão volumétrica a correlação fornece o raio dilatado; as equações (3.33), (3.34) e (3.39) são os fatores utilizados na equação (3.32) [2]. O primeiro grupo de dados foi obtido em um experimento que se desenvolveu no reator ETR, entre março de 1965 e outubro de 1972, com fluência de nêutrons rápidos $4 \times 10^{26} \text{ n}/(\text{m}^2)$. Nesse caso, um grupo de tubos de aço inoxidável tipo 348 foram irradiados com espectro de nêutrons rápidos ($E > 1 \text{ MeV}$), sendo a fluência de $2,8 \times 10^{26} \text{ n}/(\text{m}^2)$.

O segundo grupo de dados refere-se a tubos de aço irradiados no reator ATR, entre 8 de junho de 1969 a 26 de março de 1978 [3,60].

$$\frac{\Delta V}{V} = R \left[\phi + \frac{1}{\beta} \left\{ \ln \frac{1 + \exp \beta(\tau - \phi_t)}{1 + \exp \beta \tau} \right\} \right] \quad (3.32)$$

$$R = 0,01 \exp \left[-49,77 + 0,196 - (1,87 \times 10^{-4}) T^2 \right] \quad (3.33)$$

$$\beta = -1,2 + (6,9 \times 10^{-3}) T \quad (3.34)$$

$$\tau = [7,99 - (2,98 \times 10^{-2}) T + (2,9 \times 10^{-5}) T^2]^{-1} \quad (3.35)$$

Na equação (3.32), apresenta-se a variação volumétrica dada por $\left(\frac{\Delta V}{V}\right) \%$; o fator β é uma função da temperatura na escala Kelvin $T(K)$. A correlação foi desenvolvida com dados de 346 °C a 350 °C. O valor de τ é a mesma unidade do fluxo (n/cm^2); a fluência é dada na mesma unidade da variável τ ($10^{22}n/cm^2$), com a variação da fluência entre 8,7 a 9,5 [51].

A correlação apresentada na equação (3.32) sintetiza o incremento da deformação por causa do crescimento axial do revestimento, em função: do fluxo de nêutrons rápidos e da taxa de fluência, no intervalo de tempo, em uma dada temperatura. A Tabela 3.20 apresenta as condições de irradiação, discriminando os reatores e as temperaturas de irradiação.

TABELA 3.20 – Condições de irradiação

Aço	Fluência $n/(cm^2)$ ($E > 1\text{Mev}$)	Reator	T(°C) Irradiação
348	$3,4 \times 10^{+22}$	EBR-II	399°C
347	4,5 a $4,8 \times 10^{+22}$	ETR e ATR	288°C
348	$2,3 \times 10^{+22}$	ATR	327°C
348	$3,1 \times 10^{+22}$	ATR	353°C

A Figura 3.19 mostra o crescimento axial por irradiação do aço. Entre os efeitos da irradiação verificam-se: (i) o crescimento por irradiação; (ii) o inchamento; (iii) a formação de vazios [55-58].

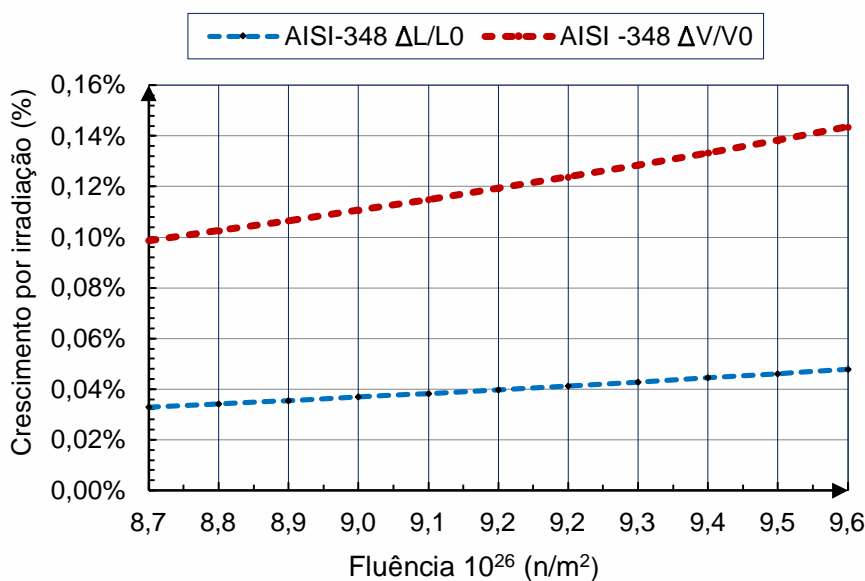


FIGURA 3.19 - Crescimento axial e volumétrico do aço 348 [1,2]

A irradiação desenvolve o endurecimento, ou seja, a redução da ductilidade impondo um processo de fragilização e o fenômeno da densificação, atuando no início do ciclo de irradiação [60,61]. Sumariamente são os efeitos da irradiação de nêutrons rápidos: (i) crescimento; (ii) densificação; (iii) perda da ductilidade. [3,10].

A alteração da taxa de fluência, altera o crescimento por irradiação, estas são questões importantes para o comportamento do revestimento [56-58], uma vez que os elementos combustíveis e componentes estruturais encerrados no núcleo alteram suas dimensões [62,63].

A curva exponencial do crescimento por irradiação é uma função da fluência, sendo exibida na Figura 3.20. A temperatura de irradiação mais alta produz crescimento fracionário menor [21,22]. A variação na extensão é pequena, no entanto, pode ser uma fração significativa da folga entre a vareta e os componentes de montagens superiores e inferiores, os bocais dos elementos combustíveis.

O contato entre as extremidades dos bocais pode causar uma flexão transversal da vareta combustível. Desse modo, desenvolvem-se as tensões estruturais, que se distribuem no corpo dos elementos combustíveis, desta forma para as grades espaçadoras, misturadoras e para os elementos de fixação [62-65]. Como consequência, têm-se a adição de carregamentos distribuídos a partir dos pontos de engaste do elemento combustível.

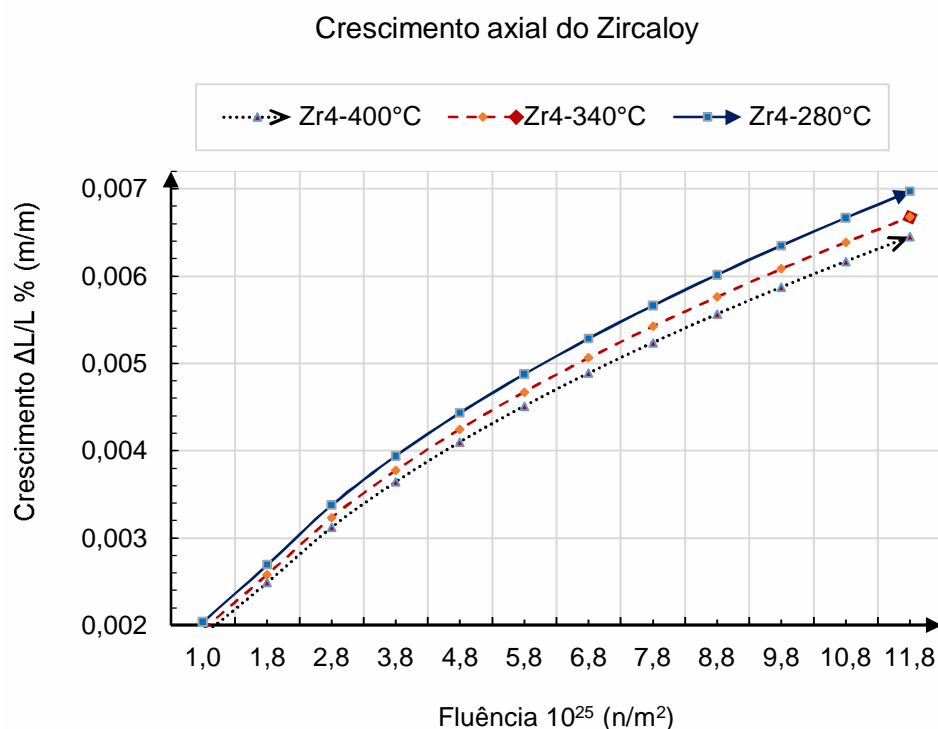


FIGURA 3.20 - Crescimento axial do *Zircaloy* em função da fluência [1,3]

A Figura 3.20 mostra o crescimento por irradiação do *Zircaloy* nas temperaturas de 280 °C a 400 °C

O crescimento é calculado por meio de uma correlação exponencial em função da fluência de nêutrons, com expoente inferior à unidade, variando entre 0,5 e 0,98, mostrando-se inversamente proporcional à temperatura [15]. Os materiais submetidos ao trabalho a frio exibem comparativamente, um crescimento maior que as ligas recristalizadas [53]. As alterações dimensionais são limitadas e permitidas para varetas de combustível. No caso do revestimento com *Zircaloy*, em ciclos de irradiação acima de 40 GWd/MTU, a instabilidade dimensional, torna-se um fator limitante na vida útil do combustível [32].

A engenharia de projeto do combustível nuclear conta com recursos para mitigar o efeito conjunto do crescimento axial e a expansão térmica, por meio das molas de retenção, que são montadas na placa superior e são presas por parafusos e braçadeiras, localizadas em cantos diagonalmente opostos do elemento combustível. As molas que dão flexibilidade na direção axial, as quais prendem as varetas na extremidade; na direção radial, as grades espaçadoras também suportam certa flexibilidade devido à vibração do fluxo de água.

3.2.9 Taxa de fluência (crepr)

A fluência por irradiação é a propriedade definitiva que demonstra a superioridade do aço austenítico em relação às ligas à base de zircônio. O modelo proposto pela biblioteca MATPRO [3,10], destinado ao cálculo da taxa de fluência, inicialmente foi definido pela rotina CREEP; essa rotina foi abandonada [3].

Na versão FRAPCON-3.4, adota-se um modelo atualizado pela rotina *Cladding Creep Strain Rate* (CREPR). A taxa de fluência é dependente do fluxo de nêutrons rápidos, como proposto por *Ross-Ross e Hunt*, em 1968, o conceito da energia de ativação foi proposto por *Filderis*, em 1968 [8,33,37]. O modelo proposto para o cálculo da taxa de fluência contido na rotina CREPR, calcula a derivada da deformação pelo tempo ($\delta\varepsilon/\delta t$) [55,56].

Ainda assim, o código FRAPTRAN não utiliza a rotina CREPR por causa do tempo de resposta do transiente de reatividade ser reduzido a milissegundos. Desse modo, utiliza-se o modelo BALON2 [17,18]. As modelagens para o estado transiente não sofrem alterações, mas teoricamente, sob um aspecto conservador o aço é superior em relação à resistência à fratura [63]. O processo de modelagem do estado transiente é um dos desafios da engenharia de combustíveis. Os parâmetros diretos e indiretos para entrada de dados da rotina em questão são: (i) o fluxo de nêutrons rápidos; (ii) o intervalo de tempo; (iii) a temperatura média do revestimento; (iv) a tensão por nó radial; (v) a pressão interna da mistura gasosa Xe, Kr, He na folga; (vi) a pressão externa do fluido refrigerante; (vii) o raio interno e externo do revestimento; (viii) o trabalho a frio [3,31,32,58].

As equações (3.36), (3.37) e (3.38) descrevem a modelagem para a taxa de deformação por *creep* do revestimento do FRAPCON-3.4. Nessas equações a temperatura é absoluta em Kelvin e o fluxo de nêutrons é ϕ (n/m²).

$$\dot{\varepsilon} = 2,16 \sigma \phi_t \left[5,88 \times 10^{-8} + \frac{1,5 \times 10^{-5} R}{1 + \exp(\beta(\tau - \phi_t))} \right] \quad (3.36)$$

$$R = 0,01 * \exp[-49,77 + 0,196 T - (1,87 \times 10^{-4}) T^2] \quad (3.37)$$

$$\beta = -1,2 + (6,9 \cdot 10^{-3}) T \quad (3.38)$$

O aço inoxidável austenítico, AISI- 348, formado pela fase gama ou austenítica do ferro, contém um número reduzido de sistemas de escorregamentos. [62-66].

No campo da metalurgia, utilizam-se modelos dependentes dos teores dos elementos de liga. As investigações da metalurgia fornecem correlações para se calcular a taxa de fluência, segundo os teores dos elementos liga, nesse caso a composição em peso. Os aços austeníticos da série 300, o aço 304 e o aço 316, apresentam-se as correlações (3.39) e (3.40) [82-88];. Nesse caso, obtêm-se a máxima tensão aplicada em MPa, após 10000 horas de aplicação contínua. As correlações são fundamentadas nos teores de nitrogênio, enxofre e cromo, em peso. A abordagem se justifica, visto que os fabricantes de aço usam a faixa permitida para os teores dos elementos de liga. Notadamente estas correlações são limitadas termicamente e não são sujeitas aos efeitos da irradiação [46,57].

$$\sigma_{f,10^4h} = 173,8 + 7243[B] + 961.1[N] + 1145[S] - 7,5[Cr] \quad (3.39)$$

$$\sigma_{f,10^4h} = 90,81 + 115[Mo] + 498.5[W] \quad (3.40)$$

Nas equações (3.39) e (3.40), demonstra-se a taxa de fluência em (MPa/Horas) em função das concentrações em (% de peso) de Boro [B], de nitrogênio [N], de enxofre [S], de cromo [Cr]

3.2.10 Dureza meyer (cmhard)

O conceito de dureza envolve várias escalas, as quais atendem às propriedades específicas do material e aos propósitos de projeto em questão. A engenharia mecânica adota várias escalas de dureza, como *Brinell*, *Rockwell*, *Vickers*, *Knoop*, e *Meyer*. Para o cálculo do combustível, utiliza-se a escala de dureza *Meyer*. A dureza *Brinell* é aferida pela compressão lenta e gradual de uma esfera de aço, sobre uma superfície plana, limpa e polida, durante um intervalo de tempo. A dureza *Meyer* difere da *Brinell* por se avaliar a pressão média na superfície de contato fornecendo-se um valor mais preciso [3].

A dureza de *Brinell* pode ser calculada por uma correlação empírica de proporcionalidade ($B = 2,8Y_s$). A variável Y_s representa o limite de escoamento, ou seja, a dureza é cerca de três vezes o valor-limite do escoamento do metal.

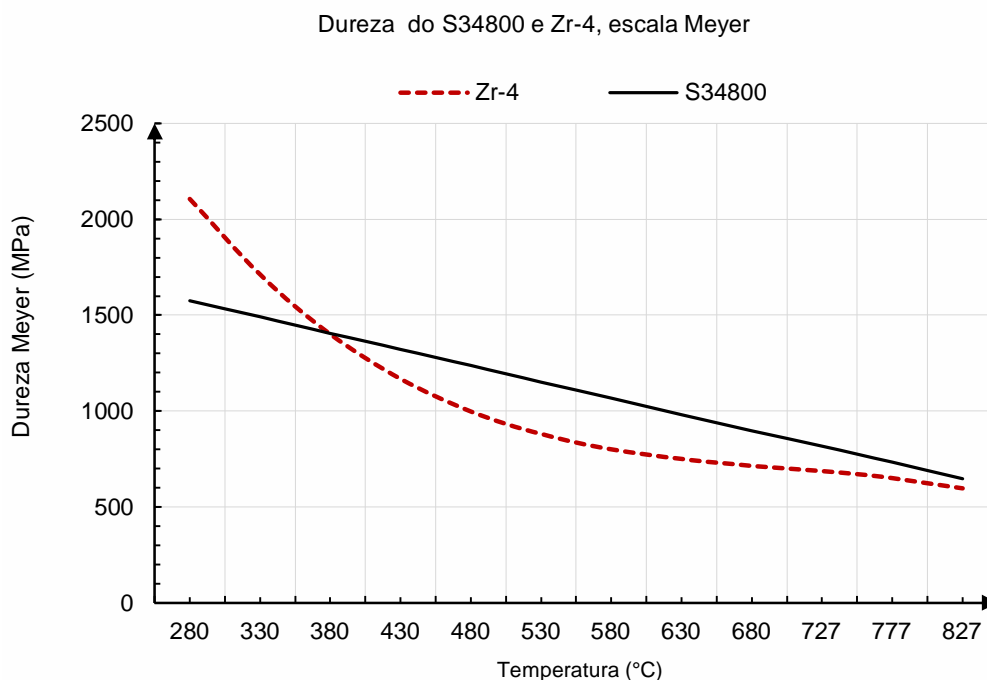


FIGURA 3.21 Dureza Meyer para aço 348 e Zircaloy-4 [1,3]

A Figura 3.21 ilustra a curva da correlação adotada para o aço 348 e para o Zircaloy-4. O aço 348 apresenta o valor de 275 MPa para o limite de escoamento. Nesse caso tem-se a dureza de *Brinell*, a qual é estimada, BH como 1045 MPa. Numa aproximação entre as escalas *Brinell* e *Meyer* a dureza na escala Meyer é o dobro daquela da escala de *Brinell*.

Um dos parâmetros necessários para o cálculo da condutividade térmica, quando ocorre o contato mecânico é a dureza de Meyer. A condutividade é uma função da dureza Meyer, como a pressão de contato entre as duas superfícies sólidas aumenta, os pontos de contato se ampliam em virtude da deformação plástica localizada. A dureza Meyer diminui rapidamente com o aumento da temperatura, a partir de 2×10^9 MPa na temperatura ambiente e se reduz para 2×10^8 MPa em 504 °C, em que um valor aceito como mínimo para a dureza Meyer é de $1,0 \times 10^5$ n/(m²) para revestimento de Zircaloy-4. Na versão compilada IPEN-CNEN/SSP, a equação (3.41) mostra a correlação para dureza Meyer para o aço 348. A equação (3.42) mostra a dureza para o Zircaloy-4.

$$MH_{\text{AlSi-348}} = 3,448 \times 10^{-3} * 2010 * (290 - 0,245 * (T_{[K]} - 25)) \quad (3.41)$$

$$CMHARD_{Zr} = 6,48 * 10^3 - 23,6 * T_{[K]} + 3,29 * 10^{-2} * T_{[K]}^2 - 1,568 * 10^{-5} * T_{[K]}^3 \quad (3.42)$$

A Tabela 3.21 apresenta os valores da dureza *Meyer* em função da temperatura.

TABELA 3.21 - Dureza *Meyer* para o aço 348 e *Zircaloy-4*

Temperatura (°C)	Zr-4(MPa)	348 (MPa)
7	2105,82	1576,60
57	1710,27	1491,70
107	1401,56	1406,81
157	1167,94	1321,91
207	997,65	1237,01
257	878,93	1152,11
307	800,01	1067,21

A dureza proposta por *Meyer* é utilizada para descrever o processo de contato, entre as superfícies deformáveis. Na correlação de transferência de calor no caso do fechamento da folga, entre o combustível e o revestimento a dureza torna-se importante. Os materiais mais macios podem ampliar a área de contato. Quando ocorre o fechamento da folga entre o *Zircaloy* e dióxido de urânio, forma-se uma interação mais perfeita com o dióxido de urânio do que com o aço 348. Portanto, o contato com menor dureza proporciona maior energia térmica transferida.

A dureza do revestimento foi inicialmente medida nesta escala como uma função da temperatura de 24,85 °C a 603,85 °C. Na rotina CMHARD, a dureza sofre uma redução com a temperatura. Essa propriedade é definida em um intervalo reduzido abaixo do ponto de troca de fase cristalina do *Zircaloy*, na temperatura de 865 °C. Na equação (3.41), tem-se a dureza *Meyer* descrita para revestimento por ligas à base de zircônio. A dureza do aço 348 é superior à do *Zircaloy* na faixa de temperatura de operação do reator.

3.2.5 Razão de Poisson (*celmdr*)

A razão de Poisson do aço é cerca de 0,37, e do *Zircaloy* é 0,27. As versões dos códigos de desempenho apresentam pequenas discrepâncias na forma de calcular a razão de Poisson.

A rotina proposta para cálculo do coeficiente foi suprimida na versão atual do código FRAPCON-3.4, mas é calculada internamente no módulo FRACAS. Entretanto, na versão FRAPCON-2, proposta em 1981, a rotina encarregada do cálculo era a rotina CELMDR, descrita na biblioteca de propriedades MATPRO-V9, de 1976. O problema da localização no código fonte não impede a adequação que se faz necessária.

A rotina CELMDR calcula o módulo de elasticidade e o coeficiente de *Poisson* em função da temperatura, desta forma negligenciando a irradiação [52,54]. Na versão FRAPCON-3.3, define-se a rotina EMCPIR, codificada por *Coffman* (1974), que suportava a razão de *Poisson* do *Zircaloy* em função da temperatura [3].

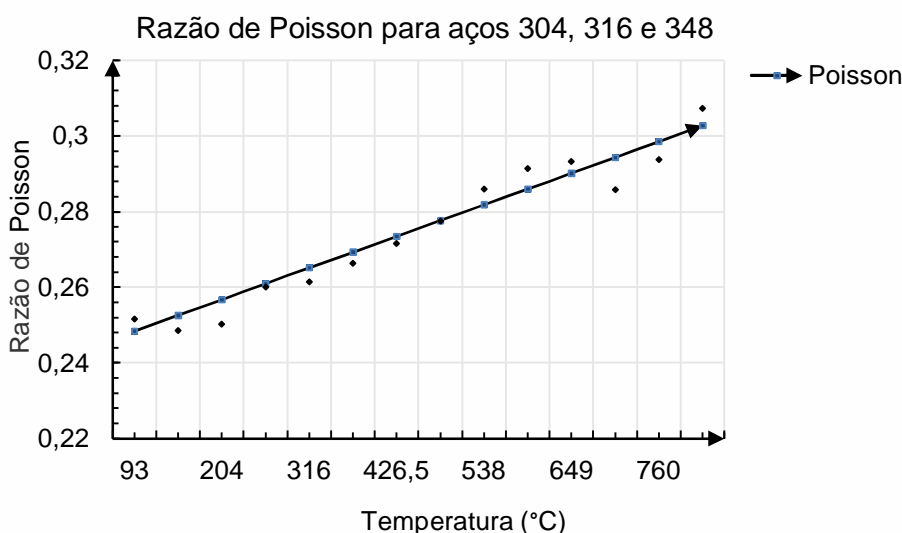


FIGURA 3.22 - Coeficiente de Poisson do aço austenítico 348 [1,3,27,28]

Na versão compilada IPEN-CNEN/SSP, não se define uma rotina específica para o cálculo do coeficiente de *Poisson*; no caso do aço 348 calcula-se por meio de outras correlações generalistas. Utilizam-se as leis da plasticidade na região elástica, desta forma obtêm-se as equações (3.43), (3.44) e (3.45). Na Figura 3.22 mostra-se a razão de *Poisson* em função da temperatura para o aço austenítico 348.

Nas equações o coeficiente de *Poisson* é calculado como uma função da temperatura em escala Celsius ($T^{\circ}C$); verifica-se que os valores são próximos.

O coeficiente de Poisson para os aços da série 300, em temperatura de 20 °C é cerca de 0,27; já o Zircaloy, nas mesmas condições, é avaliado como 0,37.

$$\mu_{(AISI-304)} = 0,283 + 3,78 \times 10^{-5} T \quad (3.43)$$

$$\mu_{(AISI-316)} = 0,259 + 9,20 \times 10^{-5} T \quad (3.44)$$

$$\mu_{(AISI-348)} = 0,2414 + 7,511 \times 10^{-5} T \quad (3.45)$$

3.3 Anisotropia (caniso)

Sob uma perspectiva macroscópica, a anisotropia plástica se destaca como a propriedade do material capaz de proporcionar segundo um sistema de eixos ortogonais, comportamentos diferenciados para cada direção. A razão de deformação plástica ou coeficiente de *Lankford*, é utilizada para avaliar anisotropia [3,93].

A biblioteca de propriedades MATPRO disponibiliza a rotina CANISO atuando até o limite de 865 °C, ou seja, na temperatura da troca de fase cristalina. A rotina é responsável pelo cálculo dos coeficientes de anisotropia, visando à conversão de dados de tensão e deformação verdadeiros, segundo a metodologia de *Hill*, proposta em 1950 [3,10]. A equação (3.46) apresenta a tensão total e os coeficientes de anisotropia, nos quais as variáveis A1S, A2S e A3S são os coeficientes de anisotropia calculados pela rotina CANISO [3,10].

$$\sigma = [A1S(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + A2S(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + A3S(\sigma_1 - \sigma_2)^2] \quad (3.46)$$

$$A1S = (1,5f_r - 0,5)g(T) + 0,5 \quad (3.47)$$

$$A2S = (1,5f_z - 0,5)g(T) + 0,5 \quad (3.48)$$

$$A3S = (1,5f_\theta - 0,5)g(T) + 0,5 \quad (3.49)$$

Nas equações (3.47), (3.48) e (3.49) a textura é representada por (f_z, f_r, f_θ) , sendo definida para cada um dos três eixos.

A função $g(T)$ é uma função que adquire dois valores, zero e um e a tensão é representada pela letra σ seguindo os eixos ortogonais.

A rotina CANISO foi codificada na biblioteca MATPRO por *Hargman* em outubro de 1978, e atualizada em 1979 [3]. As deformações não são idênticas em cada eixo ortogonal. Os materiais, embora apresentando características isotrópicas, após o regime elástico, uma vez na região de plasticidade, tornam-se anisotrópicos, ou seja, adquirem anisotropia por deformação plástica [59].

O grau de anisotropia é estreitamente relacionado à estrutura cristalina da liga metálica. Em geral, a anisotropia desenvolve-se mais fortemente em metais com estrutura cristalina do tipo hexagonal compacto (HCP), como o zircônio. Em metais com estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), como a ferrita, ou cúbica de face centrada (CFC), como a austenita, a anisotropia é reduzida [93].

No código FRAPCON, a rotina CANISO não é chamada diretamente, mas é chamada na rotina BALON2 do FRAPTRAN. A rotina BALON2 chama outras sub-rotinas, tais como: CANEAL; CANISO e CCP. A rotina calcula os coeficientes de anisotropia para os três eixos dimensionais, com os coeficientes para deformação e tensão [68]. A rotina CKMN fornece os parâmetros para a equação constitutiva do revestimento; verificam-se os coeficientes para curva de tensão e deformação [8,33,37].

A anisotropia decorre da orientação preferencial dos planos cristalinos do material. Quando esses planos são submetidos a um ciclo de deformações por carregamentos mecânicos, desenvolvem-se o fenômeno do alinhamento das inclusões, a segregação de lacunas e alinhamento de uma segunda fase precipitada. Por definição, o coeficiente de anisotropia de *Lankford* é a razão entre a deformação verdadeira na largura (ϵ_w) dividido pela espessura (ϵ_t) de um corpo de prova sob tração com determinada deformação longitudinal pré-definida.

TABELA 3.22 - Razão de deformação plástica, anisotropia do aço

Graus R (Lankford)	Tipo de Isotropia
$R_0=R_{45}=R_{90}=1$	Isotropia total
$R_0=R_{45}=R_{90}\neq 1$	Isotropia planar e anisotropia normal pura
$R_0=R_{45}=R_{90}\neq 1$	Anisotropia planar e normal

A equação (3.50) apresenta o coeficiente de anisotropia plástica (R). A Tabela 3.22 mostra o coeficiente de anisotropia de *Lankford* e sua interpretação; em geral, os metais apresentam anisotropia planar e normal. A Tabela 3.23 apresenta os coeficientes de anisotropia dos aços e do *Zircaloy* [3].

TABELA 3.23 - Coeficiente de anisotropia normal, R

Aço	R ₍₀₎	R ₍₄₅₎	R ₍₉₀₎	R
310 - Austenítico	0,80	0,85	0,75	0,81
304 - Austenítico	0,90	1,00	0,90	1,00
430 - Ferríticos	1,00	1,06	1,09	1,10
Baixo Carbono	2,10	1,50	2,40	1,90
Zircaloy 2/4 (T < 865 °C)	0,66	0,06	0,28	0,39
Zircaloy 2/4 (T ≥ 865 °C)	0,50	0,50	0,50	0,50

O coeficiente de anisotropia plástica (r) é definido pela equação (3.50); a anisotropia normal média é definida pela equação (3.51), e o coeficiente de anisotropia planar (Δr) é apresentado pela equação (3.52).

$$r = \frac{\epsilon_w}{\epsilon_l} = \frac{\epsilon_w}{-(\epsilon_w + \epsilon_l)} \quad (3.50)$$

$$\bar{r} = (r_0 + 2r_{45} + r_{90})/4 \quad (3.51)$$

$$\Delta r = (r_0 - 2r_{45} + r_{90})/2 \quad (3.52)$$

Na versão compilada para o aço IPEN-CNEN/SSP, em razão da sua estrutura cúbica de face centrada, esse elemento, o aço 348, foi considerado isotrópico, sendo que os valores dos coeficientes de anisotropia A1S, A2S e A3S foram considerados iguais a 0,5.

No caso dos aços austeníticos, os coeficientes de anisotropia indicam um comportamento quase isotrópico, em virtude não ocorre a alteração de fase cristalina. Os coeficientes de anisotropia estão relacionados com ângulos. Portanto, em R₀, R₄₅ e R₉₀, quando são idênticos à unidade, tem-se isotropia total. Quando R₀=R₄₅=R₉₀, mas diferentes de 1, tem-se isotropia planar e anisotropia normal pura. Quando os três coeficientes são distintos, tem-se anisotropia planar e normal.

3.4 Entalpia do revestimento (centhl)

Na biblioteca MATPRO, a entalpia é considerada como propriedade puramente térmica. Através de análise matemática derivada da entalpia pela temperatura, é fornecido o calor específico à pressão constante $C_p=(\delta h/\delta T)_p$ [3,10].

A Tabela 3.24 apresenta a propriedade termodinâmica do calor específico à pressão constante para os aços do tipo 304, 316 e 348 [27,28].

TABELA 3.24 - Calor específico dos aços da série 300 não irradiados

Temperaturas	Calor específico(J/kg-K)		
	Aço - 304	Aço - 316	Aço - 348
T (°C)			
30 (°C)	407,60	502,60	492,20
150 (°C)	435,00	518,70	515,90
270 (°C)	459,70	534,80	536,90
390 (°C)	481,60	550,90	555,45

Verifica-se que o calor específico aceito para o aço tipo 348, nas temperaturas de 20 °C a 1500 °C, é uma função crescente, modelado de forma independente dos efeitos da irradiação [3,10].

A Figura 3.23 apresenta a entalpia dos aços austeníticos 304 utilizados em reatores do passado, como *Elk River*, *Saxton* e o reator de teste ETR [1,2] O aço 348 foi utilizado no reator *Indian-Point-1*.

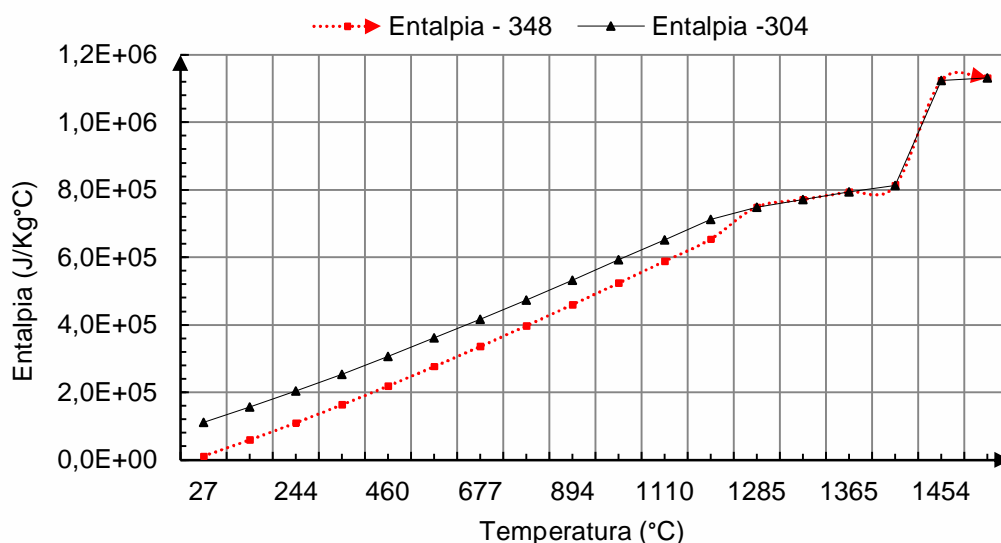


FIGURA 3.23 Entalpia dos aços austeníticos 304 e 348 [3]

A biblioteca de propriedades MATPRO adota um conjunto de correlações, como a entalpia do revestimento, uma correlação puramente térmica. Nessas correlações, o efeito do fluxo de nêutrons é negligenciado [3,10]. As equações (3.53), (3.54), (3.55) e (3.56) apresentam a entalpia do aço 304 [3,10]. As equações (3.57), (3.58), (3.59) e (3.60) são para o aço 348, pela transformação do calor específico.

$$(26,85 \text{ } ^\circ\text{C} < T < 1284,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{304} = -3,187 \times 10^{-5} T^3 + 0,12298 T^2 + 400,2 T + 1,04675 \quad (3.53)$$

$$(1284,85^\circ\text{C} \leq T < 1397,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{304} = 3,181897 \times 10^4 + 558,228 T \quad (3.54)$$

$$(1397,85^\circ\text{C} \leq T \leq 1453,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{304} = -6,957431 \times 10^6 + 5558 T \quad (3.55)$$

$$(T > 1453,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{304} = 3,11819 \times 10^5 + 558,228 T \quad (3.56)$$

$$hs_{348} = 2 \times 10^{-5} + 0,13105 * T^2 + 421,4 T \quad (3.57)$$

$$(1284,85^\circ\text{C} \leq T < 1397,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{348} = 5,58228 \times 10^2 * T + 3,181898 \times 10^4 \quad (3.58)$$

$$(1397,85^\circ\text{C} \leq T < 1453,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{348} = 3,11819 * 10^5 + 558,228 * T \quad (3.59)$$

$$(T > 1453,85^\circ\text{C})$$

$$hs_{348} = 3,11819 * 10^5 + 558,228 * T \quad (3.60)$$

O calor específico do aço foi calculado pela metodologia de *Koop-Newman*, em que o cálculo do calor específico à pressão constante é obtido pelos elementos de liga com maior participação de ferro, cromo e níquel. Uma vez que a entalpia é integral do calor específico, as curvas de entalpia para os aços estabilizados devem ser semelhantes.

A rotina CENTHL retorna à mudança de entalpia para temperaturas abaixo de 1398 °C, quando o aço inox inicia a mudança de fase, as integrais das correlações, referentes ao calor específico em função da temperatura, consistem na base da modelagem da entalpia.

O fator é responsável pelo adicional de 270 kJ/(kg-K). A incerteza da correlação é ($C_{\text{espc}} \pm 10\%$) do valor esperado. Verifica-se que a propriedade em questão é semelhante aos aços da série 300. O estado sólido para os aços da série 300, limita-se a temperaturas abaixo de 1284,85 °C.

3.5 Efeitos do céσιο e iodo (cesiod)

A rotina CESIOD é definida para avaliar a quantidade de isótopos de céσιο e iodo produzidos na fissão. A rotina CESIOD calcula os teores de sete isótopos de céσιο e quatro isótopos de iodo. Um dos indícios de falha de varetas, é o súbito aumento da atividade acelerada pela presença de isótopos ativos de iodo e céσιο. A dispersão do produto de fissão no refrigerante ocorre através de microfuros evoluindo da interface interna para a interface externa do revestimento [3].

O indicativo de picos do isótopo de iodo ^{131}I , demonstra a ocorrência de falha caso a atividade seja superior a 50 MBq/(m³); e, se inferior a 4GBq/(m³), aponta a dispersão de isótopos ativos do iodo no refrigerante de isótopos ativos de iodo [11]. No caso do revestimento de aço, geram-se os mesmos isótopos na fissão, não havendo alteração; porém, não se tem dados sobre o efeito no aço austenítico.

Os produtos gasosos xenônio e criptônio são o resultado da fissão de isótopos de urânio e de plutônio. Considerados insolúveis no dióxido de urânio, produtos voláteis, os isótopos de céσιο e iodo podem, pela lei da difusão de *Fick*, penetrar na matriz, alojando-se nos contornos dos grãos.

O vapor de iodo potencializa-se na formação de trincas no revestimento, e fragiliza a liga à base de zircônio [11]. Os produtos gasosos na face interna formam bolhas na interface entre a pastilha e o revestimento. A concentração de iodo depositado na superfície do revestimento torna possível o ataque da corrosão sob tensão promovida pelas características corrosivas do iodo. Deste modo constata-se a formação de micro trincas ou rachaduras no revestimento de *Zircaloy*.

Na gama de produtos de fissão prejudiciais ao revestimento em ordem de importância, tem-se os seguintes produtos: iodo, céσιο e telúrio; investigam-se os efeitos do telúrio em ciclos de irradiações acima de 30 GWd/MTU para ligas à base de zircônio. Na versão do código compilada IPEN-CNEN/SSP, não ocorre alteração nessas rotinas, uma vez que os efeitos desses produtos de fissão não são profundamente conhecidos no que tange aos aços austeníticos.

Verifica-se que nos reatores rápidos os mesmos isótopos de iodo, céσιο e telúrio são produtos de fissão e não se caracterizam como fatores de risco para revestimentos de aço AISI-316 [30].

3.6 Formação de crud

A camada de óxidos formada no primário denomina-se *Chalk River Unidentified Deposits* (CRUD). A oxidação ainda é uma das maiores responsáveis por falhas em varetas. A camada *crud* não é tratada diretamente pelos códigos de desempenho [44]. No entanto, as correlações empíricas definidas na biblioteca MATPRO foram produzidas por investigações, nas quais os dados experimentais foram obtidos com a camada *crud* presente, resultando em correlações que utilizaram análise numérica e aproximações numéricas de dados experimentais [47,48]. No caso do aço, a mesma camada, ou muito semelhante será formada. As camadas dos produtos de oxidação são aderentes a superfície externa do revestimento. A composição química da camada depositada de óxidos identifica-se como $Ni_xFe_{3-x}O_4$ a formação natural dos óxidos de ferrita e níquel ainda não são claramente identificados. A condutividade térmica da camada *crud* avalia-se em torno de 0,87 W/(m-K), atribuída pela biblioteca MATPRO [3,10].

À camada *crud* acarreta uma anomalia na deformação do fluxo térmico e transferindo para distribuição de potência linear ao longo da vareta, denominada *Axial Offset Anomaly* (AOA) podem causar: (i) uma troca inesperada de distribuição de potência do núcleo; (ii) uma anormalidade axial gerada pela concentração de boro que reage com os óxidos depositados; (iii) o ataque de corrosão localizada, gerando furos micrométricos; (iv) o acúmulo de cobalto ativo, a origem do isótopo ^{60}Co é resultado de reações produzidas por irradiação, com o risco de aumento da taxa de exposição ocupacional; (v) desigualdade no aquecimento do corpo da vareta, por causa da baixa condutividade térmica apresentada pela camada de óxido; (vi) a deformação do fluxo térmico produz uma oxidação irregular na vareta [8,33].

Os reatores atuais apresentam bocais e outros elementos estruturais formados de aço inoxidável, como o revestimento de varetas absorvedoras, os quais estão sujeitos à deposição de *crud* que se estende do primário a partes do secundário.

3.7 Critério da densidade de energia (CSED)

O primeiro critério de falha utilizado em varetas, em transientes de reatividade, foi o critério denominado de limite de ductilidade, na realidade um critério de falha baseado na deformação. O problema é que a deformação axial de 1% e a circunferencial de 2,5% não são critérios claros e objetivos para o processo de falha, conforme estudado pela mecânica da fratura [63].

O EPRI adota no código de desempenho FALCON o critério da densidade de energia de deformação. Nas correlações relativas a critérios de falhas *Critical Strain Density Energy* (CSED) para revestimentos, com *Zircaloy-2* e *Zircaloy-4* a baixas temperaturas, utilizando-se os dados de propriedades mecânicas de ensaio de materiais irradiados, a unidade utilizada pelo CSED é $M/(J \cdot m^3)$.

Aplica-se como critério da mecânica da fratura a modelagem de densidade de energia de tensão crítica, o código FRAPTRAN utiliza para o *Zircaloy* um grupo de correlações dependentes da concentração de hidrogênio. A modelagem CSED é utilizada para às ligas à base de zircônio. Essas correlações apresentam-se dependentes da concentração total de hidretos acumulados no revestimento reduzindo a ductilidade e acarretando a fragilização. No revestimento de aço, não se verifica-se a deposição de hidreto da forma como se verifica nas ligas de zircônio.

Dessa forma a modelagem do critério de energia foi adicionada ao FRAPTRAN, por ser considerado eficiente, apesar de que no FRAPTRAN continua sendo utilizado o critério do limite de ductilidade. Deste modo, este critério, com as correlações já codificadas, em função da quantidade de hidretos acumulados, não se qualifica para o aço austenítico 348. Nessa situação, a variável $H(ppm)$ descreve a quantidade de hidretos em ppm.

$$CSED_{zr-2} = 35,89 \exp(-0,0114H) + 2,09 \quad (3.61)$$

$$CSED_{zr-4} = 12,33 \exp(-0,001651H) + 2,38 \quad (3.62)$$

3.8 Modelo de integridade do revestimento

O modelo de integridade do revestimento é fundamentado em correlações propostas inicialmente pelo PNNL embasadas nas propriedades plásticas do material do revestimento. A importância da ductilidade caracteriza-se pela presença de grandes deformações antes da ruptura. Nesse item o aço é superior às ligas de zircônio. A curva tensão-deformação verdadeira é chamada frequentemente de curva de escoamento, porque fornece a tensão necessária para causar o escoamento plástico do metal a qualquer nível de deformação.

As equações matemáticas relativas à curva tensão-deformação verdadeira utilizam a modelagem de *Hollomon*, proposta em 1945, conhecida como a (lei da potência) [3,10]. A equação é utilizada para cálculo da tensão de deformação verdadeira e não de engenharia; o valor de k , constante plástica de resistência, é a deformação quando a tensão verdadeira vale a unidade. As equações derivadas parcialmente no tempo fornecem os coeficientes de sensitização.

$$\sigma = k\varepsilon^n \quad (3.63)$$

$$\sigma = K'(\dot{\varepsilon})^m \quad (3.64)$$

$$\sigma = K''(\dot{\varepsilon})^n (\varepsilon)^m \quad (3.65)$$

As equações (3.63), (3.64) e (3.65) apresentam, a curva constitutiva, ou comportamento da curva tensão – deformação modelada pela rotina CKMN [3,10]. Em linhas gerais, os coeficientes se alteram com a temperatura e a irradiação. O endurecimento e a fragilização alteram os coeficientes dinamicamente [53,54]. Na biblioteca de propriedades MATPRO define-se a função destinada ao cálculo dos coeficientes da correlação da curva tensão por deformação.

A rotina CKMN foi codificada por *Hargman*, em 1978. Essa rotina foi adaptada ao aço, uma vez que abrange somente as ligas à base de zircônio e é utilizada pelo FRAPTRAN. Supõe-se a modelagem de *Hollomon* descrita na equação (3.63) para os aços austeníticos da série 300 de baixo carbono ($C \leq 0,08\%$) [50].

Os valores empíricos denominam-se (k - coeficiente de resistência) do material que se aproxima da deformação, o limite de tração ou *Ultimate Tensile Strength* (UTS), $\epsilon(\text{UTS})$ [71], e o valor de $k = 600$ MPa. Na equação (3.63), o valor de n ou (expoente de encruamento), para o aço oscila de (0,10 a 0,48). Para os aços austeníticos $n = 0,25$. O coeficiente de encruamento para a ferrita é $n = 0,25$ e para a austenita 0,5, a 20 °C [3,10,69].

A Tabela 3.25 mostra os coeficientes para uma série de ligas metálicas. Nas aplicações nucleares utiliza-se aço a liga de alumínio 2024 (99% Al; 0,20% Cu) assemelha-se ao alumínio 1100 (94,7% Al; 4,35% Cu), utilizado no combustível tipo placa *Material Test Reactor* (MTR); o bronze fora inserido por ser uma liga de cobre e zinco, apesar de apresentar coeficientes semelhantes aos do aço recozido, entretanto difere nas propriedades nucleares.

TABELA 3.25 - Valores típicos para equação de Hollomon

Material	n	k(MPa)	YS(MPa)	UTS(MPa)	E(GPa)
Aço (recozido)	0,21	600	290	560	193
AISI - 304 (recozido)	0,44	1400	215	505	190
Cobre (recozido)	0,44	530	11	210	110
Bronze (recozido)	0,21	585	376	528	106
2024 liga de Alumínio	0,17	780	310	448	73

$$\sigma = \frac{r_i P_i - r_o P_o}{t} \quad (3.66)$$

$$\sigma = \frac{\pi r_i^2 P_i - \pi r_o^2 P_o}{\pi(r_o^2 - r_i^2)} \quad (3.67)$$

Nas liga de cobre, o coeficiente n equivale a ($n=0,5$). A equação (3.63), em que se tem o expoente, m apresenta a taxa sensitiva; no caso dos aços oscila de (0,007 a 0,015), e é calculado pela derivada da deformação. Essa equação só é aplicável entre o limite do escoamento elástico e a tensão máxima de resistência, ou seja, no início do escoamento plástico. Nas equação (3.66), apresenta-se a tensão aplicada na parede do revestimento, e na (3.67), desenvolve-se a geometria cilíndrica do revestimento.

A tensão desenvolvida na parede circular é proporcional aos raios internos e externos e à pressão interna e externa aplicada. O modelo da elongação uniforme é empírico, fundamentado em pesquisas produzidas pelo PNNL.

O modelo SED é calculado em função da temperatura e da quantidade de hidrogênio acumulada no revestimento. O EPRI utiliza como critério de integridade do revestimento, durante um acidente postulado de reatividade a modelagem CSED, sendo um critério não conservativo; é utilizado para combustíveis com ciclo estendido de queima, e recomendado para baixas temperaturas na inserção do pulso de energia.

$$\bar{U}_0 = \int_0^{\varepsilon} \varepsilon d\sigma \quad (3.68)$$

Na equação (3.68), verifica-se que o cálculo da integral definida da curva constitutiva utiliza os pontos da curva tensão deformação dinamicamente. A curva depende da saída expressa na forma dos coeficientes das equações constitutivas calculadas pela rotina CKMN; dependendo da fluência de nêutrons, a curva constitutiva do aço, será utilizada para cálculo da densidade de energia. Utilizando-se os conceitos da mecânica da fratura aplica-se o critério da máxima deformação ou da tensão máxima, ou, ainda, a energia crítica armazenada na deformação [63]

O critério da máxima energia elástica armazenada pode ser dividido em dois tipos: a dilatação e a distorção. A dilatação volumétrica é associada a distorção a deformação sofrida. A energia é dada por comprimento (j/m).

$$u_T = \frac{1}{2E} [\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_3^2 - 2\nu(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1)] \quad (3.69)$$

$$u_v = \frac{1-2\nu}{6E} (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)^2 \quad (3.70)$$

$$u_d = \frac{1+\nu}{3E} \sigma_{YS}^2 \quad (3.71)$$

Nos programas investigativos internacionais destinados ao estado transiente em combustíveis nucleares. Utiliza-se reatores de pulso como NSRR nos testes de transientes de reatividade; realizado na cápsula de teste, a temperatura é a ambiente.

Nessa situação, inseriu-se um modelo de falha fundamentado na mecânica da fratura levando em consideração a energia da deformação. O modelo de integridade CSED mostra-se bastante preciso em baixas temperaturas.

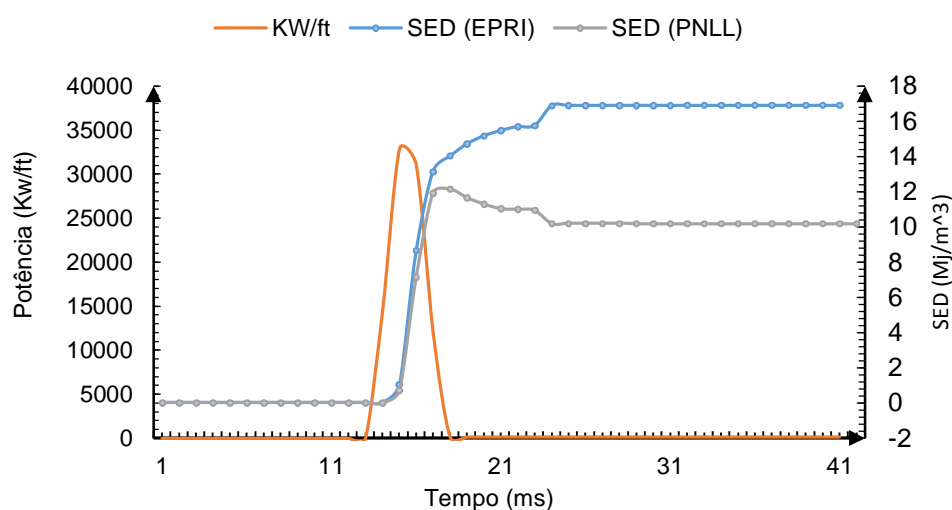


FIGURA 3.24 – Energia armazenada modelo SED EPRI e PNLL

A teoria da mecânica da fratura que envolve falha do revestimento adotada é critério da densidade de energia armazenada SED, direcionada para o critério limite da densidade crítica da energia armazenada CSED [70]. Pela análise quantitativa do critério adota-se o limite de entalpia de 170 Cal/g em ciclos de irradiação inferiores a 36 GWd/MTU, para queima superior, adota-se uma função exponencial decrescente. O modelo de análise de escala é utilizado para limitar o valor máximo da entalpia em combustíveis pré-irradiados em reatores PWR. A Figura 3.24 apresenta o critério CSED.

3.8.1 Correlação proposta por Vitanza

Um dos objetivos dos projetos experimentais relativos a transientes de reatividade é definir uma correlação que expresse o limite de falha de combustível, comparando-se com dados experimentais relevantes para varetas combustíveis para reatores do tipo BWR e PWR.

Uma das correlações iniciais decorre da investigação dos projetos *Halden*, *CABRI* e *NSRR* [72,73,74]. Portanto, os resultados são provenientes de investigações e análises de dados experimentais. Em ciclos de queima iniciais no estado permanente, tais resultados são, em geral, superiores a 45 GWd/MTU. Nos ciclos de irradiação acima de 45 GWd/MTU observa-se a formação de uma fina borda de hidretos depositados na parte exterior da superfície do revestimento; o limite empírico para o acúmulo de hidretos é de 400 ppm para o *Zircaloy* [73-76]. Os precipitados em conjunto com óxido servem como pontos iniciais para formação de trincas; o revestimento se deforma sob tensão biaxial, e, após ocorre uma progressão da trinca.

Em 2007, *Carlo Vitanza* propôs uma correlação probabilística que pode ser aplicada em ambas as condições, partida a frio ou condição à quente, com a inserção rápida de reatividade considera-se para que a ductilidade seja menor na condição de partida a frio, aplicando-se valores diferentes para entalpia inicial. A correlação também pode ser usada em casos de transientes de energia diferentes de zero, desde que um termo representando a potência de partida seja incorporado [76]. Os limites propostos por *Vitanza* para prever as falhas são fáceis de usar, e facilitam também a reprodução dos resultados obtidos.

O tratamento de análise de dados se verifica por meio de uma metodologia empírica embasada em separação estatística e análise de dados, em uma base casos de varetas falhadas nos reatores de teste. As varetas, quando submetidas a transientes de entalpia por curto espaço de tempo, são fortemente dependentes das condições iniciais, ou seja, degradações por oxidação, acúmulo de hidrogênio e danos microestruturais por irradiação resultando em falhas [76].

A finalidade precípua é predizer potenciais falhas produzidas pela aplicação de pulsos de entalpia com o parâmetro *Full Width at Half Maximum* (FWHM) da ordem de milésimos de segundos [76]. As variáveis necessárias são: queima do combustível irradiado; largura de pulso FWHM; e a espessura da camada de óxido formada no revestimento [73]. Na correlação de *Vitanza*, as variáveis são: diâmetro do revestimento; espessura da camada de oxidação; peso do óxido formado; e tempo de duração do pulso de entalpia ou largura de pulso. A equação (3.72) é resultado do teste (*CABRI/REP-Na*), no qual se usa sódio como refrigerante.

Admite-se que o valor máximo de HF não deve ultrapassar 200 cal/g, a largura de pulso máxima permitida é de 75 ms. A equação (3.72) define a entalpia máxima para o refrigerante de sódio, obtida em testes realizados de 1993 a 1998.

Teste CABRI

$$H_{F[\text{cal/g}]} = \left[200 \frac{25 + 10D_{[\%]}}{Bu_{[\text{MWd/KgU}]} + 0.3\Delta_{[\text{ms}]}} \right] \left(1 - \frac{0.85Ox_{[\mu\text{m}]}}{W_{[\mu\text{m}]}} \right)^2 \quad (3.72)$$

Teste CABRI correção de temperatura inicial

$$\Delta H_{f[\text{cal/g}]} = \left[200 \frac{25}{Bu_{[\text{MWd/KgU}]} + 0.3\Delta_{[\text{ms}]}} \right] \left(1 - \frac{0.85Ox_{[\mu\text{m}]}}{W_{[\mu\text{m}]}} \right) - c_p (280 - T_{i[\text{K}]}) \quad (3.73)$$

Reatores VVER

$$H_{f[\text{cal/g}]} = \min \left\{ \left[\frac{7000}{Bu_{[\text{MWd/KgU}]} + 1} + 22.5 \right] \left(1 - \frac{0.85Ox_{[\mu\text{m}]}}{W_{[\mu\text{m}]}} \right)^2, 200 \right\} \quad (3.74)$$

A equação (3.73), mostra a correlação quando a partida do transiente apresenta uma temperatura inicial, ou seja, partida a quente. A equação (3.74), apresenta a correlação com o mesmo enfoque para o reator VVER. Nessas correlações, o parâmetro (H_F) é o limite de falha decorrente do pulso de entalpia aplicado (cal/g); (Bu) representa a queima em GWd/MTU; (D) é o limite de deformação circular, (%), geralmente 1%; ($\Delta\tau$) a largura de pulso em ms; (Ox) a espessura da camada de óxido formada, (μm); e (W) espessura inicial do revestimento, como fabricado, (μm). A espessura da camada de óxido é desenvolvida na superfície externa da vareta combustível [76].

3.8.2 Correlação proposta pelo KAERI

A correlação proposta na República da Coreia, pelo Instituto de Pesquisa de Energia Atômica, localizado em *Daejeon, Korea Atomic Energy Research Institute* (KAERI), é uma regressão estatística para vários testes de transientes.

A correlação produz uma correlação simples [71-76]. Esta pode ser usada para o cálculo do pico da entalpia aplicado para PWR, BWR e VVER. A correlação é obtida de testes experimentais oriundos dos programas PBF, SPERT, CABRI, BIGR e NSRR [76].

Na equação (3.75) correlaciona-se a entalpia em função do gradiente de temperatura; da irradiação e da camada de óxido externa. A variável (HF) é o limite de entalpia em cal/g; (Bu) é a queima em GWd/MTU; ($\Delta\tau$) é a largura de pulso, (ms); a espessura da camada de óxido é (Ox). No caso dos reatores VVER, tem-se uma correlação dedicada dada pela equação (3.76).

$$H_f = 156.6 - 0.774(Ox) - 1.076Bu + 29.41\log(\Delta\tau) \quad (3.75)$$

Para reatores VVER

$$H_f = 211.7 - 0.774(Ox) - 1.076Bu \quad (3.76)$$

Os reatores do tipo TRIGA, nos quais desenvolvem-se os testes de transientes, utilizam o método de *Nordheim-Fucks*, esse método é utilizado nos reatores de pulso [76] como um modelo aproximado e iterativo de solução do problema da moderação de nêutrons, no qual: $\Delta\rho$ é a inserção de reatividade; β é a fração de nêutrons atrasados, sendo que esse valor depende do enriquecimento do urânio com isótopo ^{235}U ; Λ é o tempo de vida efetiva dos nêutrons, 20 μs ; e (τ) é a largura de pulso [76].

$$\tau = \frac{4\cosh^{-1}(\sqrt{2})\Lambda}{\Delta\rho - \beta} = \frac{3.5255\Lambda}{\Delta\rho - \beta} \quad (3.77)$$

$$P(t) = P_{\max} \operatorname{sech}^2\left(\frac{(\Delta\rho - \beta)(t - t_{\max})}{2\Lambda}\right) \quad (3.78)$$

As equações (3.77) e (3.78) mostram a potência em função do tempo produzido pelo modelo adotado. No caso do revestimento de aço os cálculos de inserção de reatividade são os mesmos, uma vez que se equaciona o comportamento do combustível.

3.8.3 Probabilidade de riscos decorrentes de transientes

Existem riscos referentes à dispersão atmosférica, à exposição à radiação e à contaminação do meio ambiente por cobalto, iodo e césio. Na escala de riscos, a *International Nuclear and Radiological Event Scale* (INES), ambos os casos de *Fukushima Daiichi* [4,11], protagonizados em um reator BWR da GE (2010) e em *Three Mile Island* um reator PWR da *Babcock & Wilcox* (1979), são classificados, inicialmente como nível 5. A agência de segurança nuclear do Japão JNES qualifica em escala provisória como nível 7, pela quantidade de produtos radioativos liberados no ambiente, pelas Unidades 1, 2 e 3 envolvidas. O reator localizado na Ucrânia, com revestimento de *Zircaloy* refrigerado a água e moderado a grafite *Reaktor Bolshoy Moshchnosti Kanalniy* (RBMK), o reator 4 de *Chernobyl*, em 26 de abril de 1986, é classificado como nível 7. Nessa escala a severidade do acidente TMI é um centésimo da severidade em relação ao de *Chernobyl*. Nas estatísticas, somente reatores PWR, BWR e RBMK com combustível de dióxido de urânio e revestidos por ligas à base de zircônio; geraram acidentes nucleares com graus significativos de severidade. Os reatores RBMK foram remodelados, após o desastre de Chernobyl, atualmente operam 11 unidades na Rússia.

Investigações relativas a análise da confiabilidade destinada a plantas nucleares foram iniciadas na década de 1950. O relatório WASH-740, (1955) avaliou em caso de um acidente nuclear em um reator de 200 MWe, teria um custo US\$ 7 bilhões. Um estudo dos riscos devido à exposição à radiação decorrente da operação de plantas nucleares, inicia-se em 1955, na conferência de Genebra. Em 1959, a *Atomic Energy Commission* (AEC) produziu o documento TID-14844. O relatório WASH-740 foi proposto pela comissão regulatória em 1960, chamado de relatório Brookhaven. Em 1972, no programa *Reactor Safety Study* (RSS), utilizou árvores de falhas para cálculo do risco, o grupo de análise de falha por evento produziu o documento NUREG/CR-0400 -1978.

As metodologias fundamentadas em análises estatísticas específicas para acidentes nucleares introduziram a modelagem *Probabilistic Risk Assessment* (PRA), nas décadas de 1960 -1970 [30]. A análise PRA se fundamenta na montagem de árvores de eventos e falhas. Inicialmente avaliou-se o risco de vazamento de iodo ^{131}I ativo, mas tornam-se normas em 1995 [77].

Uma análise sucinta dos três níveis do modelo se faz necessária. O primeiro nível analisa as várias respostas da planta para um evento, o qual desafia a operação da planta, chamada de sequências de acidentes. O segundo nível verifica a resposta da planta relativa a sequências de acidentes, que resultam em danos no reator e nos elementos combustíveis encerrados no núcleo. O terceiro nível é frequentemente, chamado de análise de consequências, e refere-se aos efeitos na saúde dos trabalhadores e da população. Nessa fase, realiza-se a análise de riscos. Os relatórios de análise de riscos são obrigatórios no licenciamento, evitando-se, deste modo, a possibilidade de acidentes severos [77,78].

O risco comum é o vazamento de isótopos ativos como dióxido de urânio no refrigerante. O acúmulo de material ativo no vaso de pressão pode gerar a fusão de parte do núcleo. A oxidação do zircônio libera hidrogênio na forma de bolhas com até 30 m³, seguida por explosões devido à ignição do gás em alta temperatura, como nos casos TMI e *Fukushima*. No acidente TMI, cerca de 50% do núcleo derreteu após uma sequência de falhas iniciadas no secundário devido à pane em uma válvula; mesmo assim, existiam varetas intactas. No caso de temperatura bem acima de 1200 °C, desenvolve-se o derretimento do núcleo com explosões de hidrogênio. O revestimento de aço vislumbra maior segurança relativa ao acúmulo de hidrogênio formado; o aço não produz bolhas de hidrogênio [16,17].

O código de análise probabilística denominado de sistema integrado de avaliação e evolução da confiabilidade *Systems Analysis Programs for Hands-on Integrated Reliability Evaluations* (SHAIRE). O código SHAIRE foi desenvolvido pelo INL para a realização de uma avaliação de risco probabilístico completo (PRA).

A partir da metodologia PRA desenvolveu-se um modelo de avaliação probabilística de segurança, ou *Probabilistic Safety Analysis* (PSA) [30]. A PSA emprega uma abordagem sistemática para estimar o risco associado à operação das usinas nucleares, consiste em um julgamento fundamentado em análise probabilística, dividido em três níveis de risco [79]. A ideia é concretizar e avaliar os cálculos de riscos. O primeiro nível ocupa-se apenas com o cálculo da frequência dos acidentes, é verificada a probabilidade de liberação de materiais radioativos para o meio-ambiente avaliando os danos no núcleo; a de nível dois com a progressão dos eventos do acidente, analisa-se a progressão da árvore de eventos e árvores de falhas.

O terceiro nível trata das consequências ambientais das liberações de isótopos ativos no meio ambiente. Uma categorização referente aos acidentes do tipo LOCA aceita internacionalmente, subdivide-se os acidentes de acordo com a quantidade de perda de fluido refrigerante. Nos eventos de pequenas perdas de refrigerante ou *Small Break* LOCA, a classe S_3 é definida para uma ruptura é inferior ao diâmetro equivalente de 1,27 cm, ou ½ polegadas, a frequência estimada é de 3×10^{-4} reator-ano, para PWRs. Nos eventos de pequenas perdas classe S_2 , caso o diâmetro equivalente seja de 1,27 cm a 6,35 cm, ou ½ polegadas a 2 polegadas, a frequência estimada é de 1×10^{-4} reator-ano para PWRs.

Nos eventos de pequenas perdas classe S_1 , caso o diâmetro equivalente de 5,04 a 15,24 cm, ou 2 a 6 polegadas, a frequência estimada é de 2×10^{-5} reator-ano para PWRs. Nos eventos, de grande ruptura temos o *Large Break* (LB), caso a ruptura diâmetro equivalente de 15,24 cm, ou maior que 6 polegadas na tubulação, a frequência estimada é de 4×10^{-6} reator-ano para PWRs. Essas classificações sofrem alterações, verifica-se até rupturas superiores a 78,74 cm ou 31 polegadas, com frequências de 2×10^{-9} reator-ano em reatores PWRs, são descritas na NUREG-5070.

Os efeitos da perda do fluido é uma queda abrupta na pressão interna do núcleo, produzindo uma fase de despressurização ou *bloodown*, caso o sistema de refrigeração de emergência ECCS não seja eficiente o suficiente a temperatura limite é de 1200 °C podendo ser ultrapassada. Para revestimento de aço inoxidável em reatores de água leve, os dados disponíveis são reduzidos, uma alternativa grosseira seria adotar os dados do *Zircaloy*.

3.8.4 Análise de risco para falhas do combustível

A análise de riscos probabilísticos para o revestimento de aço e a análise estatística de segurança são tópicos que deveriam ser estabelecidos, uma vez que foram produzidos visando às ligas à base de zircônio. Os documentos atuais não fazem menção alguma ao revestimento de aço. As margens de segurança de operação propostas para reatores nucleares no documento IAEA-TECDOC-1332, atualizado em 2010, são exclusivas para revestimentos por ligas de zircônio. As margens de operação segura para reatores são investigadas por múltiplos programas de pesquisa desenvolvidos últimas décadas [77,78].

Verifica-se que, no que tange a segurança dos combustíveis revestidos por aço, praticamente utilizaram-se os mesmos limites adotados para as ligas de zircônio. Poucos relatórios sobre o tema foram produzidos, e não se tornaram normas.

Em 1989, inicia-se a produção do documento NUREG-1150. O documento proposto pela US-NRC, o qual passou por revisões pelas ANS e AIEA, utilizou-se de cinco plantas com revestimento de *Zircaloy* como referências, os reatores: *Surry*, *Zion*, *Sequoyah-1*, *Peach Button-2* e *Grand Gulf-1*. As análises dos resultados da investigação demonstram que para o reator PWR, *Surry*, unidade 1 de 788 MWe, a probabilidade de acidente fatal fora estimado em 2×10^{-8} falhas-ano e para o reator BWR *Peach Botton*, unidade 2 de 1065 MWe o risco é de 5×10^{-11} falha-ano.

A filosofia de defesa em profundidade *Defense in Depth* (DID) vem sendo utilizada em avaliações de segurança e em justificativa para normas regulatórias [78,79]. A filosofia DID preconiza o uso de barreiras redundantes. Os sistemas de isolamento abrangem os recursos de engenharia disponíveis, os quais visam isolar os fluidos que passam através das paredes da contenção de forma a evitar que material radioativo atinja o meio ambiente.

As camadas redundantes são: (i) a primeira barreira é o próprio combustível, que é cerâmico e retém os elementos radioativos sólidos; (ii) a segunda barreira é o revestimento do combustível, que deve conter os produtos de fissão gasosos formados durante a queima do combustível; (iii) a terceira barreira é o circuito primário de refrigeração; (iv) a quarta barreira é o prédio de contenção do reator.

As normas de segurança aprovadas para plantas nucleares exige que se defina a pressão diferencial entre os diferentes compartimentos e estruturas da contenção, deste modo, é obrigatório que se demonstre por análise estrutural a capacidade estrutural de suportar tais esforços. Esses dispositivos são representados por: revestimento, vaso de pressão, válvulas de retenção ultra rápidas, vedação por flanges cegas, vasos de pressão, tubulações em circuito fechado e o prédio do reator. Nesse caso, as barreiras de contenção, devem ser divididas em múltiplas camadas independentes. O revestimento é uma barreira associada diretamente a pastilha combustível, seguida pelo vaso do reator [75,77,78].

O projeto do núcleo do reator segue os critérios de segurança estipulados pelas US-NRC e AIEA, minimizando os riscos de contaminação e de exposição à radiação em caso de transientes, tais como: RIA, LOCA e acidentes classificados como transientes sem parada ou *Anticipated Transients Without Scram* (ATWS).

A barreira imposta pelo revestimento, caso seja rompida, possibilita a expulsão do dióxido de urânio. Pode ocorrer uma onda de pressão no núcleo devido à dispersão de combustível no refrigerante. As implicações de segurança levaram ao estabelecimento de limites de projeto para a temperatura e para o nível de oxidação do revestimento. Os resultados apresentados pelos códigos de desempenho devem ser consistentes com os limites e as margens de segurança adotados internacionalmente [75]. Os valores probabilísticos para falhas em reatores nucleares são estimados em 10^{-7} falhas por ano, segundo os fabricantes.

3.8.5 Limites térmicos do revestimento

Notadamente, os limites e critérios de segurança são resultado de investigações promovidas em reatores refrigerados por água leve revestidos com ligas à base de zircônio. Nas adequações codificadas não se alteram esses critérios, uma vez que não se vislumbram publicações sobre esses limites destinados ao aço em reatores térmicos. Existem investigações nesse sentido para reatores rápidos, operando com espectro de energia ($E > 1\text{MeV}$), refrigerados a sódio em temperaturas de 510 - 550 °C, mais altas que os PWRs. Algumas observações se fazem necessárias, para troca do revestimento, de *Zircaloy* para o aço inoxidável austenítico. O revestimento de aço proporciona um fechamento da folga, posterior ao do *Zircaloy*. Dessa maneira, o revestimento de aço austenítico desenvolve o fechamento da folga, com um adicional médio de 11% de irradiação ou potência gerada em relação às mesmas condições no ciclo de irradiação do *Zircaloy*. O limite térmico do revestimento no estado permanente é de 982 °C e se ultrapassar 1204 °C caracteriza-se como o acidente LOCA [38,80].

O fechamento acelera a degradação do revestimento, fragilizando e reduzindo a ductilidade. As normatizações relativas à operação de segurança regulamentam os seguintes tópicos:

- i. A temperatura máxima de operação até 1204 °C, como limite de operação [29,30,76,80].
- ii. As deformações máximas do revestimento axiais até 1% e circunferencial 2,5% [29,30,76,80].
- iii. A oxidação máxima ECR de 17 % em peso [93-96].
- iv. O critério do fluxo crítico calórico *Critical Heat Flux* (CHF) relativo à formação de bolhas na superfície do revestimento a razão de partida da ebulição nucleada *Departure from Nuclear Boiling Ratio* (DNBR), é de 1,33, com 30% de margem de segurança [29,30,76,80].

A oxidação máxima do revestimento em nenhuma parte deve exceder 17% da massa inicial ECR, imposta pela correlação de *Baker-Just*. Essa correlação calcula a taxa de calor por meio da oxidação em alta temperatura, de 1000 a 1500 °C; proposta em 1962, é expressa na forma parabólica $w^2 = kT$, em que a variável w é o ganho de peso e T é a temperatura.

O acidente por reatividade iniciada RIA é classificado na forma dual para reatores térmicos de água pressurizada e fervente. Uma causa provável para o início do transiente é a falha do mecanismo de acionamento das barras de controle. O incremento da reatividade envolve um aumento súbito na taxa de fissões, ou fator multiplicativo, e, consecutivamente, um rápido aumento na potência linear do combustível, seguido de temperaturas da ordem da metade da temperatura de fusão do dióxido de urânio de 2865 °C. A distribuição de temperaturas dentro da pastilha pode não ser uma curva parabólica durante o transiente de potência, quando ocorre um rápido aumento da reatividade, a temperatura pode ser proporcional à distribuição de potência. O fenômeno ocorre com combustível irradiado em longos ciclos após o fechamento da folga e submetido a manobras de potência ou travamento das barras de controle provocando o aumento da inesperado de reatividade [30,76].

Os sistemas de controle de reatividade devem ser projetados para ter uma capacidade combinada, visando a controle da reatividade, alcançado com a adição ácido bórico; ou pelo sistema de resfriamento de emergência do núcleo, caso ocorra o travamento das barras absorvedoras. Desta maneira, deve-se manter a capacidade de controlar com segurança as alterações da reatividade, do mesmo modo à capacidade de refrigeração do núcleo.

Existem duas condições fundamentais para se estabelecer o limite de entalpia que gera falha nas varetas, quando a temperatura do refrigerante é de 287 °C *Hot Zero Power* (HZP). Nesses casos, ocorrem falhas na inserção das barras de controle. Os combustíveis submetidos à condição *Cold Zero Power* (CZP), sendo a temperatura de 20 °C, ocorrem quando o mecanismo de acionamento das barras de controle falham, então gerando, o pulso de entalpia no início do ciclo, a diferença está na temperatura do refrigerante e no efeito Doppler [29,30,76]. O pulso de entalpia com largura entre 25 - 75 ms e pode gerar acidentes. Em combustíveis irradiados acima de 40 GWd/MTU revestidos de *Zircaloy*, com a PCI, ou seja, o fechamento da folga seria provável um acidente.

3.8.6 Análise de transientes

O interesse investigativo dos programas internacionais é pesquisarem: (i) a excursão térmica da pastilha; (ii) o inchamento; (iii) a porosidade; (iv) a formação de hidretos; (v) o tamanho do grão (vi) a queima estendida. O foco é formado por transientes classificados como RIA ou LOCA. Existem casos definidos como estado permanente relativos às rampas de potência; estes também são pesquisados. Os acidentes iniciados por reatividade do tipo RIA são catalogados em mais de mil varetas em reatores de teste nos Estados Unidos, França, Japão, Rússia, Cazaquistão e Romênia, sendo basicamente revestidas por ligas à base de zircônio [80].

O programa PBF, executado entre 1978-1980, foi desenvolvido em um reator de pulso em *Scoville*, nesses testes, ocorreu a queima do combustível até 5 GWd/MTU com pulsos entre 11 e 16 ms, com picos de entalpia de 1160 J/gUO₂.

O órgão regulador no Japão, a Comissão Nuclear de Segurança com a JAEA definiram as bases do critério de segurança, proposta em 1984, por meio dos resultados obtidos na pesquisa desenvolvida no reator *Nuclear Safety Research Reactor* (NSRR). O NSRR é um reator tipo TRIGA modificado para transientes de reatividade chamado *Annular Core Pulse Reactor* (ACPR).

Utiliza-se ACPR, em testes de combustíveis de PWR e BWR [98]. Os critérios foram revistos em 1998.

O valor do pico do pulso de entalpia não deve exceder 230 cal/g, e a pressão máxima desenvolvida não deve ultrapassar em 20% além da pressão máxima nominal definida no projeto. O vaso do reator não deve ser danificado pela ruptura do combustível produzindo uma onda de choque [78].

No programa de pesquisa desenvolvido na cidade de *Tokai* no reator NSRR, realizado na década de 1990, conclui-se que os combustíveis irradiados entre 39 e 50 GWd/MTU e submetidos a pulso de largura de 4,4 a 6,9 ms, com picos de entalpia entre 196 e 444 J/gUO₂ apresentaram um limite de falha empírico na faixa de 70 cal/g [156]. O limite entálpico para ocorrência de falha depende do ciclo de irradiação inicial, uma vez que, a potência linear é moderada em 18 kW/m. A dependência da ruptura do revestimento está correlacionada com: (i) rampas de potência; (ii) acúmulo de óxidos e hidretos; (iii) ocorrência preliminar do fechamento da folga.

O limite de entalpia é fortemente correlacionado com o contato sólido, ou fechamento da folga, e do contato termomecânico natural da PCMI. As falhas no revestimento se caracterizam por longos rasgos no corpo do combustível produzidos, durante e após a aplicação do pulso de entalpia [46, 82]. Para o acidente postulado RIA, utiliza-se a técnica de pulso de energia de curta duração, a qual simula o acidente. A energia é fornecida pela largura de pulso e pelo pico de entalpia cal/g. Os picos da energia são fornecidos para gerar os pulsos dos testes de acidentes, como nos programas SPERT e TREAT, criados em 1980 e patrocinados pela US-NRC, nos quais se estabeleceu um valor médio para o pico de entalpia em 280 cal/g [73,80].

O programa de teste PBF, desenvolvido pelo INL estabelece o valor de 170 cal/g para BWR. Uma análise das investigações científicas desenvolvidas nos reatores CABRI e NSRR concluiu que o valor da entalpia não deve ser maior que 70 cal/g [76,80]. Nessas pesquisas, o limite da falha do combustível é fundamentado num patamar máximo de entalpia radialmente aplicada ao combustível de 170 cal/g para BWR e com a aplicação do critério de DNB; e com base de dados experimentais gerados nas análise de transientes por reatividade nos reatores CABRI, na França, e NSRR, no Japão na década de 1990, com os ciclos de irradiação que atingem limites de 50 GWd/MTU ou superior. Na Figura 3.25 apresenta-se os efeitos do pulso de energia de 40 MW/ft temperatura de 1000 °C/s

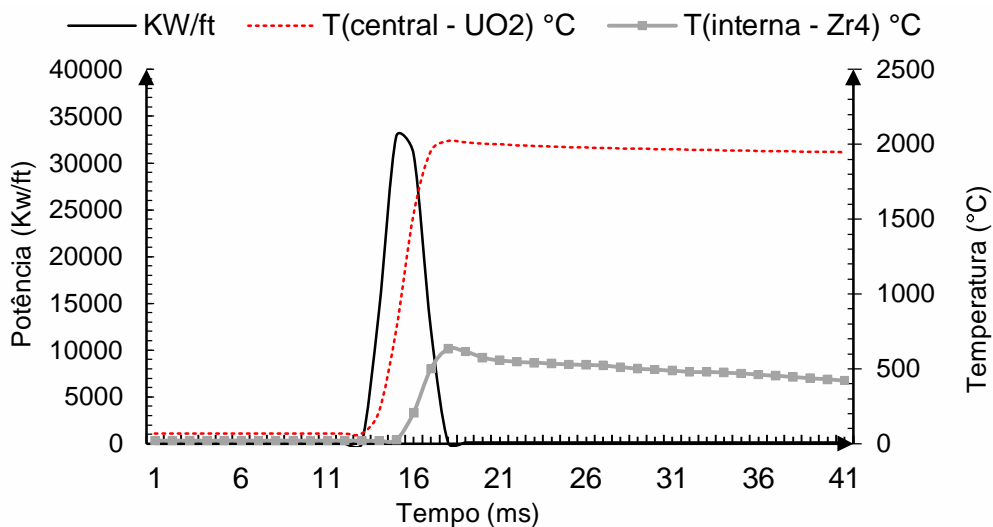


FIGURA 3.25 - Pulso de energia de 40 MW/ft temperatura de 1000 °C/s

Os valores limites de entalpia foram pesquisados experimentalmente e após, analisados estatisticamente e modelados ao longo das últimas décadas [44]. Uma crítica plausível é que se adapta as condições tecnológicas da época, extensão do ciclo de queima e tipos de ligas a base de zircônio, tanto para reatores PWRs como BWRs. O pulso com largura de 5 ms e pico 115 MW/m produz um gradiente térmico de 5600 °C/s, atingindo a temperatura de 2200 °C no centro da vareta combustível. A deformação no revestimento é proporcional à densidade da energia aplicada, para os pulsos cuja entalpia é próxima ou abaixo de 130 cal/g, a deformação é gerada principalmente pela expansão térmica do combustível. As Figuras 3.25 e 3.26 descrevem as curvas básicas em estado transiente.

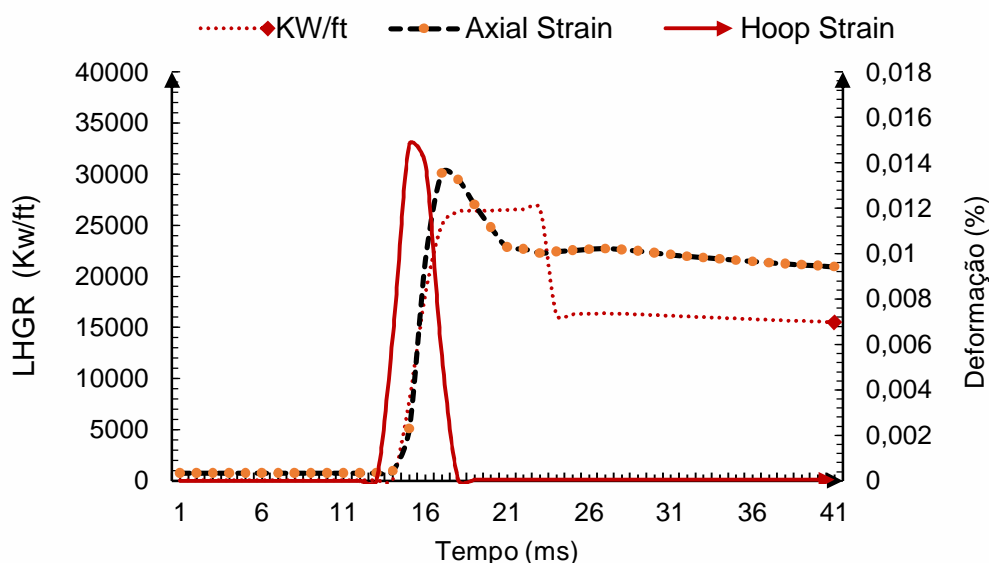


FIGURA 3.26 - Pulso de energia deformação axial e circunferencial

Em caso da energia aplicada ultrapassar o limite de 130 cal/g, verifica-se uma considerável quantidade de gases nobres liberados principalmente xenônio e criptônio. A condutividade térmica do UO_2 diminui com o processo de fissão do combustível. Os danos provocados por irradiação reduzem a capacidade de fônon de transferir energia térmica [52,53,54]. O pulso de entalpia de 100 MW/m produz um aumento na temperatura. O aumento da temperatura atinge o fluxo crítico de calor, provocando o fenômeno da partida de ebulição nucleada DNB, passando para o estado instável da ebulição em forma de filme, formado na interface entre o refrigerante e o revestimento do combustível.

Os gases produzidos pela fissão são considerados como um fator limitante. O aumento da temperatura até 2000 °C no centro da pastilha provoca o efeito *doppler*, produzindo o efeito da reatividade negativa. A análise de acidentes de reatividade constitui uma das partes básicas do licenciamento de plantas nucleares. O código de análise de transiente sofre um processo de adequação para suportar o revestimento de aço, sendo um elemento fundamental, destinado às análises de acidentes e regulamentação pelo órgão regulatório.

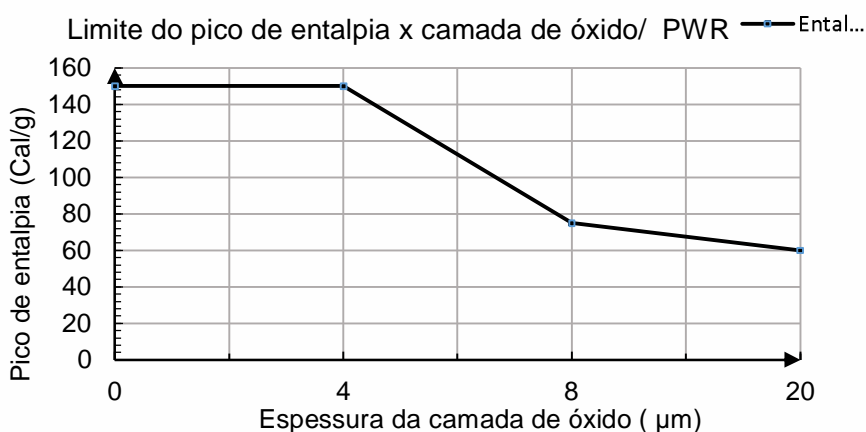


FIGURA 3.27 – Limite de entalpia em função da camada de óxido.

A Figura 3.27 apresenta o limite do pulso de entalpia aplicado em relação à espessura da camada de óxido formado no revestimento. O critério de segurança proposto no documento US-NRC NUREG-0800 de 1981, define que a máxima entalpia aplicada na superfície circular do combustível seja limitada a 1172 J/g ou (280 cal/g), prevenindo a fusão do combustível e, a expulsão violenta do combustível por ruptura do revestimento.

Sendo a interação denominada de martelo de água ou fluídico (*Water Hammer*). Em 2000, revisa-se o limite para o valor (230 cal/g) [76]. Na França, adota-se o limite de (225 cal/g) para combustível irradiado. O limite diferencia-se para combustíveis novos, o limite de (170 cal/g) para combustível não irradiado. A Figura 3.28 apresenta o limite de entalpia em função dos hidretos depositados no revestimento.

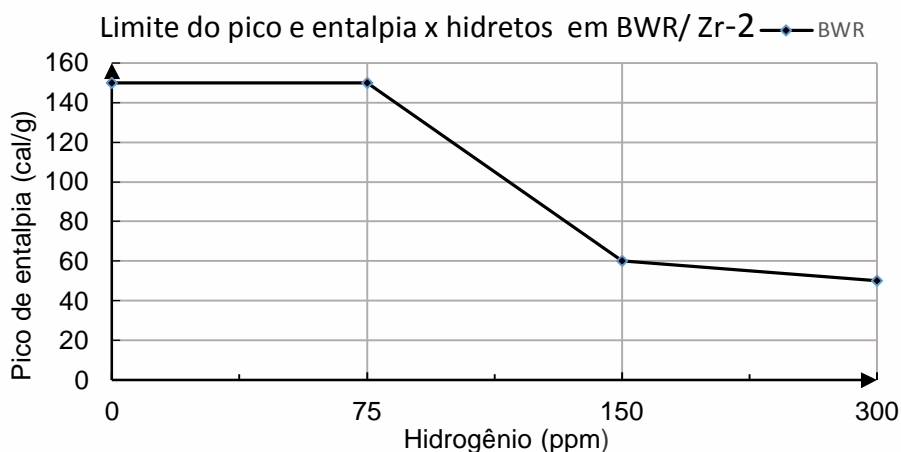


FIGURA 3.28 – Limite de entalpia em função de hidretos no revestimento

O primeiro limite de entalpia adotado foi de 280 cal/g para os casos *Rod Ejection Accident* (REA), denominado critério de refrigeração para reatores de água pressurizada. A Tabela 3.26 apresenta-se os parâmetros do acidente RIA [73,80].

TABELA 3.26 Principais parâmetros em acidentes postulados RIA

Parâmetro	CABRI	NSRR	IGR	BIGR
Refrigerante	Sódio	Água	Água	Água
Temperatura do refrigerante (°C)	279	20-85	20	20
Pressão do refrigerante (MPa)	0,2 -0,5	0,1	0,1	0,1
Largura de pulso (ms)	8 -75	4 -7	630 -850	2-3
Queima (GWd/MTU)	28-77	26-78	47-51	48-61
Camada de óxido (µm)	4-100	4-81	5	5
Comprimento ativo (mm)	440-570	122-135	150	150
Entalpia de pico (cal/g)	81 -227	37-158	61-251	115-189
Menor entalpia de falha(cal/g)	30	60	176	164

O segundo critério da entalpia de 170 cal/g, *Rod Drop Accident* (RDA), foi utilizado para reatores de água fervente. No caso do CHF ser ultrapassado viabiliza-se a condição DNB, a partida da ebulição nucleada, desse modo qualquer acidente implica nessa fase comum aos LOCAs e RIAs.

Atualmente, o caso mais importante se refere ao primeiro caso, no qual tem-se o fechamento da folga, devido aos ciclos de queima até 62 GWd/MTU; atualmente, verificam-se ciclos de irradiação na faixa de 55 GWd/MTU [10-12].

4 TESTES REALIZADOS

4.1 Introdução

Os testes produzidos utilizaram os programas adequados, contando com as correlações definidas para o aço, com o código IPEN-CNEN/SSP, para cálculo de desempenho do estado permanente, e código IPEN-CNEN/SST, destinado ao estado transiente. Executam-se casos criteriosamente escolhidos pertencentes à base de dados internacionais desenvolvidos a partir da década de 1970.

O intuito das investigações científicas da época foi a necessidade da extensão dos ciclos de irradiação. Nos reatores do passado, revestido com aço os PWR alcançavam em média até 20 GWd/MTU; exemplificando temos *Indian Point -1*, *San Onofre* e *Yankee Rowe* revestidos com aço. Em 2005, atinge-se além de 40 GWd/MTU, com revestimento por ligas à base de zircônio, portanto dobra-se o ciclo de irradiação.

Um dos casos refere-se à vareta do reator localizado no estado do *Arkansas*, licenciado em 1978, para a usina *Arkansas Nuclear One-Unit 2*, ou ANO-2, aqui denominado US-PWR 16x16 *Lead Test Assembly* (LTA). A vareta escolhida é chamada de TSQ002, essa caracteriza um caso de ciclo de queima estendida no estado permanente. Adicionalmente, apresentam-se dois casos que visam investigar o inventário dos gases gerados por fissão, em que foram escolhidas as varetas 20i8 e 30i8, ambas varetas utilizadas em reatores PWRs. Uma série de três casos de rampas de potência e um caso de transiente de reatividade formalizam os resultados obtidos.

Os casos foram escolhidos entre as bases de dados internacionais, bem documentado por meio de programas de colaboração internacional, o FUMEX-CRP, disponibilizados pela NEA e pela IFE/OCDE, disponíveis no programa *International Fuel Performance Experiments* (IFPE) [99]. O projeto FUMEX foi desenvolvido e mantido em estreita colaboração e coordenação dos provedores do programa [101]. A base de casos investigada é restrita para reatores térmicos refrigerados por água leve. O foco principal é o dióxido de urânio revestido com ligas à base de zircônio, agregando combustíveis distintos UO_2 , (U-Pu) O_2 e, também com a adição de absorvedores ou urania-gadolinia [100,101].

Os limites de operação são normatizados, no que tange à segurança e ao desempenho. O comportamento dos combustíveis nucleares, devem operar estritamente dentro desses limites. As simulações desenvolvidas pelos códigos IPEN-CNEN/SSP e IPEN-CNEN/SST, relativos ao estado permanente e transiente seguem os limites de segurança definidos para o *Zircaloy*.

Os testes relativos ao estado transiente de reatividade iniciada RIA são do programa de difusão internacional (FUMEX) [101]. Nessa situação, o projeto pesquisa a implantação da extensão do ciclo de queima acima 50 GWd/MTU. No processo de validação do código proposto, utilizaram-se casos disponíveis na base FUMEX. A base de casos IFPE também disponibiliza os casos da base FUMEX, totalizando 1435 varetas [91-97]. Os mesmos testes são utilizados na validação dos códigos FRAPCON, FRAPTRAN, FALCON e TRANSURANUS [47,100,101].

O objetivo principal do programa internacional do programa FUMEX/CRP tem a finalidade de divulgar a experiência adquirida, relativa ao comportamento para queima estendida; dessa forma, promovem-se melhorias concernentes à segurança dos reatores, além de otimizar os ciclos de irradiação e otimizar a troca de combustível [101].

As pesquisas atuais referem-se aos modelos dos gases produzidos por fissão e às alterações microestruturais dinâmicas, em intervalos de tempo de milésimos de segundos. Outras técnicas podem vir a ser utilizadas, como a dinâmica molecular [102].

O programa específicos como a iniciativa francesa *PRO*PERTIES *ME*chanical *TR*ansient (PROMETRA) desenvolvido em *Grenoble*, iniciado 1992, tem como objetivo verificar a alteração dinâmica das propriedades mecânicas durante o transiente de combustíveis irradiados [67]. Uma das observações finais do PROMETRA [67] é a atribuição da falha do revestimento responsabilizada pela corrosão [29]. A base de casos (AIEA-NEA-IFPE) em conjunto com o programa FUMEX/CRP, forma um conjunto de varetas para simulação e validação das alterações promovidas visando suportar o revestimento de aço austenítico inoxidável AISI - 348. [1,76,80]. A agência IAEA desenvolveu uma série de dados para simulação de varetas combustíveis no programa de pesquisa e colaboração, visando aprimorar as modelagens relativas ao desempenho de combustível, em ciclos de queima estendida.

O FUMEX apresenta três edições; antes de sua existência, ocorreu, entre 1982 a 1984, um programa semelhante para projetos de combustíveis denominado D-COM. O programa FUMEX-III contou com 31 participantes de 20 instituições de pesquisas, agências nacionais e internacionais. Os casos foram simulados por vinte códigos diferentes adotados a redor do mundo relativos ao desempenho de combustíveis [101].

A Tabela 4.1 apresenta os documentos finais do FUMEX [102,103].

TABELA 4.1 - FUMEX versões implementadas

Programa	Datas	Documentos oficiais
FUMEX	1993-1996	AIEA-TECDOC-697
FUMEX-II	2002-2006	AIEA-TECDOC-1687
FUMEX-III	2008-2012	AIEA-TECDOC-1697

4.1.2 Varetas escolhidas do (ifpe) para validação do código

A Tabela 4.2 apresenta os dois casos escolhidos e descritos na base internacional os quais foram produzidos e escolhidos por especialistas mundiais em combustíveis.

TABELA 4.2 – Base de dados IFPE NUCLEAR FUEL PERFORMANCE EXPERIMENTS

Reator	Varetas	Identificação da vareta (caso)
PWR	28	SUPER-RAMP. PWR Análise e rampas (11/1997)
PWR	9	US-PWR 16x16 LTA Queima estendida (07/2005)

Utilizou-se os casos extensivamente pesquisados no programa FUMEX-CRP sendo utilizados para validação dos códigos de desempenho, IPEN-CNEN/SST. Os testes escolhidos simulados com os programas da série IPEN-CNEN/SS apresenta como objetivos principais: (i) pesquisar a excursão térmica da pastilha; (ii) avaliar o inchamento do combustível e o revestimento; (iii) alterações nas propriedades materiais taxa de fluência, redução da ductilidade, endurecimento por irradiação; (iv) a formação de hidretos nas ligas de zircônio e efeitos do trítio e hélio quando revestimento for de aço.

4.1.3 Base de casos (fumex)

O relatório final, o documento regulatório TECDOC-1697, descreve as atividades desenvolvidas de 2008 a 2012. O programa FUMEX-III contou com 31 participantes, vinculados a 20 instituições de pesquisas, ou agências nacionais e internacionais. Os casos foram simulados por diversos códigos de desempenho, desenvolvidos ao redor do mundo sendo os resultados comparados. A Tabela 4.3 apresenta os participantes do FUMEX-III.

TABELA 4.3 - Grupos participantes do FUMEX-III

Pais	Organização	Código
Alemanha	ITU	TRANSURANUS
Alemanha/ França	Areva	GALILEO
Argentina	CNEA	BACO, DIONISIO
Brasil	IPEN/CNEN	FRAPCON, FRAPTRAN
Bulgária	INRE	TRANSURANUS, FEMAX
Canadá	AECL	ELESTRES
China	CIAE	METEOR, FTRANAC
China	NPIC	COPERNIC
China	CNPTRI	COPERNIC
Estados Unidos	INL	BISON
Estados Unidos	PNNL	FRAPCON, FRAPTRAN
Federação Russa	Bochvar	START-2
Federação Russa	SRC TRINITI	RTOP
Finlândia	VTT	ENIGMA
França	OECD/NEA	Coordenador do IFPE
Hungria	AEKI	FUROM, TRANSURANUS, FRAPTRAN
Índia	BARC	FAIR
Itália	ENEA	TRANSURANUS
Itália	PISA, Milano	TRANSURANUS, FUELSIM
Japão	JAEA	FEMAXI-4, RANNS
Japão	JNES	FEMAXI
Japão	NFI	THERMEX-N, FORTE
Noruega	Halden	Provedor dos dados
Reino Unido	BE	ENIGMA 5.11
Reino Unido	Nexia	ENIGMA-B
República Checa	NRI	TRANSURANUS, FEMAXI-5
República da Coreia	KAERI	INFRA
Romênia	INR	ROFEM CAREB
Suíça	PSI	FALCON
Ucrânia	Kharkhov	PAD FEMAXI TRANSURANUS

4.2 Estado estacionário

O exemplo simulado é um caso para o estado permanente, chamado de US-PWR 16x16. O caso utiliza a versão FRAPCON para o zircaloy e a versão IPEN-CNEN/SSP para aço. A Figura 4.1 apresenta a pastilha combustível, da vareta TSQ002-D040, com chanfros para dilatação.

A vareta escolhida foi a TSQ002-D040 pertencente ao programa FUMEX-III, e faz parte da base IFPE. O reator é do tipo PWR, com elementos combustíveis dispostos em arranjo 16x16, com 236 varetas de combustível e 5 tubos guias para barras de controle. A taxa linear de potência média é 15,7 kW/m e a fluência média $6,58 \times 10^{21} \text{ n}/(\text{cm}^2)$.

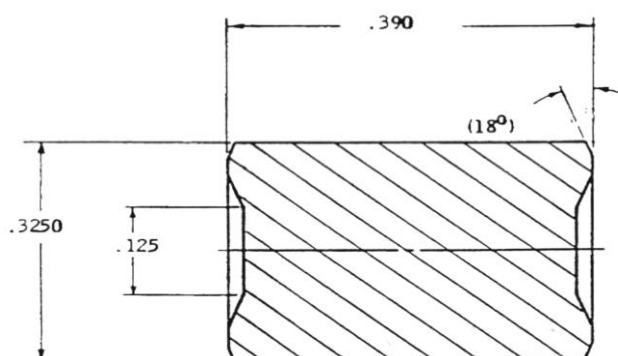


FIGURA: 4.1 - Pastilha utilizada US-PWR-TSQ002.

Na época visava-se alcançar um ciclo mais extenso de queima, com produtos de fissão gasosos em quantidades moderadas. A Tabela 4.4 apresenta os resultados das análises de pós-irradiação realizadas em varetas revestidas de *Zircaloy*, *Electron Probe Micro Analysis* (EPMA).

TABELA 4.4 – US-PWR16x16 TSQ002 - RodD040		
Parâmetros de avaliação	PIE (Medidos)	FRAPCON
Rod D040, queima (GWd/MTU)	53.2	55
Gases produzidos por fissão (%)	1	1,94
Camada de oxidação Zr-4 [μm]	64	54-62
Oxidação, hidrogênio depositado (ppm)	367	294 a 347
Inchamento ($\Delta V/V$)	~ 2.4	3
Dilatação axial da vareta ($\Delta L/L$)	0,83 a 1,11	0,85 a 0,96

O caso US-PWR 16x16 fornece potência térmica de 2815 MWt, apresenta dois circuitos de refrigeração e a pressão interna do núcleo, no estado estacionário varia de 15,17 MPa a 15,517 MPa. A Tabela 4.5 apresenta os parâmetros térmicos do reator. O *Arkansas Nuclear One*, Unit 2, fabricado e desenvolvido pela *Combustion Engineering* (CE), adquirida pela ABB no início dos anos 1990, o primeiro licenciamento foi em 1978, com renovação em 2005.

TABELA 4.5 - Parâmetros Térmicos e Hidráulicos do Reator
US-PWR-16x16 TSQ002-D040

Potência térmica gerada	2815 MWt
Calor gerado no combustível	97,4%
Pressão nominal	15,51 MPa
Pressão mínima no estado estacionário	15,17 MPa
Temperatura de entrada do refrigerante	290 °C
Temperatura de saída do refrigerante	322 °C
Potência linear média na vareta	15,75 kW/m
Potência linear de pico na vareta	41,67 kW/m
Fluxo mássico do refrigerante	54,61x10 ⁶ kg/h
Velocidade média ao longo da vareta	4,99 m/s
Razão DNB	2,26

Nesse caso, o combustível nuclear foi originalmente revestido com *Zircaloy-4*. A Tabela 4.6 apresenta os parâmetros dimensionais, parcialmente formam os dados de entrada, imprescindível ao código IPEN-CNEN/SSP.

O arranjo 16x16, com 236 varetas e 5 tubos guias, as varetas são pressurizadas internamente com gás hélio, com pressão interna de 2,62 MPa. O elemento-combustível contém 12 grades espaçadoras. As grades localizadas nas extremidades são formadas por Inconel – 625, próximas aos bocais inferior e superior, as demais grades são *Zircaloy*, a temperatura central da pastilha atinge 1822,22 °C. As grades localizadas na extremidade são mais resistentes e suportam mecanicamente o elemento combustível. A composição da liga Inconel - 625 [(Ni-58%); (Cr-20 a 23%); Mo (8 a 10%); Nb+Ta (3,15%); (Fe-5%)], a adição de nióbio e tântalo, serve para estabilizar e endurecer a matriz.

O procedimento de teste consistiu em montar o arquivo de entrada, que calcula os parâmetros de saída do ciclo de 1697 dias totais com paradas. A Tabela 4.6 apresenta os dados dimensionais.

TABELA 4.6 - Dados dimensionais de entrada FRAPCON

Parâmetros	Valores
Diâmetro externo do revestimento	9,7028 mm
Diâmetro interno do revestimento	8,4328 mm
Diâmetro externo UO ₂	8,225 mm
Comprimento da pastilha	9,906 m
Comprimento do <i>Plenum</i>	27,17 cm
Densidade da pastilha (g/cm ³)	10,60 g/cm ³
Espessura do revestimento	0,635 mm
Rugosidade do revestimento	0,000508 mm
Rugosidade do dióxido de urânio	0,000762 mm
Aumento da densidade esperado	150 kg/m ³

O ciclo com 1641 *Effective Full Power Days* (EFPD) ou dias efetivos de geração de potência. A Tabela 4.7 apresenta os dados de entrada do programa FRAPCON e IPEN-CNEN/SSP.

TABELA 4.7 - Dados de entrada do FRAPCON, vareta US-PWR
16x16 - TSQ002

Parâmetros	Valores
Período de Irradiação	1697/1641 <i>EFPD</i>
Fluência neutrônica (E>0,82MeV)	6,58x10 ²¹ n/cm ²
Temperatura de sinterização	1872°C
Tipo de revestimento	Zircaloy / 348
Trabalho a frio p/ Revestimento	0,2%
Pressão interna do gás	2,62 MPa
Gás de preenchimento	Hélio
Pressão da água	15,5 MPa
Fluência de nêutrons térmicos	26 x10 ¹⁵ n/m
Fluxo mássico do refrigerante	5899,60 kg/(s-m ²)

A vareta combustível padrão consiste de pastilhas de dióxido de urânio enriquecido a 3,48% de ^{235}U . Quanto a densidade teórica *Theoretical Density* (TD) pode variar de 92% a 97%, o padrão comercial é de 95%, com 8,255 mm de diâmetro e comprimento de 9,906 mm de altura com diâmetro de 0,90 cm.

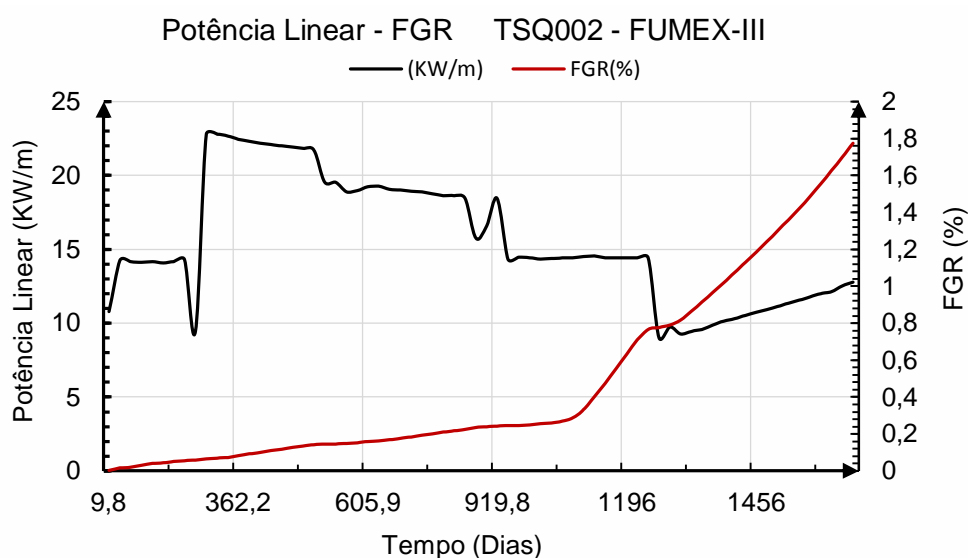


FIGURA 4.2- Potência linear (kW/m) e produtos de fissão gasosos

A Figura 4.2 apresenta o perfil de potência linear da vareta. A potência linear da vareta, apresenta um mínimo de 9,02 kW/m e um máximo de 22,80 kW/m. A Tabela 4.8 apresenta uma comparação entre o *Zircaloy* e o aço 348.

TABELA 4.8- Valores de saída do FRAPCON US-PWR 16X16 TSQ002

Parâmetro	Zr-4	AISI-348
Volume do Plenum (cm ³)	25,35	25,35
Pressão interna máxima (MPa)	8,39	8,78
Queima nodal (GWd/MTU)	56,11	56,11
Queima média (GWd/MTU)	53,44	53,44
Volume de vazio - UO ₂	17,36	16,95
Gases de fissão (%)	1,77	1,77
Tempo total dos ciclos (Dias)	1697	1697
Temperatura central máx. (°C)	1018,89	1108,28
Máxima deformação (elástica + plástica)	0,0490	0,0563

A compressão é produzida por uma mola de aço austenítico 302, com 8 voltas é separada por um disco segregante de alumina Al_2O_3 . O teste desenvolveu-se com as dimensões originais, mas revestido por aço austenítico tipo 348. Nos procedimentos originais, realizaram-se testes de pós-irradiação não destrutivos, de varetas instrumentadas para medir temperatura e pressão. Foram realizados exames destrutivos nas análises de pós-irradiação no teste original, quando revestido por *Zircaloy*.

A potência média é de 16,76 kW/m. A pressão interna do núcleo é constante de 15,51 MPa a temperatura de entrada da água no primário é 290,05 °C, o fluxo mássico da água é 5599,6 kg/(m²-s). A vareta foi dividida em 12 nós axiais e a pastilha em 17 nós radiais, o intervalo de tempo adotado é de 70 intervalos; o dióxido de urânio com densidade de 10,060 g/(cm³), sob irradiação de 5 ciclos com 1641,1 dias. As regiões de borda podem ser formadas com a ocorrência de sub grãos, com baixa concentração de xenônio dentro da porosidade.

Na Tabela 4.9 apresentam-se os resultados obtidos, comparativos entre *Zircaloy* e aço, na média a temperatura do aço é 4,36 °C abaixo do *Zircaloy*.

TABELA 4.9 - Caso USPWR 16x16, vareta TSQ002 temperatura interna, externa e média revestimento 348 e Zr-4

Superfície / Região	Zircaloy	348	$\Delta (T_{Zr}-T_{aço})$
Interna (°C)	316,07	312,83	3,24
Média (°C)	327,24	322,88	4,36
Externa (°C)	338,72	332,99	5,73

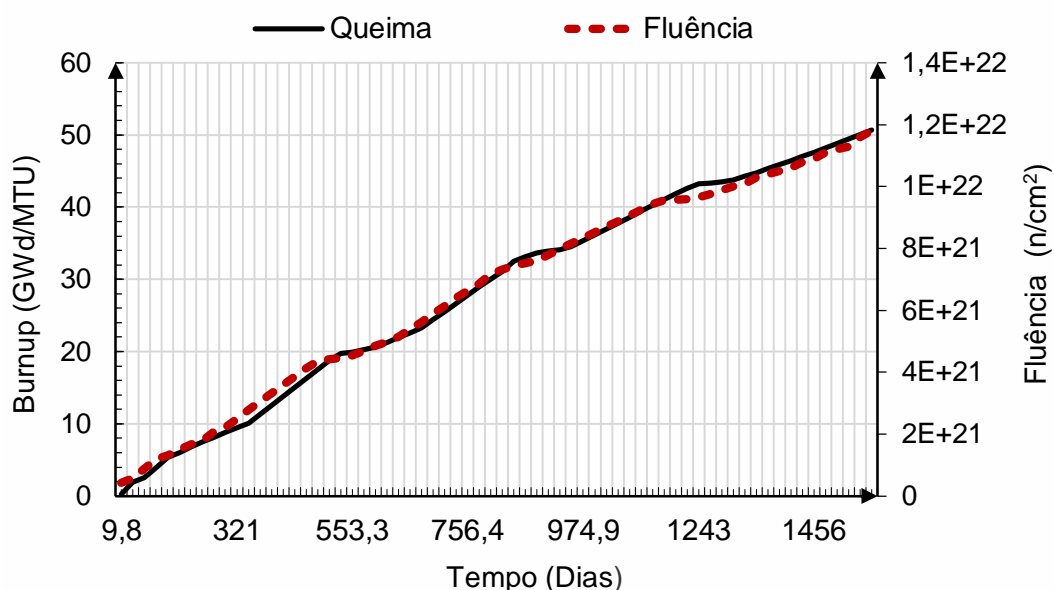
A condutividade térmica do aço é superior do *Zircaloy*. A temperatura central da vareta de combustível UO_2 , revestida de aço alcançam temperaturas médias inferiores às verificadas no revestimento de *Zircaloy*. Após 550 dias de queima, as curvas térmicas convergem, e tem-se praticamente a mesma temperatura, tanto para o aço como para o *Zircaloy*.

A Tabela 4.10 apresenta a temperatura central do UO_2 , quando revestido por aço 348 /Zr-4.

TABELA 4.10 – Caso *US-PWR* 16x16, vareta TSQ002Temperatura central do UO_2 revestido com AISI-348 /Zr-4

Temperatura do UO_2	Zircaloy	348	$\Delta (T_{\text{Zr}}-T_{\text{aço}})$
Interna ($^{\circ}\text{C}$)	790,15	757,52	32,63
Média ($^{\circ}\text{C}$)	573,43	545,92	27,51
Externa ($^{\circ}\text{C}$)	358,67	336,32	22,35
Temperatura máxima ($^{\circ}\text{C}$)	1013,88	936,11	77,77

O fluxo térmico parte do centro da vareta para o refrigerante; portanto, a maior condutividade térmica transmite mais calor. A condutividade térmica do dióxido de urânio e dos gases da folga é praticamente iguais para revestimentos de *Zircaloy* e ou de aço, restando uma melhor condutividade para o aço.

FIGURA 4.3 - Queima e um combustível e a fluência *US-PWR* 16x16

Na Figura 4.3, apresentam-se as curvas de queima e um combustível e a fluência *US-PWR*. No ciclo de irradiação desenvolve-se a expansão térmica do dióxido de urânio, simultaneamente com a densificação.

Na Figura 4.4, apresenta-se a temperatura do revestimento em aço e *Zircaloy*.

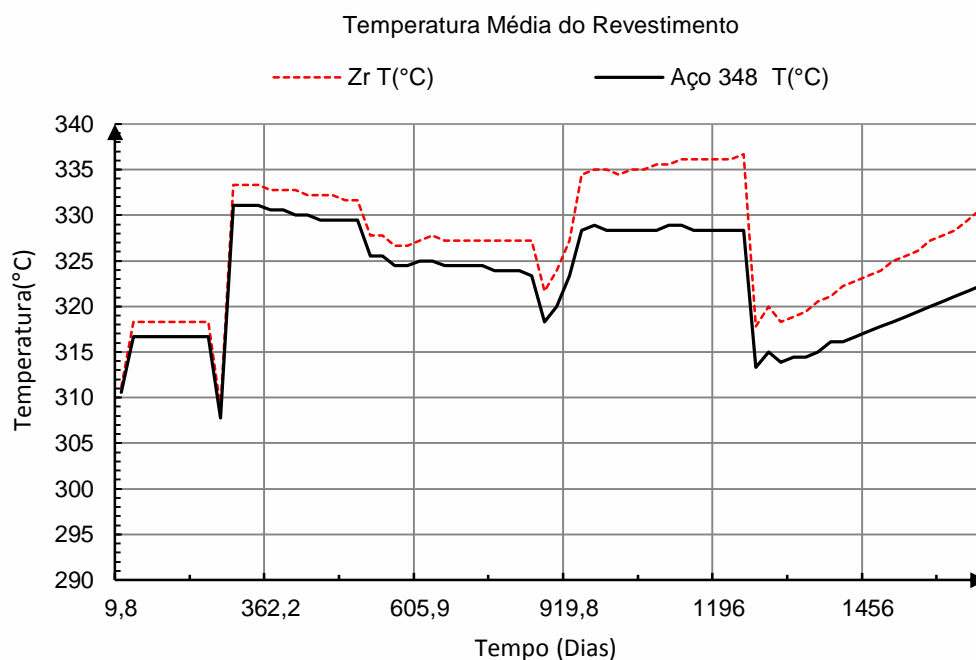


FIGURA 4.4 - A temperatura média do revestimento

Aos 93 dias de irradiação a densificação satura-se com $-19,82 \mu\text{m}$, mas à expansão térmica é de $20,53 \mu\text{m}$, com $2,93 \text{ GWd/MTU}$. Para ambos os revestimentos, os valores podem ser considerados iguais. Apresenta-se, na Figura 4.5, a temperatura média do revestimento. Para o aço a temperatura média é de $322,88 \text{ }^\circ\text{C}$, e para o *Zircaloy-4*, é de $327,47 \text{ }^\circ\text{C}$.

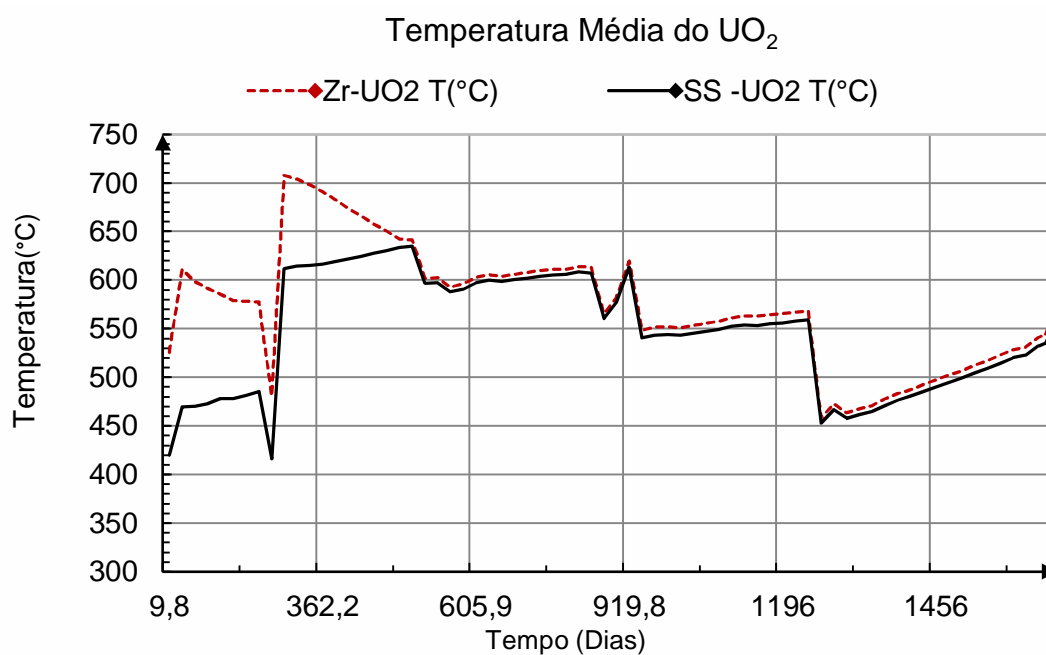


FIGURA 4.5 – A temperatura média do UO_2 revestido com 348, Zr-4.

4.21 Formação de hidretos

A hidretação do Zircaloy é dependente das reações de radiólise da água. Os limites seguros de concentração de hidretos no *Zircaloy* é internacionalmente aceito com índices de 400 ppm. As varetas que apresentam falhas, em geral, acima de 200 ppm altera-se a taxa de deformação, o hidrogênio endurece o zircaloy, ou fragiliza o revestimento pela redução da ductilidade.

Não se verifica a ocorrência de hidretos no aço praticamente, não ocorre o acúmulo de hidretos, portanto não é calculada pelos códigos de desempenho IPEN-CNEN/SS.

A radiólise da água desenvolve fenômenos radioquímicos distintos entre o aço e o *Zircaloy*, contudo no *Zircaloy* a hidretação atinge na vareta TSQ002 ao final do ciclo um acúmulo de hidretos de 250,8 ppm. Os níveis da concentração de hidretos, em alguns países não são observados, uma vez que esse critério não é responsável pela falha diretamente. Apresenta-se na Figura 4.6 o acúmulo de hidretos para o caso TSQ002. No aço, apresentam-se a formação de trítio na pastilha e a difusão do trítio através do revestimento de aço [16-18].

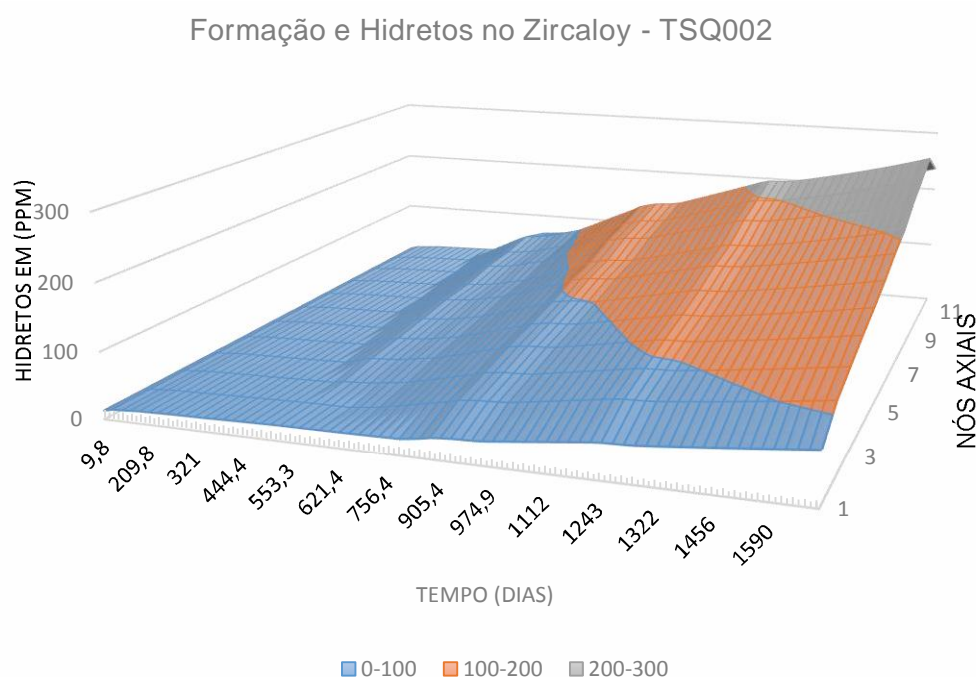


FIGURA 4.6 – Acúmulo de hidretos no revestimento TSQ002, Zr-4

4.2.2 Fechamento da folga

No caso do teste realizado, a pressão interna do hélio é de 2,62 MPa; em geral, a pressão do gás pode alcançar 3 MPa.

O fechamento da folga ocorre antecipadamente com o Zircaloy aproximadamente no dia 548 do ciclo de queima. No entanto, o fechamento da folga ocorre aos 1376 dias de irradiação para o aço austenítico.

Quando ocorre o fechamento da folga a temperatura do revestimento torna-se próxima da temperatura externa do combustível. Na realidade, mesmo com contato mecânico, ocorre uma diferença em torno de 3 °C. Essa temperatura é uma função da dureza dos materiais envolvidos.

Na Figura 4.7, apresenta-se o fechamento da folga entre o aço e o Zircaloy, verifica-se que o fechamento da folga (gap) para o aço ocorre após o Zircaloy. No teste realizado, demonstra-se uma larga diferença em relação aos dias de irradiação, esta é uma vantagem do revestimento de aço.

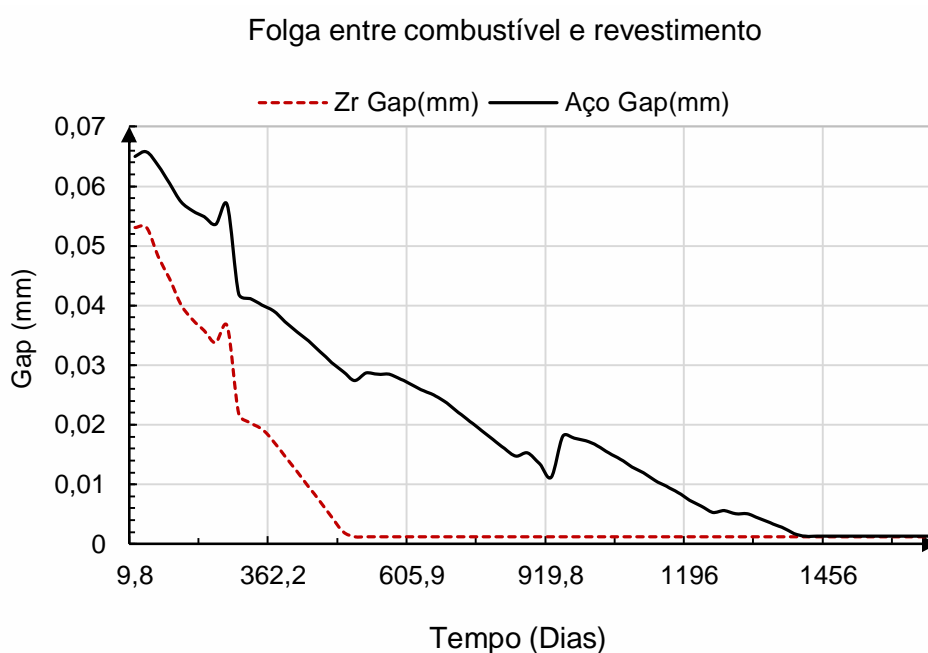


FIGURA 4.7 - Fechamento da folga entre o aço e o Zircaloy

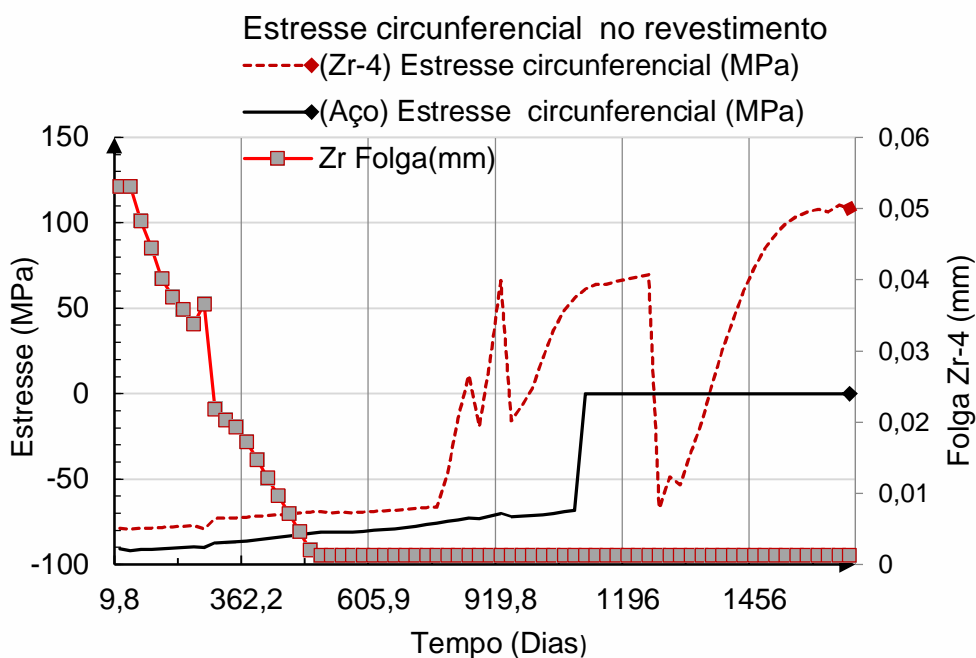


FIGURA 4.8 - O estresse circunferencial, Zr-4, 348, folga

Na Figura 4.8, apresenta-se uma comparação, para o fechamento da folga, para o caso TSQ002. Os valores das tensões desenvolvidas no Zircaloy são superiores às tensões desenvolvidas nas ligas à base de zircônio.

Após o fechamento da folga ocorre um equilíbrio nas tensões desenvolvidas. Na Figura 4.10, apresenta-se a deformação axial nos doze nós.

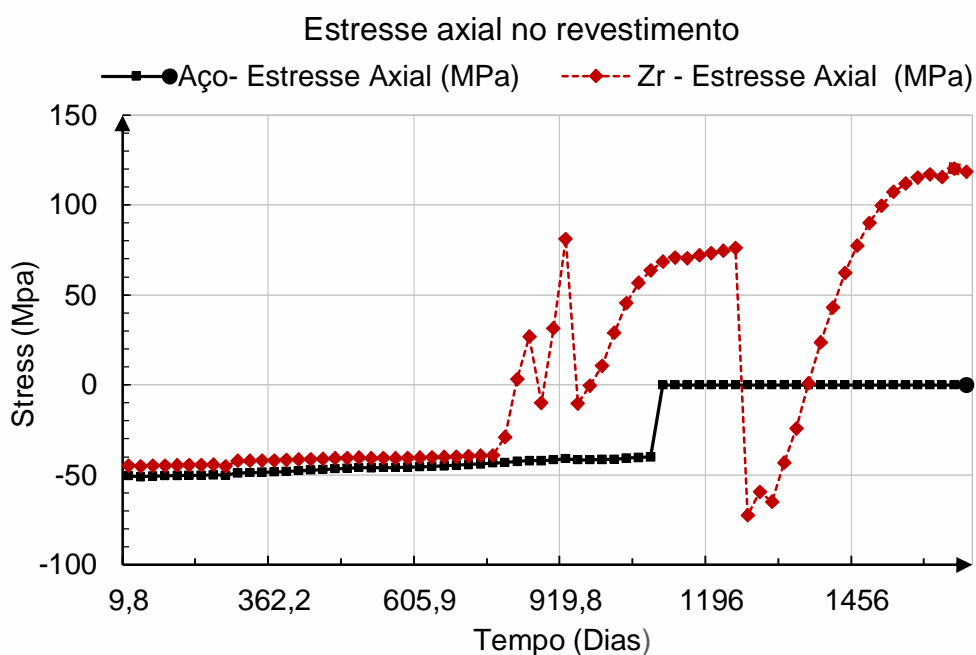


FIGURA 4.9 - O estresse axial no revestimento 348, Zr-4

Na Tabela 4.10, apresenta-se o caso *US-PWR* 16x16, com a vareta TSQ002 e temperatura central do UO_2 revestido com AISI-348 /Zr-4. Nas Figuras 4.8 e 4.9, apresenta-se um comparativo para os dados obtidos da deformação axial e circunferencial verificada em ambos os revestimentos.

TABELA 4.11- Caso *US-PWR* 16x16 Vareta TSQ002 deformação axial, radial e circunferencial aço 348 e Zircaloy

Deformação (mm/mm)	Zircaloy-4	Aço-348
Deformação axial	0,004501	0,006784
Deformação radial	0,006217	0,016473
Deformação circunferencial	-0,00471	-0,00815

Na Figura 4.10, apresenta-se a deformação circunferencial do revestimento em Zircaloy. No eixo das coordenadas, tem-se a deformação no eixo das abcissas, tem-se o tempo em dias; e, no eixo do z, definem-se os doze nós escolhidos na modelagem.

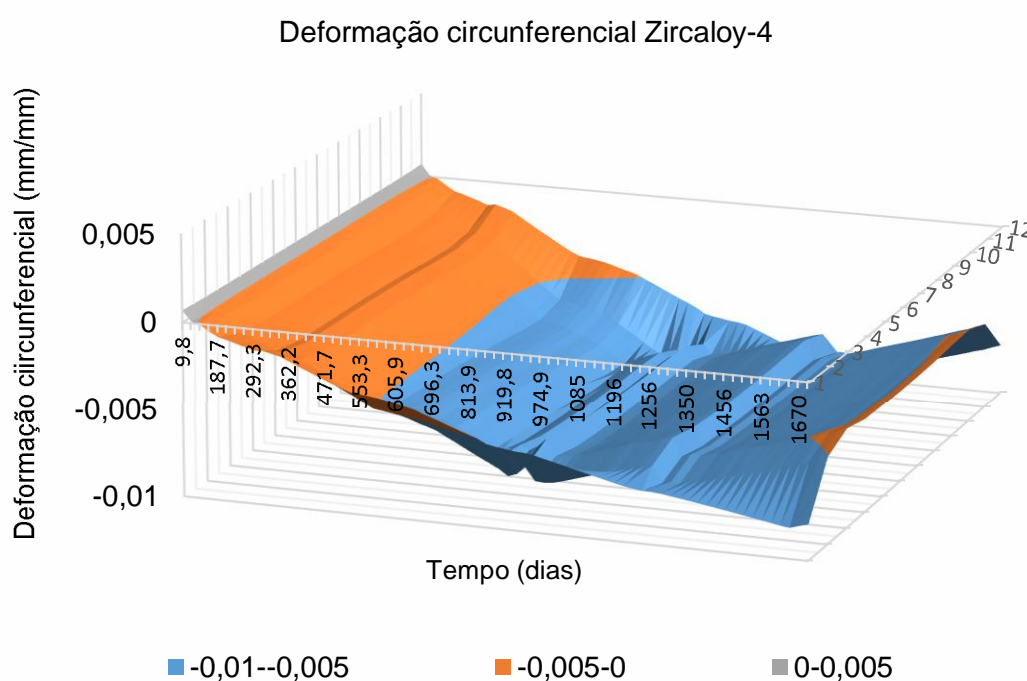


FIGURA 4.10 - Deformação circunferencial nodal do revestimento Zr-4

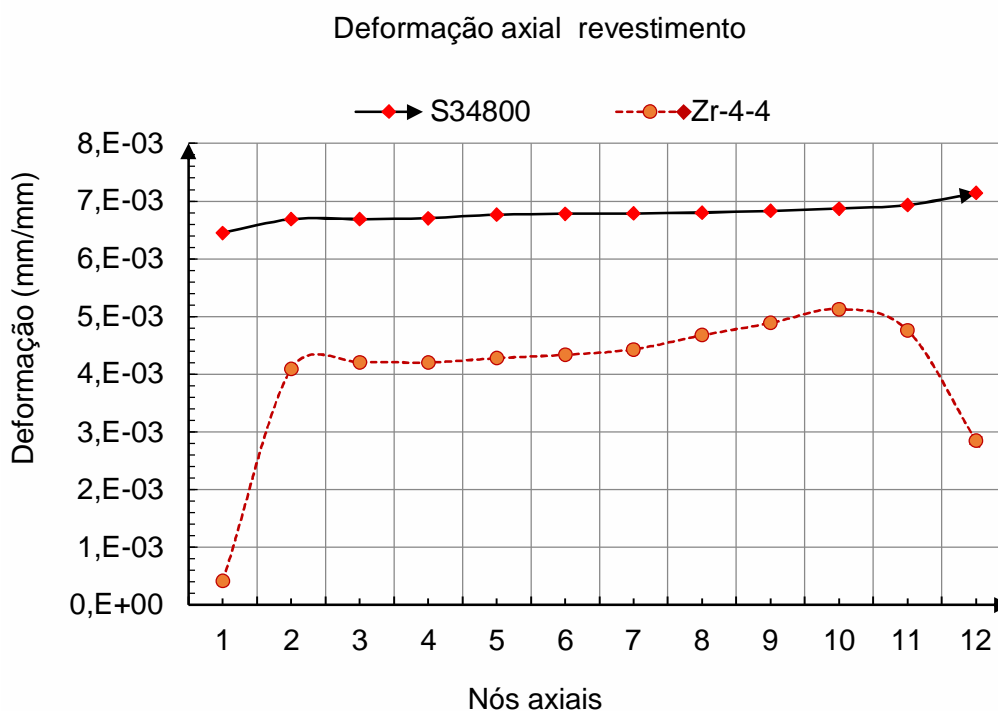


FIGURA 4.11 Deformação axial, caso TSQ002, aço e *Zircaloy*.

A deformação axial do revestimento de aço é mais linear que a observada nas ligas de zircônio. A deformação no corpo da vareta apresenta maior regularidade, como observado na Figura 4.11. O efeito do fluxo térmico é mais influente no caso das ligas de zircônio. No caso do aço predomina a deformação térmica.

A deformação no revestimento de aço é superior à do *Zircaloy*, decorrente em parte da dilatação térmica. O *Zircaloy* na fase(α) apresenta anisotropia acentuada.

A dilatação térmica é uma função da temperatura, resultando na componente da deformação. Nas temperaturas de operação de um reator de água leve, a deformação do aço é cerca de 30% maior que a o *Zircaloy*.

As deformações circunferenciais, radiais e axiais são maiores no aço. Na Figura 4.11, apresenta-se a deformação circunferencial, e na Figura 4.9, a radial, comparativa entre revestimento de aço e *Zircaloy*.

A deformação se encontra nos nós axiais dez, e em onze alcança um valor máximo, em decorrência da direção do fluxo fluídico.

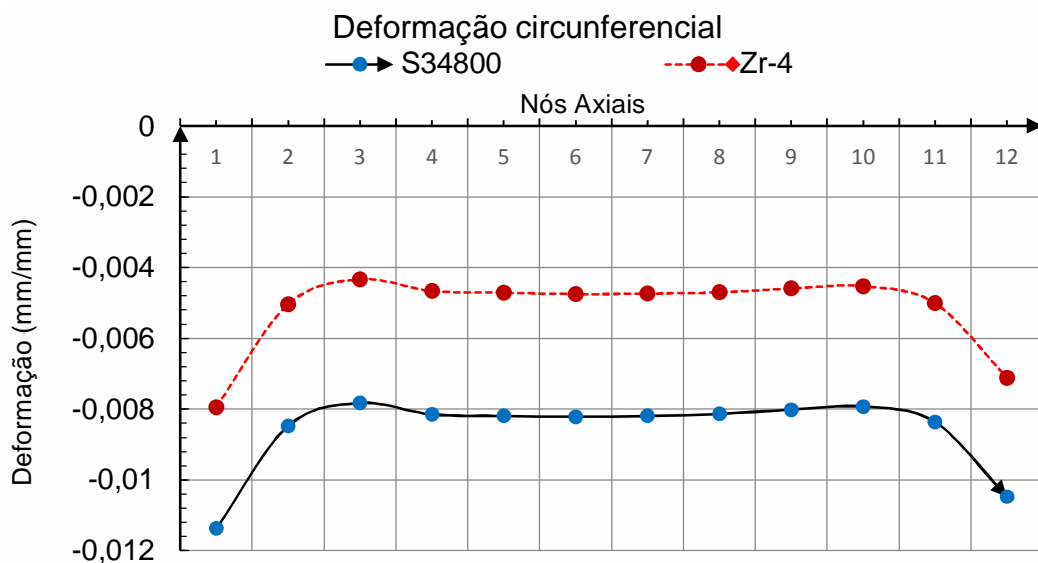


FIGURA 4.12 Deformação circunferencial, caso TSQ002, aço e Zircaloy

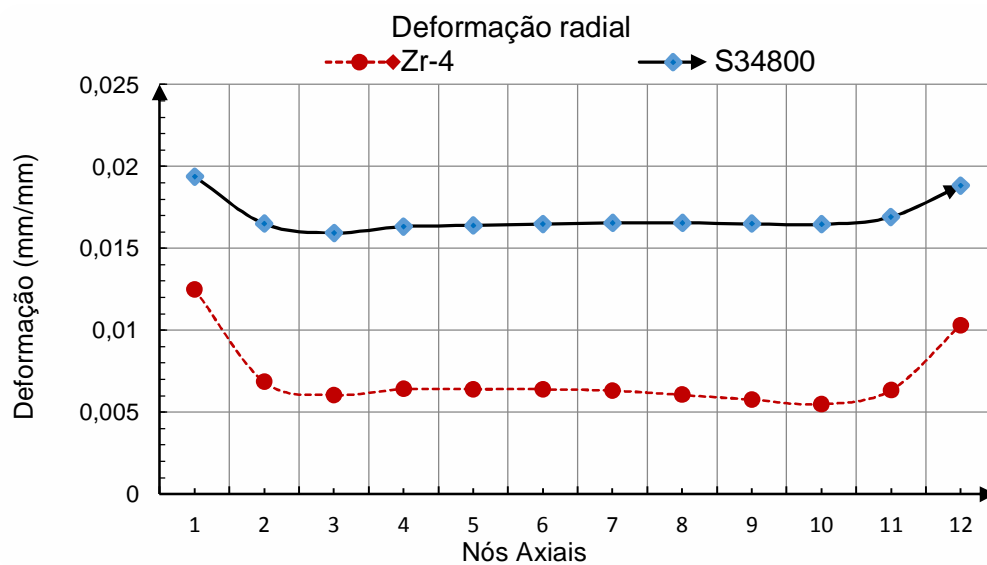


FIGURA 4.13 Deformação radial, caso TSQ002, aço e ZR-4

Nas Figuras 4.11, 4.12 4.13, apresentam-se as deformações axiais, circunferencial e radial para o Zircaloy e para aço.

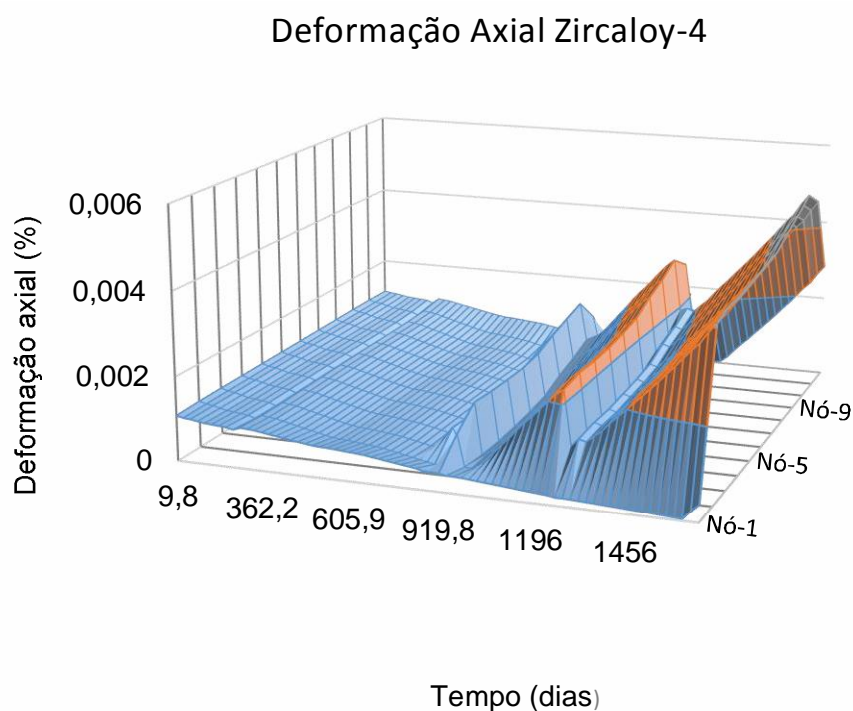


FIGURA 4.14 - Deformação axial nodal caso TSQ002, Zircaloy

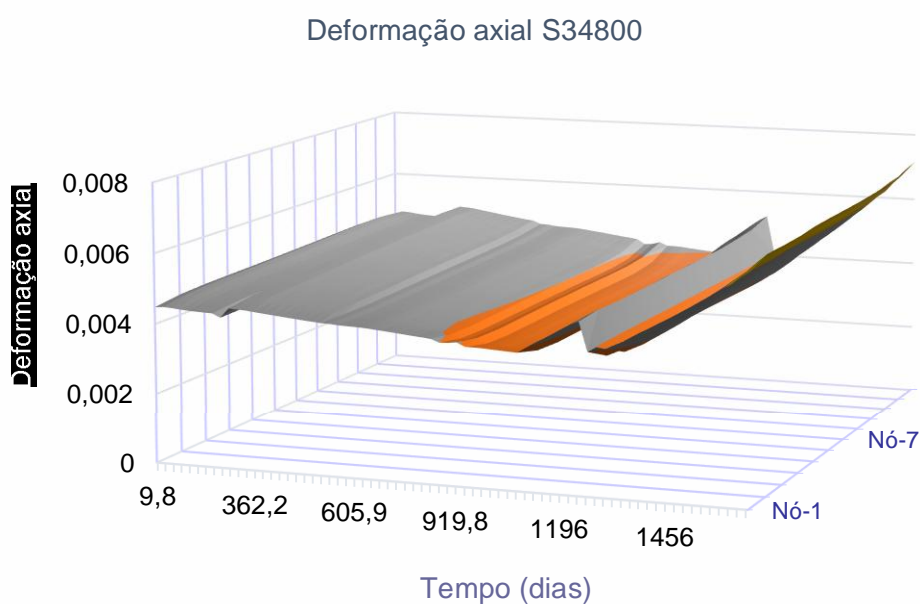


FIGURA 4.15 - Deformação axial, caso TSQ002, AISI- 348

Na Figura 4.14 apresenta-se a deformação axial nodal caso TSQ002, Zircaloy e na Figura 4.15 apresenta-se a deformação axial, caso TSQ002, 348. Na Figura 4.16 apresenta-se a deformação circunferencial do 348.

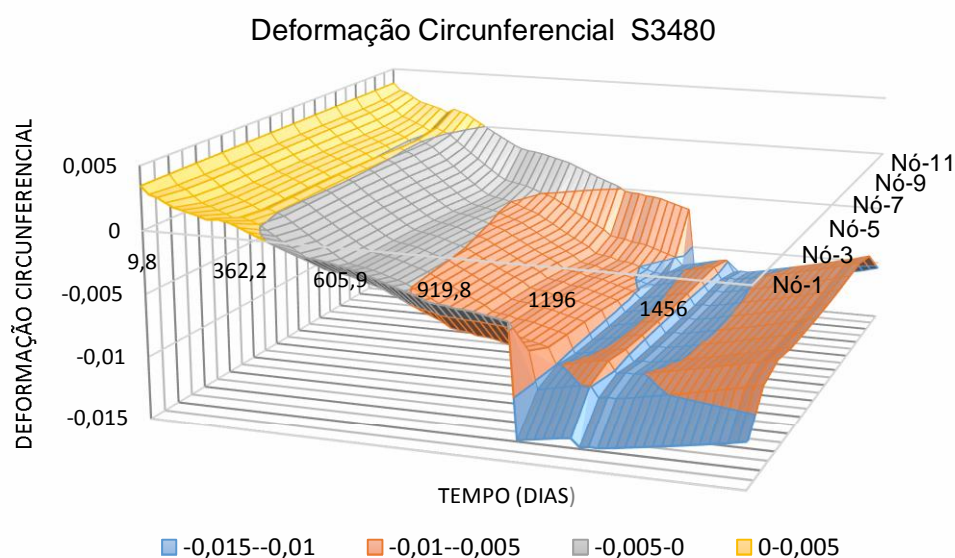


FIGURA 4.16 -Deformação circunferencial TSQ002, AISI- 348

4.2.3 Energia armazenada

Uma das consequências da reduzida condutividade térmica do combustível dióxido de urânio é a alta temperatura. Na pastilha, desenvolvem-se grandes gradientes de temperatura para dirigir o fluxo de calor para fora. Isso significa que há uma quantidade relevante de energia armazenada no combustível, cerca de 97,4%. Verifica-se que, no caso do revestimento com Zr-4, aponta-se uma energia ligeiramente superior, uma vez que a condutividade do Zircaloy é menor. Na Figura 4.17 apresenta-se a energia armazenada na forma nodal (Zircaloy).

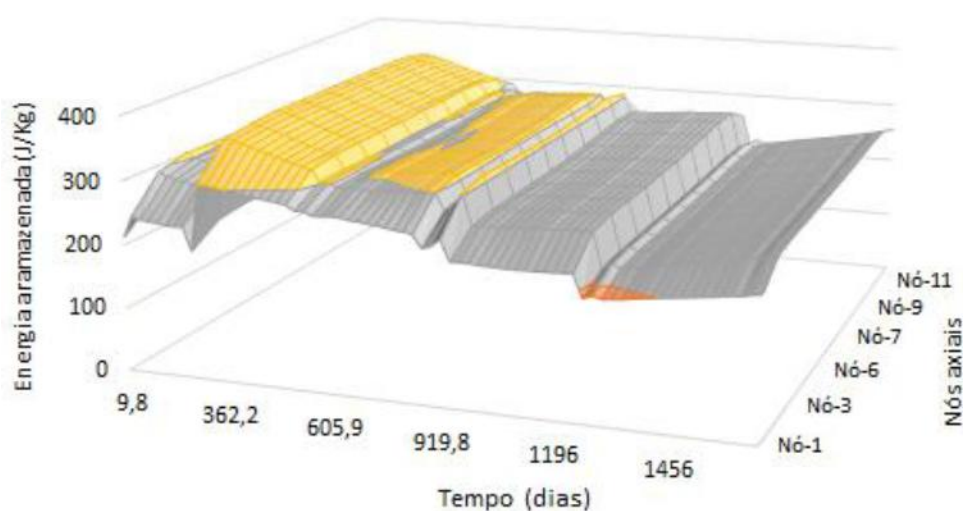


FIGURA 4.17 – Energia armazenada no combustível- Zr-4

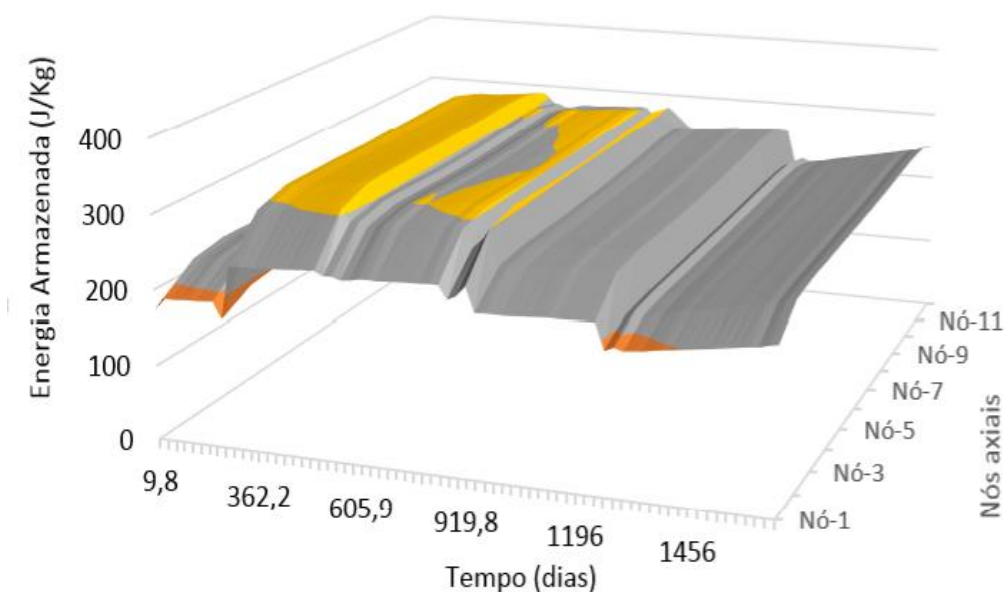


FIGURA 4.18 – Energia armazenada TSQ002, AISI - 348

Na Figura 4.18 apresenta-se a energia armazenada na forma nodal (Aço-348). O cálculo da energia armazenada é uma integral da variação de temperatura, tendo como fator a capacidade térmica do combustível e a densidade. O gradiente térmico é menor no aço; logo verifica-se um decréscimo da energia armazenada. A quantidade de energia armazenada, revestido por aço é cerca de 94% em relação ao *Zircaloy*. Portanto, ocorre um decréscimo de 6% na energia armazenada no combustível.

4.1.4 Análise de gases de fissão

As investigações no qual o ciclo de irradiação é abaixo de 62 GWd/MTU relativas aos gases produzidos por fissão (*Fission Gas Release – FGR*) foram realizadas no reator de teste BR-3 com as varetas 28i6 e 38i6 da Westinghouse. As pesquisas com as varetas 28i6 com queima de 60,1 GWd/MTU e FGR de 21,8%, a vareta 38i6 irradiada até 61,5 GWd/MTU e FGR de 33,8%. Apresentam-se na Tabela 4.12 os resultados da vareta 28i6 revestida de aço e de *Zircaloy*.

TABELA 4.12 Westinghouse BR-3 Vareta 28i6 –comparação com revestimento de Zircaloy e de aço AISI 348

Parâmetro	ZR-4	SS-348	Comparação
Ciclo	1137	1137	Idêntico
Bu (GWd/MTU)	55,04	55,04	Idêntico
Potência (kW/m)	24,93	24,93	Idêntico
FGR (%)	13,45	12,73	Reduz 5,35%
Temperatura do UO ₂ (°C)	687,4	684,5	Reduz 4,11%
Fech. da folga (Burnup)	14,04	24,43	Amplia a 74%
Deformação axial (Máx)	0,009781	0,009852	Amplia 7,26%
Deformação axial (Min)	0,000579	0,001556	Amplia 168%
Deformação circunferencial (Max)	0,001116	0,001356	Amplia 21,5%
Deformação circunferencial (Min)	-0,00665	-0,00665	Idêntico
Deformação Radial (Max)	0,010427	0,011394	Amplia 9,27%
Deformação Radial (Min)	-0,00501	-0,00264	Reduz 47,3%
Deform. (elast+plast)	0,18167	21,65%	Amplia 19,2%
Tempertura. int. revest. (Min °C)	268	267	Reduz 3%
Temperatura. int. revest. (Máx °C)	378	372	Reduz 1%
Temperatura. do revest. (Máx °C)	353	265	Reduz 25%
Temperatura. do revest. (Min °C)	265	349	Amplia 31%
Temperatura. ext/revest. (Max °C)	267	263	Reduz 1,62%
Temperatura. ext/revest. (Max °C)	378	327	Reduz 3%
Máxima Temp do UO ₂	1659	1671	Amplia 7%

A temperatura média do dióxido de urânio, quando revestido com aço austenítico, é inferior à temperatura obtida com *Zircaloy*. Justifica-se essa diferença, em razão de a condutividade térmica do aço ser superior, e também em função dos valores relativos do calor específico.

Em uma análise parcial, teríamos disparidades por causa do calor específico do aço ser cerca de 0,500 J/(gK) em relação ao do Zircaloy de 0,285 J/(g-K), dentre os casos pesquisados relativos aos gases de fissão. A vareta 28i6, foi irradiada no reator BR-3, com comprimento de 97,53 cm revestido com Zircaloy-4 para PWR. A Figura 4.19 apresenta a deformação axial (aço 348) e na Figura 4.20 para o Zircaloy. Comparativamente verifica-se as diferenças na amplitude da deformação

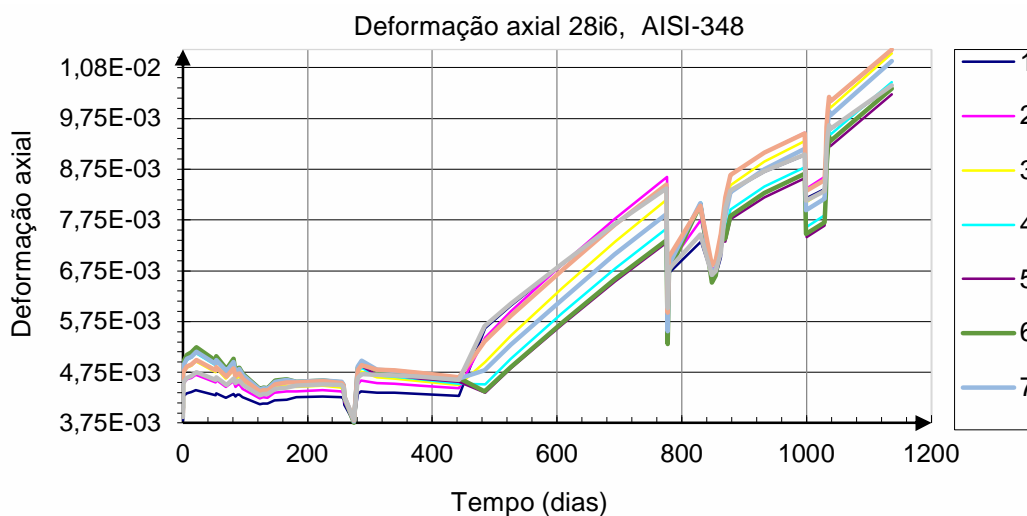


FIGURA 4.19 - Deformação axial, caso 28i6 revestimento AISI-348

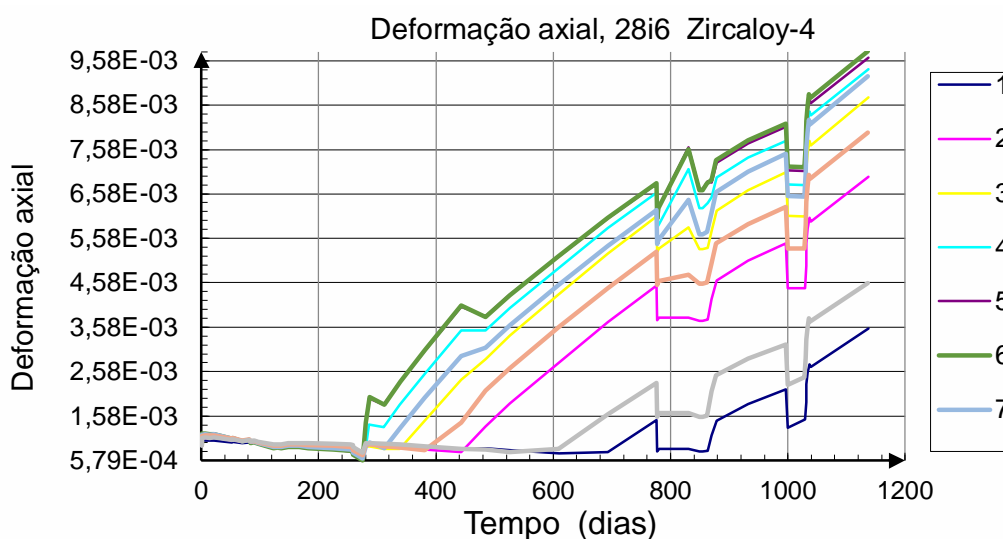


FIGURA 4.20 - Deformação axial, vareta 28i6 revestimento Zircaloy-4

O combustível enriquecido a 6,42% com isótopo U^{235} , com ciclo de irradiação de 1137 dias. Nesse caso, a simulação desenvolve-se com 55 passos de tempo, nove nós axiais ao longo da vareta e quinze nós radiais atuantes na pastilha. O combustível irradiado atinge 55,04 GWd/MTU, com potência média linear de 24,93 kW/m. A temperatura de entrada da água é de 254,85 °C e a pressão interna é de 15,6 MPa. A temperatura no centro da vareta, quando revestido com aço é inferior ao do Zircaloy. Uma vez que as temperaturas do combustível são inferiores e os gases de fissão contam com uma parcela térmica, a quantidade de gases gerados no aço é inferior da obtida no Zircaloy.

A deformação axial produzida pelo aço é maior devido à expansão térmica. No teste prático realizado com Zircaloy a vareta gerou uma quantidade de produtos de fissão gasoso considerável, mas com baixa quantidade de hidretos. Nas Figuras 4.6 e 4.7, apresenta-se a deformação axial do revestimento, para os dois casos, aço e *Zircaloy*. Na Tabela 4.13, apresenta-se um comparativo, NO Westinghouse BR-3 vareta 30i8 revestida com Zircaloy-4 e com aço AISI-348.

TABELA 4.13 Westinghouse BR-3 Vareta 30i8 –comparação com revestimento de Zircaloy e aço AISI-348

Parâmetros	Zr-4	SS-348	Comparação
Ciclo	860	860	Idêntico
Bu (GWd/MTU)	49,73	49,73	Idêntico
Potência (kW/m)	27,05	27,05	Idêntico
FGR (%)	14,98	13,75	Reduz 8%
Temp. do UO ₂ (°C)	731,6	685	Reduz 6%
Fech. da folga (Burnup)	5,04	23,57	Amplia 367%
Deform. axial (Máx)	0,08978	0,010487	Amplia 88%
Deform. axial (Min)	0,000842	0,0003764	Reduz 55%
Deform. circunf. (Máx)	0,000806	0,004181	Amplia 418%
Deform. circunf. (Min)	-0,00547	-0,01212	Amplia 121%
Deform. Radial (Máx)	0,010304	0,021314	Amplia 126%
Deform. Radial (Min)	-0,0036	0,0048	Amplia 33%
Deformação (elast+plast)	0,27%	0,36%	Amplia 30,1%
Temp. Int. revest. (Máx °C)	409,40	402,22	Reduz 1,7%
Temp. Int. revest. (Máx °C)	264,53	264,07	Reduz 0,01%
Temp Média revest. (Máx °C)	377,81	374,07	Reduz 0,09%
Temp Média revest. (Min °C)	262,77	262,54	Reduz 0,08%
Temp. ext/revest. (Máx °C)	346,22	345,50	Reduz 2%
Temp. ext/revest (Min °C)	261,01	261,01	Idêntico
Máxima Temp do UO ₂	1998,72	1956,61	Reduz 2,1%

A segunda vareta, também foi produzida pela Westinghouse, é 30i8 irradiada no mesmo reator BR-3. As varetas 28i6 e 30i8 apresentam as mesmas dimensões geométricas; diferem quanto à potência linear e à extensão do ciclo de irradiação.

Neste caso, os resultados se repetem. As temperaturas do combustível e revestimento são inferiores, quando utiliza o aço como revestimento.

Deste modo, a quantidade de gases gerados por fissão sofrem uma redução de 8%, e as deformações no aço são superiores em 30% em relação ao Zircaloy; nessa situação, a vareta 30i8 apresenta um ciclo de irradiação de 49,73 GWd/MTU. No final do ciclo, com 860 dias de irradiação a vareta atinge um acúmulo de hidretos da ordem de 173 ppm. A Figura 4.21 apresenta a temperatura central do combustível com revestimentos de Zircaloy.

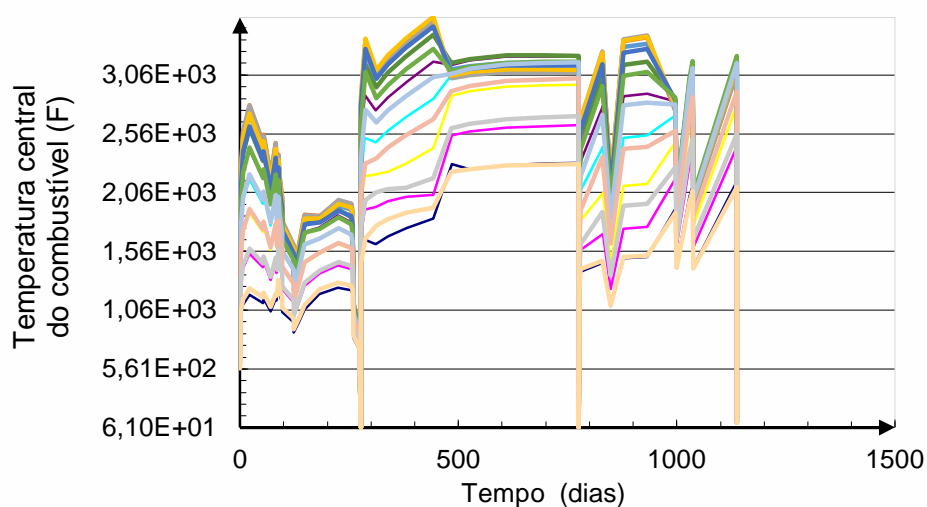


FIGURA 4.21 - Temperatura central, vareta 30i8, Zircaloy-4

A temperatura central da vareta apresenta o mesmo formato da curva potência linear. Na prática, a potência linear deve ser reduzida no decorrer do ciclo; nessa situação não se verifica uma redução, mas acréscimo de potência durante o ciclo de irradiação.

4.2.4 Rampas de potência

Mesmo após vários anos de operação normal, a abertura da folga entre o combustível-revestimento pode fechar, apresentando uma gama de interações resultante de vários fenômenos, que viabilizam a falha do combustível, como a corrosão sob tensão, gerada pelas altas temperaturas e irradiação. O gradiente térmico e o contato induzem um ciclo de tensões e deformações circunferenciais motivando à expansão diferencial da interface, entre a pastilha e o revestimento.

Na presença de produtos de fissão corrosivos, ou seja a concentração do iodo e as deformações promovidas pela tensão específica e nível de queima acima dos limites, os efeitos típicos da corrosão sob tensão, como rachaduras podem produzir uma falha estrutural na vareta. A rachadura do revestimento pode se espalhar a partir da superfície interna, provocando a falha do combustível.

Na década de 1970, relatam-se falhas com frequências significativas em varetas, motivadas pelo fechamento da folga, portanto com o estabelecimento da PCI, principalmente em reatores de água fervente. Dessa forma, inicia-se como contramedida o fomento aos projetos de pesquisas internacionais e cooperação. A identificação dos processos de troca de calor, com modelagem mais realista para o contato físico entre sólidos associados à corrosão sob tensão. Inicialmente, os casos de rampas escolhidos foram investigados na Suécia, no reator *Studsvick*. Os testes com rampas foram iniciados em 1976, destinado para combustíveis utilizados em PWR e BWR com varetas pré-irradiadas.

Um grupo de projetos investigativos relativos ao comportamento e desempenho do combustível nuclear em condições de elevação rápida da potência, incluindo as manobras no início do ciclo de irradiação, foi selecionado grupos com características semelhantes.

Os principais testes de rampas investigados foram os projetos: (i) OVER-RAMP; (ii) SUPER-RAMP; (iii) INTER-RAMP. O programa de pesquisa FUMEX-III utiliza o projeto desenvolvido na Suécia, com os mesmos casos, visando validar códigos de desempenho de combustíveis.

O projeto INTER-RAMP sob determinadas condições estabelece parâmetros seguros de operação, para combustíveis empregados em reatores do tipo BWR, fabricados pela ASEA-ATOM da Suécia. Os limites de PCI foram pesquisados, com ciclos de queimas entre 10 a 20 GWd/MTU [40]. A taxa de rampa nos projetos SUPER-RAMP é 8 - 11 kW/(m-min) e para o OVER-RAMP 4 - 5 kW(m-min). O programa OVER-RAMP pesquisou 39 varetas de reatores PWR, com potência linear entre 14 – 25 kW/m, com queimas entre 12 a 31 GWd/MTU. O Projeto SUPER-RAMP, contabiliza 28 varetas para reatores do tipo PWR, fabricadas pela *Kraftwert Union AG/Combustion Engineering (KWU/CE)* e para BWR. O projeto SUPER-RAMP, realizado com varetas fabricadas pela *KWU/CE* e *Westinghouse*. Na simulação, utilizaram-se as varetas para reatores de água pressurizada, PK6-2, PK6-3 e PK6-S, com ciclos de queima de 33-45 GWd/MTU.

Investigando-se o mecanismo da PCI, o período completo do ciclo efetivo de queima total é de 901 dias.

O comportamento investigado restringe-se aos reatores *PWRs*. Desse modo, o projeto investigativo escolhido foi o SUPER-RAMP. Para verificar o comportamento das rampas de potência utilizou-se os casos descritos nas varetas PK6-2, PK6-3 e PK6-S. As taxas de incremento de potência linear são mais altas que as típicas de operação de reatores PWR em ciclos de operação. Na Tabela 4.14, apresentam-se os limites de rampa.

TABELA 4.14 - Limites de rampa para *Super Ramp* PK6

	Queima	Pico (falha)	(RTL-CPL)
PK6	33,6-36,8(GWd/MTU)	430-440(KW/cm)	189-185 Δ(KW/cm)

Neste caso se estabelece parâmetros específicos para pampas, em que os valores finais são denominados (*Ramp Terminal Level - RTL*) de 440 W/cm, potência máxima linear e (*Conditioning Power Level - CPL*) de 185 W/cm para varetas, com geração de gases de fissão reduzidos, nos quais os grãos apresentam o dobro do diâmetro normal. Nas rampas, inicialmente, a folga sofre um decréscimo gradual, reduzindo-se até que a superfície do dióxido de urânio entrem em contato com o revestimento. A Tabela 4.15, apresenta a base de casos *Super Ramp* PK-6.

TABELA 4.15 - Base de casos, *Super Ramp* PK6, características das varetas

Vareta	Final (kW/m)	Tempo(h) (Hrs)	Rampa (kW/m)	Taxa de Rampa (kW/mh)	Tempo RTL (min)
PK6/2	25	24	40	540	720
PK6/3	25	24	43	540	720
PK6/S	25	24	41	600	720

No aço, o contato ocorre após ao do Zircaloy, esta é a vantagem do aço reconhecido pela deformação ovalada do corpo da vareta devido a dilatação térmica, acima entre 10 - 20 GWd/MTU, ou além dos 50 GWd/MTU dependendo da potência linear.

A redução gradativa da folga é dependente da potência linear LHGR média aplicada na vareta, caso seja inferior a 40 kW/m. O fechamento da folga é função do inchamento do combustível, da temperatura e da pressurização inicial do hélio e da iteração dinâmica da condutividade térmica da mistura gasosa. Na Tabela 4.16, apresentam-se os parâmetros de rampa de potência, em que a potência linear antes do incremento de potência varia 14 kW/m a 25,5 kW/m.

TABELA 4.16 – Parâmetros de Rampa, *SUPER-RAMP*
varetas PK6-2, PK6-3 e PK6-S

Casos de Teste	PK6/2	PK6/3	PK6/S
Pré-condição de rampa (kW/m)	25	25,5	24
Tempo de estabilização (horas)	24	24	24
Taxa subida da Rampa (W/m-min ⁻¹)	90	90	100
Potência final da rampa (kW/m)	40	43	41
Tempo de estabilização (minutos)	720	720	720

Os reatores são sujeitos à rampa de potência naturais, após a ocorrência de uma parada, por exemplo, com taxas plausíveis a potência incrementa de 0 a 30% da máxima, com taxas de 10%/hora. Após a rampa existe um período de estabilidade durante 20 horas de operação; a segunda etapa é o incremento de 30 a 100% da potência com taxas de 3% a 10%/hora e estabilização de 20 horas. Essas rampas são normais na operação de reatores. O objetivo dos testes consiste em estabelecer ou situar os limites máximos para PCI e determinar qual seria a alteração da potência linear limite, na qual iniciaria a desfragmentação do combustível, o colapso [104]. O diâmetro do grão é de 22 μm , sendo normalmente grãos com diâmetros de 10 a 12 μm e a taxa linear de potência está situada entre 14-26 KW/m. Neste caso, utiliza-se a versão adequada ao revestimento formado de aço inoxidável tipo 348. O comportamento do combustível revestido de aço se dá em ciclos de irradiação reduzidos de até 40 GWd/MTU. O aço apresenta-se relativamente superior nas rampas de potência; as deformações são menores que no Zircaloy. A Tabela 4.17 apresenta parâmetros de entrada do combustível utilizado para o teste *SUPER-RAMP* [105].

TABELA 4.17 Parâmetros do combustível utilizado no SUPER-RAMP

Parâmetros	Valores
Material da pastilha	UO ₂
Material do revestimento	Zr-4/AISI-348
Comprimento da coluna UO ₂ (mm)	315
Enriquecimento do UO ₂ (%)	2,985
Diâmetro externo da pastilha (mm)	9,144
Diâmetro interno do revestimento (mm)	9,29
Diâmetro externo do revestimento(mm)	10,74
Diâmetro do folga (mm)	146 µm
Diâmetro do grão	22 µm
Pressão do Hélio (MPa)	1,38-2,25
Queima (GWd/MTU)	36
Taxa de rampa (W/cm-min)	90-100
Potência linear inicial (kW/m)	25
Potência final (kW/m)	40 - 43

As características elásticas e plásticas do aço são superiores. No que tange ao comportamento térmico, a condutividade do aço é superior à do Zircaloy na faixa de operação de 280 °C a 340 °C. A deformação axial do revestimento reduz-se em relação ao Zircaloy em 19,97%; a deformação circular do aço é 14,44% maior, devido ao coeficiente de expansão térmica. A deformação radial do aço também é superior em 8,36%.

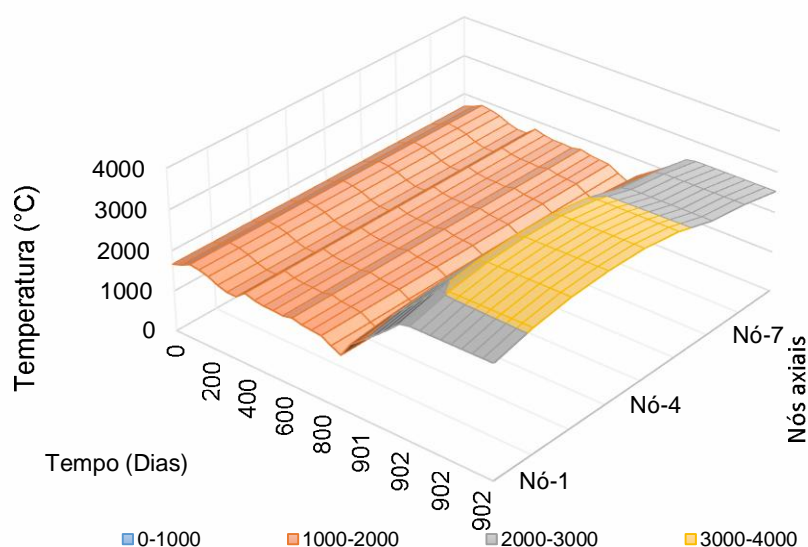


FIGURA 4.22 – Temperatura no centro da pastilha, PK6-2, aço - 348

A Figura 4.22 apresenta a variação da temperatura central da pastilha. A Tabela 4.18 apresenta os resultados da simulação do teste SUPER RAMP PK6-S, PK6-2 e PK6-3 revestido por 348 [101-105].

TABELA 4.18 Resultados *SUPER RAMP* PK6-S, PK6-2 e PK6-3 / SS-348

Parâmetros	PK6-S	PK6-2	PK6-3	Média
Deformação axial (%)	0,0075	0,0072	0,0082	0,0076
Deformação circular (%)	0,0049	0,0046	0,0057	0,0051
Deformação radial (%)	0,0087	0,0087	0,0087	0,0087
Deformação axial permanente (%)	3×10^{-7}	3×10^{-7}	3×10^{-7}	3×10^{-7}
Deformação permanente circular (%)	0,0031	0,0031	0,0031	0,0031
Tensão axial (MPa)	225,22	261,74	225,22	237,40
Tensão circular (MPa)	224,32	264,97	264,97	251,42
Tensão efetiva (MPa)	224,60	263,15	263,15	250,30

A finalidade do teste era modelar o mecanismo de falha PCI, gerado pelas rampas de potência linear. As rampas são formadas por degraus de potência. Os resultados foram aferidos por intermédio do IPEN-CNEN-SSP, adequado ao aço inoxidável.

Para verificação do aço AISI-348 utilizaram-se os casos documentados pela OCDE, pertencente ao projeto FUMEX-III. A Tabela 4.19 apresenta resultados do Super Ramp com revestimento de aço, os casos PK6-S, PK6-2, PK6-3.

TABELA 4.19 Resultados térmicos *SUPER RAMP* PK6-S, PK6-2 e PK6-3
Revestimento de aço AISI-348

SUPER-RAMP – PWR (AISI-348)	PK6-S	PK6-2	PK6-3	Média
Condutância da folga (KW/m ²)	551,5	681,8	681,8	638,4
Fluxo de calor na superfície (KW/m ²)	291,9	308,1	308,1	302,7
Pressão no refrigerante (MPa)	14,5	14,5	14,5	14,5
Energia Armazenada (cal/g)	73,7	79,6	75,5	76,2
Temperatura central UO ₂ (K°C)	1,802	1,899	0,467	1,389
Temperatura da superfície UO ₂ (°C)	1,066	1,043	1,115	1,075

O projeto o SUPER-RAMP apresentou na prática um caso de falha não utilizado, mas para combustíveis com grãos considerados grandes e queima de 36 GWd/MTU para revestimento de Zircaloy-4. A Tabela 4.20 apresenta os resultados do revestimento com aço AISI – 348, PK6-S, PK6-2, PK6-3

TABELA 4.20 – Resultados Super Ramp PK6-S, PK6-2, PK6-3, aço 348

Parâmetros	PK6-S	PK6-2	PK6-3	Média
Temperatura da água (°C)	304,4	304,4	304,4	304,4
Deformação axial do UO ₂ (%)	3,79	3,73	3,93	3,82
Pressão do gás hélio (MPa)	8,50	8,25	8,62	8,45
Potência linear (KW/m)	45,1	44,0	47,6	45,6
Pressão interna da folga (MPa)	51,9	49,6	57,1	52,9
Deformação axial, UO ₂ (%)	0,0149	0,0146	0,0152	0,0148
Deformação circunferencial (%)	0,0195	0,0181	0,0208	0,00194
Deformação axial, (%)	0,00196	0,0018	0,0026	0,00196
Taxa de fluência	0,0049	0,0049	0,0049	0,00343
Gases de fissão (%)	17,03	14,54	15,96	15,85
Queima (GWd/MTU)	34,5	34,5	34,5	34,5
Inchamento do UO ₂ (%)	$7,2 \times 10^{-8}$	6×10^{-7}	7×10^{-8}	$2,5 \times 10^{-7}$
Fluência no revestimento	7×10^{-8}	9×10^{-9}	6×10^{-7}	4×10^{-8}

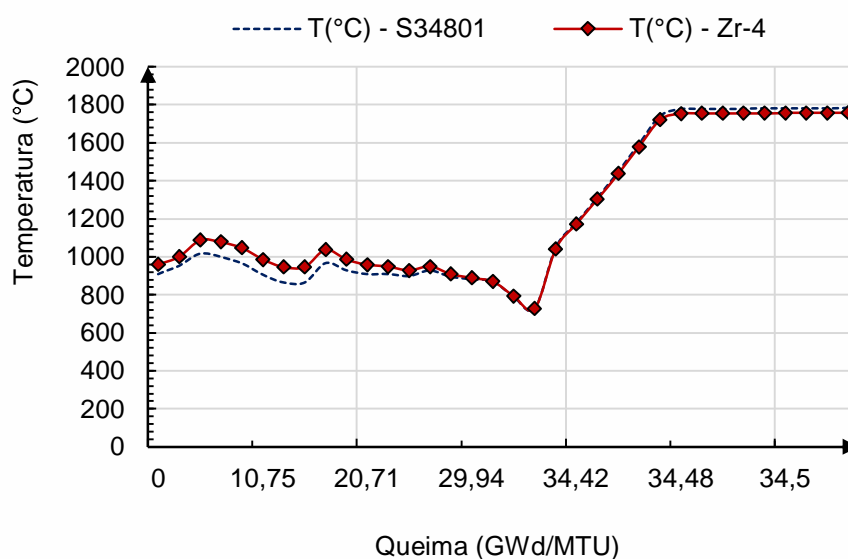


FIGURA 4.23 - Temperatura central do combustível PK6-S

Figura 4.23, a quantidade de gás produzido por fissão são equivalentes com ambos os revestimentos. No projeto SUPER-RAMP as varetas foram irradiadas no reator *KK- Obrigheim*, localizado na Alemanha. Aplica-se um degrau de potência de 18,5 kW/m para 45 kW/m. A taxa de rampa foi de 90 W/(cm-min). As rampas foram produzidas no reator de pesquisa R2, Studisvck na Suécia, com potência linear final saltando de 33 a 45 KW/m. Na Figura 4.24, verifica-se o fechamento da folga, no caso do Zircaloy, o fechamento ocorre em 14,58 GWd/MT; com o aço, a folga fecha-se em 34,14 GWd/MTU.

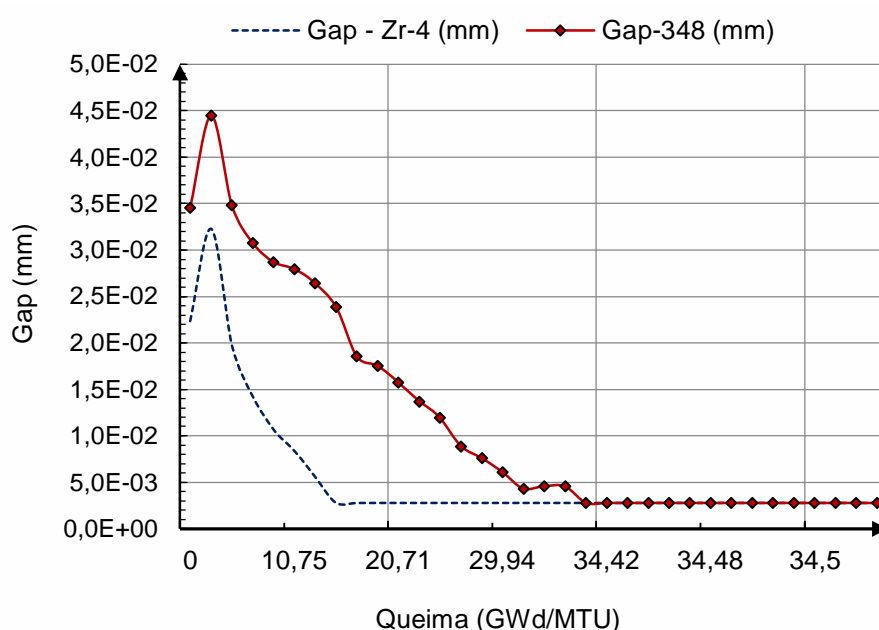


FIGURA 4.24 – Folga Zircaloy e aço AISI-348, PK6/S

4.3 Transientes

As simulações dos transientes de reatividade são realizadas em dois passos. No primeiro passo é simulado o estado permanente, quando se executa o ciclo de irradiação, nesse caso utiliza-se o código IPEN-CNEN/SSP, gera um arquivo de saída padrão e um arquivo de inicialização chamado de RESTART, que alimenta os dados do código de transientes IPEN-CNEN/SST, em que executa-se a simulação do transiente, um pulso de entalpia com largura reduzida de 4,4 ms *Full Width Half Maximum* (FWHM). As varetas denominadas de HBO fazem parte de uma série de varetas que foram aplicados pulso de entalpia de 4,4 ms, em que variou-se a o valor máximo de entalpia aplicada de 155 a 452 J/(gUO₂).

A vareta escolhida genericamente será chamada de HBO-5. Uma vareta combustível submetida a pulso de entalpia no reator NSRR, originalmente irradiada em um PWR 17x17, a vareta revestida de *Zircaloy-4*. Nesse caso, a vareta é dividida em 11 nós axiais e 45 nós radiais. A irradiação é simulada pelo FRAPCON. O ciclo de irradiação no estado estacionário é de 1308,1 dias. Dessa maneira, a queima atinge até 44 GWd/MTU; o fechamento da folga no caso do zircaloy ocorre após 850 dias de irradiação, em que a queima atinge 27,80 GWd/MTU. Os gases produzidos por fissão perfazem 0,7% no final do ciclo. A Tabela 4.21 apresenta as dimensões físicas da vareta, HBO-5 irradiada em um PWR 17X17.

TABELA 4.21 - Dimensões físicas da vareta, HBO-5 PWR 17X17

Diâmetro externo do revestimento	0,95 mm
Diâmetro interno revestimento	0,822 mm
Espessura do revestimento	0,640 mm
Rugosidade do revestimento	0,0005
Diâmetro da folga	0,17 mm
Diâmetro da pastilha	8,05 mm
Altura da pastilha	9 mm
Densidade teórica (TD%)	0,95 %
Rugosidade do UO ₂ , (µm)	0,002
Enriquecimento	3,1 %
Átomos (Xe+Kr)/100 fissões	31
Comprimento da folga plenum	21 cm

O caso HBO5 é um exemplo, em que a vareta se degrada, durante o ciclo de irradiação no estado estacionário. O fato é verificado pela quantidade de hidretos depositados no revestimento de Zircaloy; alcançando 438 ppm de hidretos depositados, desta maneira a camada de óxido, ZrO₂ é de 0,05893 mm.

A faixa segura de operação define empiricamente até 400 ppm, praticamente todas as varetas falhadas por pulso de entalpia estão acima de 400 ppm, em relação aos hidretos depositados. No caso HBO-5 revestido de aço, não ocorre o acúmulo de hidretos mas ocorre a fragilização por hélio. A potência linear média durante o ciclo de queima é de 14,71 kW/m. As dimensões geométricas do revestimento são mantidas para o revestimento de aço 348.

A temperatura máxima do combustível atinge 872 °C. Os gases de fissão apresentam um comportamento de crescimento linear até 0,3%, e após o ciclo de irradiação atingir 40 GWd/MTU o crescimento da função, o comportamento é uma forma exponencial. A Figura 4.25 apresenta o perfil de potência com a geração de produtos de fissão gasosos, em particular xenônio e o criptônio resultado da fissão do dióxido de urânio.

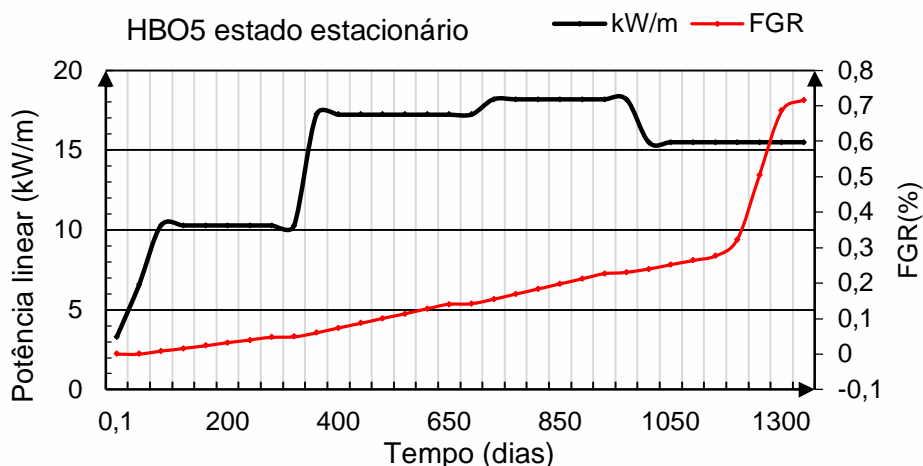


FIGURA 4.25 – Perfil de potência da vareta HBO5

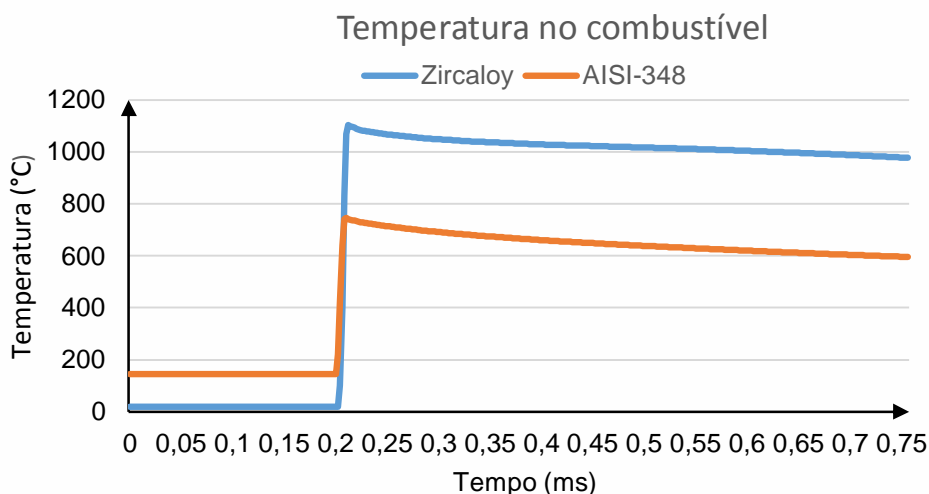


FIGURA 4.26 – Temperatura central do combustível HBO5

No caso, a vareta revestida por *Zircaloy*, no estado estacionário alcançou uma parte da vida útil do combustível com alterações termomecânicas. A Figura 4.26 apresenta a temperatura central do combustível. O Zircaloy sofre um aquecimento maior que o aço, em decorrência da condutividade e do calor específico, sendo que a transferência de calor imediata é adiabática.

A ideia é simular um transiente, quando a vareta apresentar o fechamento da folga e ter iniciado a PCMI, em 27 GWd/MTU. A deposição de hidretos for abaixo de 400 ppm e os óxidos forem acumulados. Após a etapa de irradiação, a vareta é retirada e cortada, e sofre uma redução no comprimento, sendo montada em reator de testes existente no NSRR. A Figura 4.27 apresenta a deformação na pilha de combustível HBO5.

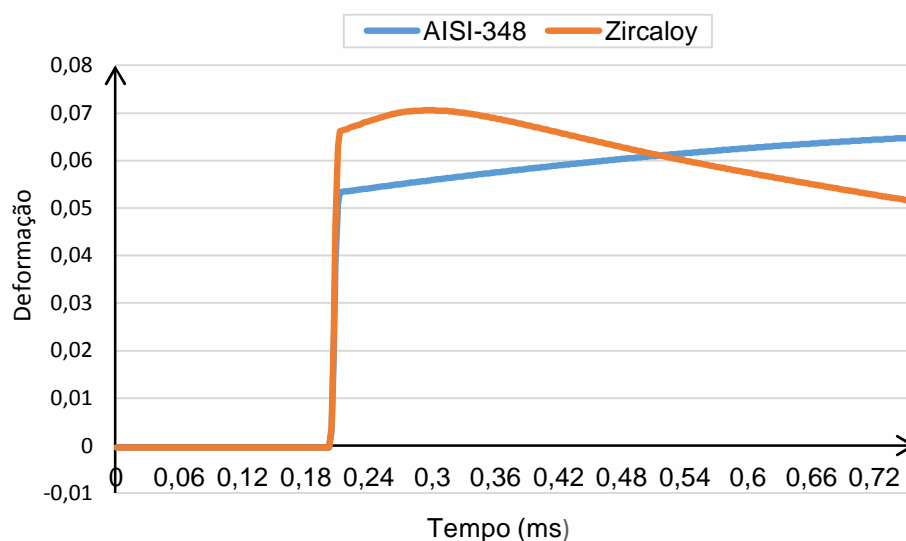


FIGURA 4.27 – Deformação na pilha de combustível HBO5

Na Figura 4.28, verifica-se que a deformação axial na pilha de combustível é inferior no início, mas suplanta o *Zircaloy*.

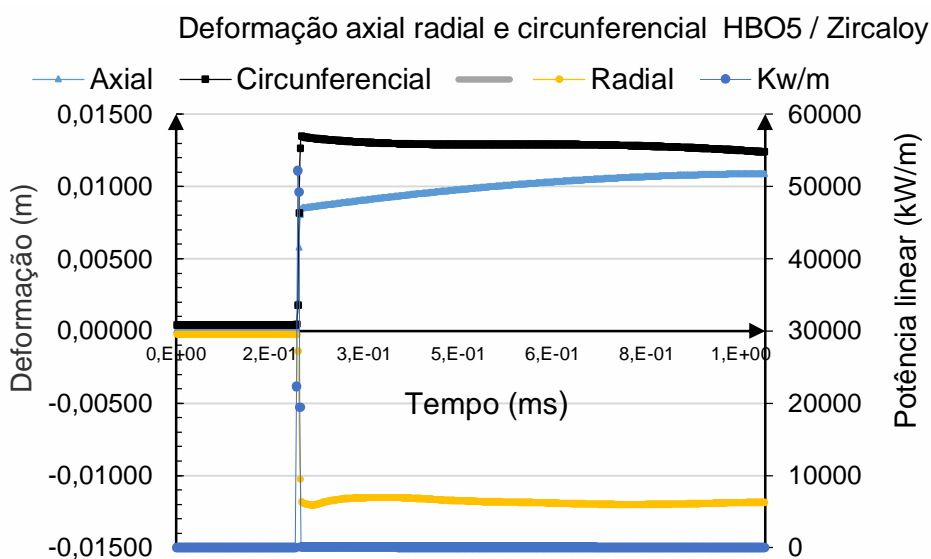


FIGURA 4.28 – Deformação axial no combustível. HBO5 após pulso

A Figura 4.28 apresenta as deformações no revestimento quando utiliza-se o Zircaloy. Nesse caso, os critérios aplicados, chamados de critérios de ductilidade, verificam a deformação máxima.

Na simulação, aplica-se o pulso de entalpia com 4,4 ms no combustível. Deste modo, por meio do FRAPTRAN modificado para o aço, realizam-se alguns testes verificando-se que a vareta falhou e qual o comportamento comparativo em relação ao Zircaloy. A Tabela 4.22 apresenta os parâmetros do transiente na vareta HBO5, pulso de (41,295 MW/m) com 4,4 ms, limiar de ruptura.

TABELA 4.22 - HBO5 transiente de reatividade

Pulso de entalpia (kW/m)	41295,93	
Largura do pulso (ms)	4,4	
Parâmetro	348	Zircaloy-4
Deformação circunferencial	0,018414	0,013277
Deformação axial	0,01126	0,011842
Deformação radial	-0,0145	-0,00026

Na Figura 4.29 apresenta-se a deformação radial do revestimento para o aço e para o Zircaloy de forma comparativa.

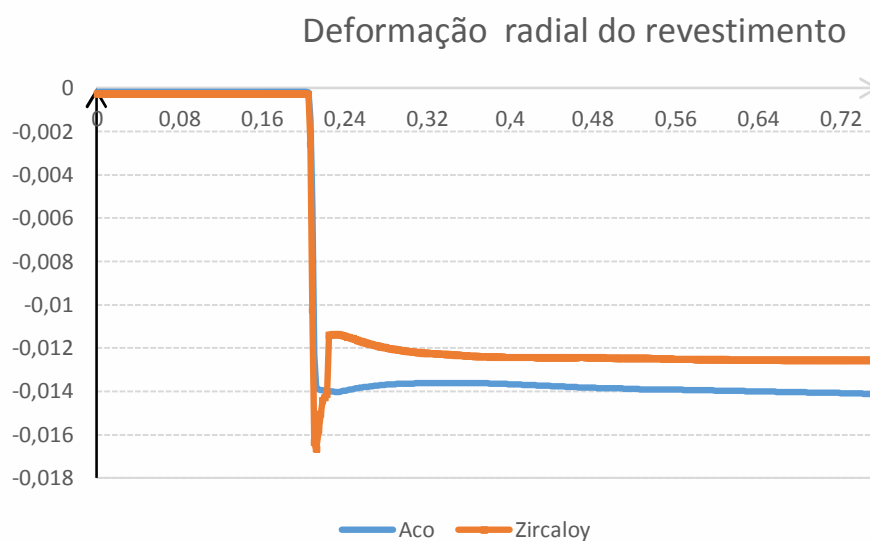


FIGURA 4.29 – Deformação radial no revestimento aço 348 e Zr-4

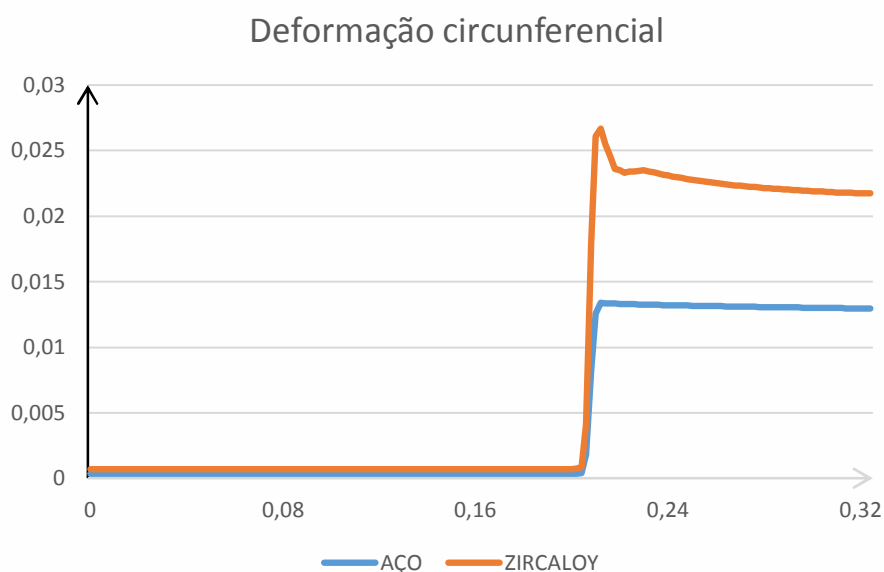


FIGURA 4.30 – Deformação circunferencial no revestimento aço 348 e Zr-4

A Figura 4.30 apresenta a deformação circunferencial do aço em relação ao *Zircaloy*. As temperaturas relativas ao combustível são inferiores às obtidas com *Zircaloy* e as deformações sofridas pelo aço são relativamente inferiores. Ambos os revestimentos suportam o pulso de entalpia proposto. Entretanto, nos reatores do passado que utilizaram aço as dimensões do combustível eram diferentes e a densidade teórica do combustível, TD alcançava 93%, atualmente é de 95%.

O reator *Yankee Rowe*, na versão denominada Core-A, quando se utilizou o aço como revestimento o diâmetro da pastilha era 7,47 mm, a densidade teórica era 93 %, a espessura do revestimento era de 0,53 mm e o diâmetro da folga era de 0,11 mm e não havia hélio pressurizado na folga, com Zr-4 é de 0,64 mm, com o aço a espessura do revestimento reduz em 14%, portanto os parâmetros eram distintos dos atuais [15].

No reator *La Crosse* um BWR que utilizou aço 348 como revestimento a dimensão da folga entre o revestimento e o combustível não segue o padrão adotado para *Zircaloy* o raio da folga era 0,1 mm, com *Zircaloy* o padrão da época era 0,12 mm [1].

5 CONCLUSÃO

A conversão dos códigos originais proposta foi realizada para suportar o revestimento de aço austenítico tipo 348, relativo aos códigos de desempenho para combustíveis nucleares. As versões aqui denominadas IPEN-CNEN/SSP e IPEN-CNEN/SST, destinada para a condição permanente e transiente, contam com o mesmo número de rotinas, pacotes e bibliotecas codificadas em linguagem FORTRAN, permitindo as mesmas funcionalidades. O resultado da pesquisa possibilitou que as características fundamentais relativas à operação e à simulação dos códigos de desempenho fossem herdadas da arquitetura do FRAPCON e FRAPTRAN nas versões recompiladas IPEN-CNEN/SS. Sumariamente, os códigos compilados apresentam as seguintes características:

- (i) Os códigos de desempenho IPEN-CNEN/SSP e IPEN-CNEN/SST são flexíveis, podendo simular uma vasta gama de combustíveis UO_2 ou $(U-Pu)O_2$ e $(UO_2-Gd_2O_3)$;
- (ii) Os novos códigos apresentam limites de irradiação de até 62 GWd/MTU;
- (iii) A modelagem matemática e da mecânica dos sólidos originais embasados nos métodos das diferenças finitas e elementos finitos, foi herdada sem perda das funcionalidades na nova versão. O modelo de nodalização foi mantido com o mesmo número de nós axiais, até 18 nós ao longo da direção axial da vareta, e até 40 nós radiais para pastilha cerâmica; são idênticos à versão original do PNNL. Quanto ao número de passos de tempo, continua o valor de 400, no estado permanente. Observa-se que, no estado transiente, as parametrizações temporais também são idênticas, sem a perda das funcionalidades.
- (iv) Os modelos *ANS-54*, FRAPGR (gases de fissão), assim como os modelos mecânicos, FRACAS e FEA (comportamento plástico e elástico), são permitidos para reatores térmicos refrigerados por água leve, e são suportados sem alteração.
- (v) A interligação dos códigos foi estabelecida no que tange à capacidade de simulação do estado permanente, produzindo o arquivo de restart, utilizado para reproduzir as condições finais do estado permanente e simular o estado transiente.

- (vi) Em linhas gerais, as características dos códigos de desempenho IPEN-CNEN-SS, herdaram formalmente todo o conjunto de funcionalidades dos códigos iniciais, utilizados para licenciamento, estritamente, os códigos de desempenho FRAPCON e FRAPTRAN, recomendado pela US-NRC e pela AIEA, e mantidos pelo PNNL.

A seleção do material específico, nesse caso aço AISI-348 para o revestimento do combustível apresenta concordância com as normas regulatórias para os critérios de segurança definidas no documento NUREG-0800 seção 4.2, ou *Standard Review Plan* (SRP). A SRP-4.2 é o documento base de segurança, deste modo o comportamento em condições de irradiação deve apresentar os seguintes comportamentos:

- (i) O sistema de combustível, não pode danificar-se sob uma condição anormal de operação.
- (ii) No caso de danos no sistema do combustível esse, não pode ser tão severo que não seja mitigado pela inserção das barras de controle.
- (iii) O número de varetas danificadas não pode ser sub estimado para um acidente postulado.

O plano SRP abrange o conjunto total de componentes estruturais, o elemento combustível, os bocais, as grades espaçadoras e misturadoras, o conjunto tubos guia e varetas absorvedoras; e o revestimento. Desse modo o conjunto sistema combustível deve reduzir a captura parasitária de nêutrons. Além de suportar os fenômenos de crescimento e densificação promovidos durante o ciclo de irradiação previstos, minimizar as vibrações induzidas pelo fluxo fluídico.

Em linhas gerais, o aço deve apresentar: uma aceitável resistência a corrosão, ou seja, resistir aos danos de natureza radioquímicos impostos no interior do núcleo; apresentar características mecânicas, que suportem aos carregamentos hidráulicos e térmicos com boa estabilidade dimensional em regime permanente e condições de transientes. No que tange aos limites de tensões e deformações axiais de 1% e até 2% para circunferenciais adotados para ligas de zircônio.

Um ponto relevante na pesquisa é a mutabilidade dos modelos utilizados.

Observa-se que os aços utilizados no passado apresentam propriedades semelhantes, em parte, por serem pertencentes à mesma série de aços austeníticos inoxidáveis, os aços do tipo 304, 347 e 348; divergem somente na adição de estabilizadores para reduzir a corrosão intergranular. Desse fato, resulta uma série de propriedades térmicas e mecânicas, que apresentam comportamentos parecidos, como a: condutividade térmica, expansão térmica, calor específico e entalpia. Apesar disso, ocorrem alterações sensíveis em relação aos módulos de elasticidade e cisalhamento, limites de escoamento e de tensão máxima de ruptura, ou seja, a adição de cobalto e tântalo difere da adição de titânio e nióbio que evita a corrosão e endurece o aço, apesar de, percentualmente serem praticamente iguais. O aço 348 é superior aos demais aços austeníticos, mas herda do ferro, com 66% da sua composição uma alta seção de choque de captura, para nêutrons térmicos cerca de 2,8 barns. No caso de exposição radiológica o cobalto pode tornar-se ativo, mas sabe-se, que os isótopos ativos, como o ^{60}Co , decorrem de reações de transmutação em reatores que utilizam ligas à base de zircônio.

No estado permanente, foram desenvolvidos testes. Os casos, que formam um conjunto de resultados coerentes, são disponibilizados pela Agência Internacional, PNNL. Para os transientes, a base de casos do FUMEX-CRP foi extensamente utilizada. Os resultados comparativos sob irradiação das varetas combustíveis revestidas de aço inoxidável 348 refletem as diferenças entre as propriedades dos materiais. Utilizando-se a proposta de manter os parâmetros dos arquivos de entrada, e alterando-se somente o tipo de revestimento, observa-se que:

- I. A temperatura no revestimento é inferior à obtida nas ligas à base de zircônio, mantendo uma média 4 °C.
- II. Em decorrência de temperaturas ligeiramente inferiores a quantidade de gases produzidos na fissão é ligeiramente reduzida em relação ao *Zircaloy*, em ciclos longos de irradiação.
- III. A dilatação térmica do aço é superior à do *Zircaloy*. Portanto, o fechamento da folga, se processa posteriormente ao do *Zircaloy*, em geral, nos casos simulados com queimas 10% acima do *Zircaloy*; portanto, ocorre menor degradação do aço, uma vez que, a PCMI é fator limitante na vida útil do combustível.

- IV. O aço apresenta um ponto de fusão de 1425 -1450 °C, inferior ao do *Zircaloy*, de 1850 °C. Mas sabe-se que a fusão do Inconel de 1298 °C ocorre antes da fusão do aço; portanto, as grades espaçadoras podem perder as funcionalidades. No entanto, o Inconel é empregado em muitos reatores, mesmo com baixo ponto de fusão.
- V. A cinética da reação química de oxidação do aço é menos intensa que a do *Zircaloy*, mas os óxidos de ferro apresentam uma menor condutibilidade térmica (desvantagem). O aço oxida-se na forma exponencial acima de 900 °C, o mesmo ocorre com o zircônio, mas não produz bolhas de oxigênio. Portanto, no caso de um LOCA, teoricamente, o risco de explosões por hidrogênio é reduzido.
- VI. No ponto de vista mecânico, demonstra-se a superioridade do aço; a fluência e a resistência mecânica são melhores, podendo ser mensuradas por fatores. As deformações no aço são reduzidas por causa do alto módulo de elasticidade, praticamente o dobro do *Zircaloy*. O aço não sofre alteração cristalina a 865 °C; a perda da ductilidade do aço é menos intensa que a do *Zircaloy*.

6 TRABALHOS FUTUROS

Os códigos devem ser testados intensamente com as bases FUMEX e IFPE, e devem ser feitas avaliações e aprimoramentos para uma melhor previsão.

As comparações teórico-experimentais descritas possibilitam uma avaliação dos modelos utilizados nos programas de cálculo acima, levando-se, se for o caso, à sua alteração e à possível qualificação.

Alguns modelos devem ser revistos. O modelo de geração de gases, tanto para o estado estacionário como para transientes, é comum. A validação do modelo de *Fosberg Massih* é utilizada tanto no FRAPCON-3.4 como no FRAPTRAN-1.4, ou seja, não é específica para o cenário do RIA. O modelo de falha *PCMI*, ou seja, os limites de fadiga e tensão-deformação, não diferencia no *benchmark* quais varetas falham e quais não sofrem falha. Os modelos do FRAPCON e FRAPTRAN em grande parte são aproximações numéricas obtidas em programas como NSRR, CABRI, FUMEX e IFPE [73,80].

Fazendo as ponderações pertinentes os códigos alterados se encaminhariam para um processo de homologação, mesmo utilizando aos critérios de segurança destinados as ligas à base de zircônio.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] S. M. Stoller Corporation, An Evaluation of Stainless Steel Cladding for Use in Current Design LWRs, EPRI NP-2642, Electric Power Research Institute, 1982.
- [2] BEESTON, J. M. Mechanical and physical properties of irradiated type 348 stainless steel. In: **Effects of Radiation on Materials: Tenth Conference, ASTM STP**. 1981. p. 303-325.
- [3] ALLISON C. M.; SCDAP/RELAP5/MOD3.1 Code Manual Volume IV: MATPRO, A Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis; NUREG/CR-6150 VOL-4.Inc. Idaho Falls, Idaho 83415; p. 681.
- [4] GIOVEDI, CLAUDIA ET.AL. **REVISITING STAINLESS STEEL AS PWR FUEL ROD CLADDING AFTER FUKUSHIMA DAIICHI ACCIDENT LWR Fuel Performance Meeting TopFuel 2013, September 15-19, 2013.**
- [5] GEELHOOD, K. J.; LUSCHER, Walter G.; BEYER, C. E. **FRAPCON-3.4: A Computer Code for the Calculation of Steady State Thermal-mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup**. NUREG 7022 vol 1. US Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Regulatory Research, 143 pgs., 2011.
- [6] GEELHOOD, K. J.; LUSCHER, Walter G.; BEYER, C. E. **FRAPCON-3.4: A Computer Code for the Calculation of Steady State Thermal-mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup**. NUREG 7022 vol 2. US Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Regulatory Research, 2011.
- [7] SMITH, R. W.; WAS, G. S., FCODE-BETA/SS: A Fuel Performance Code for Stainless Steel Clad Pressurized Water Reactor Fuel, Nuclear Technology, Vol 69, 198-209, May 1985.
- [8] **GEELHOOD, K. J. ET AL. FRAPTRAN 1.4: A COMPUTER CODE FOR THE TRANSIENT ANALYSIS OF OXIDE FUEL RODS. NUREG/CR-6739, VOL. 1. PNNL-13576US. NUCLEAR REGULATORY COMMISSION, OFFICE OF NUCLEAR REGULATORY RESEARCH, 2011.**
- [9] GEELHOOD, K. J. ET AL. **FRAPTRAN 1.4: A COMPUTER CODE FOR THE TRANSIENT ANALYSIS OF OXIDE FUEL RODS. NUREG/CR-6739, VOL. 2. PNNL-13576US. NUCLEAR REGULATORY COMMISSION, OFFICE OF NUCLEAR REGULATORY RESEARCH, 2011.**
- [10] HAGRMAN, Donald L.; REYMANN, Gregory A. **MATPRO-VERSION 11: a handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior**. Idaho National Engineering Lab., Idaho Falls (USA) NUREG/CR-0497, 1979.

- [11] CHINO, Masamichi et al. Preliminary estimation of release amounts of ¹³¹I and ¹³⁷Cs accidentally discharged from the Fukushima Daiichi nuclear power plant into the atmosphere. *Journal of nuclear science and technology*, v. 48, n. 7, p. 1129-1134, 2011.
- [12] WEEKS, R. W. Structural analysis of reactor fuel elements. *Nuclear Engineering and Design*, v. 46, n. 2, p. 303-311, 1978.
- [13] United States. Office of Coal, Nuclear, Electric, and Alternate Fuels. Nuclear & Alternate Fuels Division, United States. Dept. of Energy. Office of Civilian Radioactive Waste Management. Spent Nuclear Fuel Discharges from U.S Reactors 1993. SR/CNEAF-95-01. DIANE Publishing Company.
- [14] BEAVER, R. J.; WAUGH, R. C.; LEITTEN, C. F. **Specifications for Army Package Power Reactor (APPR-1) Fuel and Control Rod Components**. Oak Ridge National Lab., Tenn., 1957.
- [15] REICH, W. J.; MOORE, R. S.; NOTZ, Karl J. **Distribution of Characteristics of LWR Spent Fuel**. Oak Ridge National Laboratory, Pacific Northwest Laboratories under work order No. L 30 61 70 1 for the U. S. Department of Energy Office of Civilian Radioactive Waste Management 1991.
- [16] CASKEY JR, G. R. **Hydrogen effects in stainless steel**. Du Pont de Nemours (EI) and Co., Aiken, SC (USA). Savannah River Lab., 1983.
- [17] LOUTHAN JR, M. R.; DERRICK, R. G. Hydrogen transport in austenitic stainless steel. *Corrosion Science*, v. 15, n. 6, p. 565-577, 1975.
- [18] KUNZ, Willfried; MÜNZEL, Helmut; HELFRICH, Ulrike. Diffusion of tritium in zircaloy: Influence of low irradiation damage, oxygen concentration and formation of δ -hydrides. *Journal of Nuclear Materials*, v. 105, n. 2, p. 178-183, 1982.
- [19] ROBINSON, S. L. The Effects of Tritium on The Flow and Fracture of Austenitic Stainless Steels. **Hydrogen Effects on Material Behavior**, p. 433-445, 1989.
- [20] ADAMSON, R. B.; GARZAROLLI, Friedrich; PATTERSON, Charles. In-Reactor Creep of Zirconium Alloys. **Advanced Nuclear Technology International**., 2009.
- [21] NIKULINA, Antonina et al. ZIRAT-11 SPECIAL TOPIC REPORT. 2006.
- [22] ADAMSON, Ron et al. ZIRAT-8 ANNUAL REPORT. 2003.
- [23] EHRLICH, Karl. Irradiation creep and interrelation with swelling in austenitic stainless steels. *Journal of nuclear materials*, v. 100, n. 1, p. 149-166, 1981.

- [24] SOURMAIL, Thomas. Precipitation in creep resistant austenitic stainless steels. **Materials science and technology**, v. 17, n. 1, p. 1-14, 2001.
- [25] HAYHURST, D. R.; VAKILI-TAHAMI, F.; ZHOU, J. Q. Constitutive equations for time independent plasticity and creep of 316 stainless steel at 550 C. **International journal of pressure vessels and piping**, v. 80, n. 2, p. 97-109, 2003.
- [26] COX, Brian; GARZAROLLI, Friedrich; RUDLING, Peter. ZIRAT-9 SPECIAL TOPICS REPORT. 2004.
- [27] BERNSTEIN, I. M; Handbook of stainless steels. New York, NY: McGraw-Hill, 1977.
- [28] DAVIS, Joseph R. (Ed.). Stainless steels. ASM international, Handbook Committee- Technology & Engineering - 577 pages .1994.
- [29] CACUCI, Dan Gabriel et al. Handbook of Nuclear Engineering. Springer, 2010.
- [30] KOK, Kenneth D. Nuclear engineering handbook. CRC Press Llc, 2009.
- [31] HARVEY, Philip D. **Engineering properties of steel**. Metals Park, Ohio: American Society for Metals, 1982.
- [32] BOYER, Howard E.; GALL, Timothy L. Metals handbook; desk edition. 1985.
- [33] LANNING D.D.; BEYER C.E.; GEELHOOD K.J.; PNNL FRAPCON-3 Updates, Including Mixed-Oxide Fuel Properties; NUREG/CR-6534, Vol. 1 Pacific Northwest National Laboratory PNNL-11513, pgs. 144, 2005.
- [34] LANNING D.D., BEYER C.E., GEELHOLD K.J. PNNL FRAPCON-3 Updates, Including Mixed-Oxide Fuel Properties; NUREG/CR-6534, Vol. 2 Pacific Northwest National Laboratory PNNL-11513, pgs. 144, 2005.
- [35] LANNING D.D., BEYER C.E., PAINTER C.L., FRAPCON-3: Modifications to Fuel Rod Material Properties and Performance Models for High-Burnup Application, NUREG/CR-6534 Volume 3 PNNL-11513, pgs. 124, 1999.
- [36] LANNING D.D., BEYER C.E., BERNA G.A. FRAPCON-3: INTEGRAL ASSESSMENT; NUREG/CR-6534 VOLUME 4 PNNL-11513, PGS. 207, 1997.
- [37] LUSCHER, WALTER G.; GEELHOOD, KEN J. MATERIAL PROPERTY CORRELATIONS: COMPARISONS BETWEEN FRAPCON-3.4, FRAPTRAN 1.4, AND MATPRO. NUREG/CR-7024 PNNL-19417. US NUCLEAR REGULATORY COMMISSION, OFFICE OF NUCLEAR REGULATORY RESEARCH, Washington, DC, 198 PGS, 2011.
- [38] SCHULZ, T. L. Westinghouse AP1000 advanced passive plant. **Nuclear Engineering and Design**, v. 236, n. 14, p. 1547-1557, 2006.

- [39] OTT, Larry J.; TVERBERG, Terje; SARTORI, Enrico. Mixed-oxide (MOX) fuel
- [40] LYON, William et al. PCI Analysis and Fuel Rod Failure Prediction using FALCON. In: **Water Reactor Fuel Performance Meeting, Paris, France**. 2009.
- [41] SCHUBERT, A. et al. Analysis of fuel centre temperatures with the TRANSURANUS code. **ATW-Internationale Zeitschrift für Kernenergie**, v. 48, n. 12, p. 756-761, 2003.
- [42] WRIGHT, R. F. Simulated AP1000 response to design basis small-break LOCA events in APEX-1000 test facility. **Nuclear Engineering and Technology**, v. 39, n. 4, p. 287, 2007.
- [43] MARTIN, Robert P.; O'DELL, Larry D. AREVA's realistic large break LOCA analysis methodology. **Nuclear Engineering and Design**, v. 235, n. 16, p. 1713-1725, 2005.
- [44] AYBAR, HIKMET S.; ORTEGO, PEDRO. A REVIEW OF NUCLEAR FUEL PERFORMANCE CODES. **PROGRESS IN NUCLEAR ENERGY**, v. 46, n. 2, p. 127-141, 2005.
- [45] FORSBERG, K.; MASSIH, A. R. Diffusion theory of fission gas migration in irradiated nuclear fuel UO_2 . **Journal of nuclear materials**, v. 135, n. 2, p. 140-148, 1985.
- [46] JERNKVIST, Lars Olof; MASSIH, Ali R.; RUDLING, Peter. **A Strain-based Clad Failure Criterion for Reactivity Initiated Accidents in Light Water Reactors**. Statens kärnkraftinspektion, 2004.
- [47] SCHWEITZER, Philip A. et al. **Corrosion Engineering Handbook, -3 Volume Set**. CRC Press, 1996.
- [48] CLARKE, W. L.; GORDON, G. M. Investigation of stress corrosion cracking susceptibility of Fe-Ni-Cr alloys in nuclear reactor water environments. **Corrosion**, v. 29, n. 1, p. 1-12, 1973.
- [49] CVERNA, Fran (Ed.). **ASM Ready Reference: Thermal properties of metals**. ASM International, 2002.
- [50] WILLIAM F SMITH; HASHEMI, Javad. **Foundations of materials science and engineering**. Mcgraw-Hill Publishing, 2006.
- [51] GARNER, FRANK A.; PERRIN, J. S. (ED.). **EFFECTS OF RADIATION ON MATERIALS: TWELFTH INTERNATIONAL SYMPOSIUM: A SYMPOSIUM**. ASTM INTERNATIONAL, 1985.
- [52] ROSSBECK, Martin L. (Ed.). **Effects of radiation on materials. ASTM International, 2004**.
- [53] CONERMANN, Joyce et al. **Irradiation effects in a highly irradiated cold worked stainless steel removed from a commercial PWR**. 2005.

- [54] PACKAN, Nicholas H.; STOLLER, Roger E.; KUMAR, Arvind S. (Ed.). **Effects of radiation on materials: 14th international symposium**. ASTM International, 1990.
- [55] KLUEH, R. L. **ELEVATED TEMPERATURE FERRITIC AND MARTENSITIC STEELS AND THEIR APPLICATION TO FUTURE NUCLEAR REACTORS**. **INTERNATIONAL MATERIALS REVIEWS**, v. 50, n. 5, p. 287-310, 2005.
- [56] HARRIES, D. R.; ROBERTS, A. C. Effects of Heat Treatment and Irradiation on the High Temperature Tensile Properties of Austenitic Stainless Steels. **The Effects of Radiation on Structural Metals, ASTM STP**, v. 426, p. 21-47, 1967.
- [57] FRANKLIN, D. G.; LUCAS, Glenn E.; BEMENT, Arden L. **Creep of zirconium alloys in nuclear reactors**. ASTM International, 1983.
- [58] OLDBERG, S. T.; MILLER, A.; LUCAS, G. E. Advances in understanding and predicting inelastic deformation in zircaloy. **Zirconium in the Nuclear Industry, ASTM STP**, v. 681, p. 370, 1977.
- [59] MCGUIRE, Michael F. **Stainless steels for design engineers**. ASM International, 2008.
- [60] BAROCH, C. J. **Properties of reactor structural alloys after neutron or particle irradiation**. ASTM International, 1976.
- [61] FRESHLEY, M. D. et al. Irradiation-induced densification of UO₂ pellet fuel. **Journal of Nuclear Materials**, v. 62, n. 2, p. 138-166, 1976.
- [62] CHUNG, HEE M. FUEL BEHAVIOR UNDER LOSS-OF-COOLANT ACCIDENT SITUATIONS. **NUCLEAR ENGINEERING AND TECHNOLOGY**, v. 37, n. 4, p. 327-362, 2005.
- [63] LIU, Alan F. **Mechanics and mechanisms of fracture: an introduction**. ASM International (OH), 2005.
- [64] DULL, D. L.; RAYMOND, L. Stress history effect on incubation time for stress corrosion crack growth in AISI 4340 steel. **Metallurgical Transactions**, v. 3, n. 11, p. 2943-2947, 1972.
- [65] WOO, C. H. Modeling irradiation growth of zirconium and its alloys. **Radiation effects and defects in solids**, v. 144, n. 1-4, p. 145-169, 1998.
- [66] CHAO, C. K. et al. Creep crack growth on spent fuel zircaloy cladding in interim storage. **Theoretical and applied fracture mechanics**, v. 47, n. 1, p. 26-34, 2007.
- [67] CAZALIS, B. et al. The PROMETRA program: fuel cladding mechanical behavior under high strain rate. **Nuclear technology**, v. 157, n. 3, p. 215-229, 2007.

- [68] TOTTEN, George E.; HOWES, Maurice AH (Ed.). Steel heat treatment handbook. CRC Press, 1997
- [69] BOBKOV, V. P. et al THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF MATERIALS FOR NUCLEAR ENGINEERING: A TUTORIAL AND COLLECTION OF DATA INTERNATIONAL **ATOMIC ENERGY AGENCY VIENNA**, 200 PGS, 2008.
- [70] YUEH, Ken. Analysis of High Burnup Fuel Failures at Low Temperatures in RIA Tests Using CSED
- [71] ANDERSON, Ted L. **Fracture mechanics: fundamentals and applications**. CRC press 611 pgs, 2005.
- [72] VETTRAINO, F. ET AL. REVIEW STATO PROGRAMMA HALDEN PROJECT E DEFINIZIONE LINEE DI R&S DI INTERESSE NAZIONALE. 2011.
- [73] VITANZA, C. A RIA FAILURE CRITERION BASED ON CLADDING STRAIN. FUEL BEHAVIOUR UNDER TRANSIENT AND LOCA CONDITIONS, p. 123, 2002.
- [74] WALKER, C. T. ET AL. THE D-COM BLIND PROBLEM ON FISSION GAS RELEASE: THE PREDICTIONS OF THE TRANSURANUS AND FUTURE CODES. NUCLEAR ENGINEERING AND DESIGN, v. 117, n. 3, p. 211-233, 1989
- [75] SCHMITZ F. F., PAPIN J. HIGH BURNUP EFFECTS ON FUEL BEHAVIOUR UNDER ACCIDENT CONDITIONS: THE TESTS CABRI REP-NA. JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS VOLUME 270, ISSUES 1-2, 1, PGS. 55-64; 1999.
- [76] NEA-OECD NUCLEAR FUEL BEHAVIOUR. UNDER REACTIVITY-INITIATED. ACCIDENT (RIA) CONDITIONS. NUCLEAR SAFETY. ISBN 978-92-64-99113-2. NEA/CSNI/R(2010),208PGS, 2010
- [77] PAGANI, Lorenzo P. **On the quantification of safety margins**. 2004. Tese de Doutorado. Massachusetts Institute of Technology.
- [78] LEE, John C.; MCCORMICK, Norman J.**Risk and safety analysis of nuclear systems**. John Wiley & Sons, 2011.
- [79] BREEDING, R. J. et al. Summary description of the methods used in the probabilistic risk assessments for NUREG-1150.**Nuclear Engineering and Design**, v. 135, n. 1, p. 1-27, 1992.
- [80] NEA-OECD. NUCLEAR FUEL BEHAVIOUR IN LOSS-OF-COOLANT ACCIDENT (LOCA) CONDITIONS STATE-OF-THE-ART REPORT; OECD NEA N°. 6846; PG. 369; 2009.
- [81] LEBEDEV, A. A.; KOSARCHUK, V. V. INFLUENCE OF PHASE TRANSFORMATIONS ON THE MECHANICAL PROPERTIES OF AUSTENITIC STAINLESS STEELS. INTERNATIONAL JOURNAL OF PLASTICITY, v. 16, n. 7, p. 749-767, 2000.

- [82] LO, K. H.; SHEK, C. H.; LAI, J. K. L. RECENT DEVELOPMENTS IN STAINLESS STEELS. **MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING: R: REPORTS**, v. 65, n. 4, p. 39-104, 2009.
- [83] LUCAS, G. E. THE EVOLUTION OF MECHANICAL PROPERTY CHANGE IN IRRADIATED AUSTENITIC STAINLESS STEELS. **JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS**, v. 206, n. 2, p. 287-305, 1993.
- [84] MAHESH. A CREEP MODEL FOR AUSTENITIC STAINLESS STEELS INCORPORATING CAVITATION AND WEDGE CRACKING
- [85] MALOY, S. A. ET AL. THE MECHANICAL PROPERTIES OF S31600L/S30400L STAINLESS STEELS, ALLOY 718 AND MOD 9Cr-1Mo AFTER IRRADIATION IN A SPALLATION ENVIRONMENT. **JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS**, v. 296, n. 1, p. 119-128, 2001.
- [86] NISHIOKA, HIROMASA ET AL. DEFORMATION STRUCTURE IN HIGHLY IRRADIATED STAINLESS STEELS. **JOURNAL OF NUCLEAR SCIENCE AND TECHNOLOGY**, v. 45, n. 4, p. 274-287, 2008.
- [87] PLAUT, Ronald Lesley et al. A short review on wrought austenitic stainless steels at high temperatures: processing, microstructure, properties and performance. *Materials Research*, v. 10, n. 4, p. 453-460, 2007.
- [88] BEMENT A.L.; LIU ,YUNG A REGRESSION APPROACH FOR ZIRCALOY-2 IN-REACTOR CREEP CONSTITUTIVE EQUATIONS . (ENERGY LABORATORY REPORT NO. MIT-EL 77-012) DECEMBER 1977.
- [89] POWELL, R. W. JOHNSON, G. D. HAMILTON, M. L.; GARNER, F. A. LMR CLADDING AND DUCTS FOR LIQUID-METAL REACTORS, IN PROCEEDINGS OF INTERNATIONAL CONFERENCE ON RELIABLE FUELS FOR LIQUID-METAL REACTORS, TUCSON, ARIZONA, USA, SEPTEMBER 7-11, 1986.
- [90] SIMULA, VIOUR. Improvement of Computer Codes Used for Fuel Behaviour Simulation (FUMEX-III).
- [91] KHATAK, H_S; RAJ, Baldev (Ed.). Corrosion of austenitic stainless steels: mechanism, mitigation and monitoring. Woodhead publishing, 2002.
- [92] ROBERTS, J. T. A. et al. A stress corrosion cracking model for pellet-cladding interaction failures in light-water reactor fuel rods. In: **Zirconium in the Nuclear Industry (fourth Conference)**, **ASTM STP**. 1977. p. 285-305.
- [93] ADAMSON R., RUDLING P. Dimensional Stability of Zirconium Alloys ZIRAT-7 SPECIAL TOPICS REPORT. Advanced
- [94] ADAMSON, Ronald B.; VAN SWAM, Leo FP (Ed.). Zirconium in the nuclear industry: **seventh international symposium**. **ASTM International**, 1987.
- [95] ADAMSON, Ron; COX, Brian. ZIRAT-10 Special Topics Report, "Impact of Irradiation on Material Performance". **ANT International**, Sweden, 2005.

- [96] ADAMSON, Ron et al. Corrosion mechanisms in zirconium alloys. **ZIRAT r special topic report corrosion mechanisms in zirconium alloys**, 2007.
- [97] LECLERCQ, Sylvain; PARROT, Aurore; LEROY, Maurice. Failure characteristics of cladding tubes under RIA conditions. **Nuclear Engineering and Design**, v. 238, n. 9, p. 2206-2218, 2008.
- [98] UDAGAWA, Yutaka et al. Stress intensity factor at the tip of cladding incipient crack in RIA-simulating experiments for high-burnup PWR fuels. **Journal of nuclear science and technology**, v. 46, n. 10, p. 1012-1021, 2009.
- [99] MENUT, P.; SARTORI, E.; TURNBULL, J. A. The public domain database on nuclear fuel performance experiments (IFPE) for the purpose of code development and validation. In: **ANS International Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance, Park City, Utah, USA**. 2000. p. 10-13.
- [100] CHANTOIN, P. M.; SARTORI, E.; TURNBULL, J. A. The compilation of a public domain database on nuclear fuel performance for the purpose of code development and validation. In: **Proceedings of the Seminar on Thermal Performance of High Burn-up LWR Fuel**. OECD Publishing, 1998. p. 223.
- [101] KILLEEN, J. C.; TURNBULL, J. A.; SARTORI, E. Fuel modelling at extended burnup: IAEA coordinated research project FUMEX-II. In: **Transactions of the Top Fuel 2006 International Meeting on LWR Fuel Performance**. 2006. p. 22-26.
- [102] GOVERS, Kevin et al. Comparison of interatomic potentials for UO₂: Part II: Molecular dynamics simulations. **Journal of nuclear materials**, v. 376, n. 1, p. 66-77, 2008.
- [103] MARKED, Not Protectively. IAEA FUMEX-III Co-ordinated Research Programme: NNL Final Report. 2012.
- [104] MICHEL, B. et al. Simulation of pellet-cladding interaction with the pleiades fuel performance software environment. **Nuclear Technology**, v. 182, n. 2, p. 124-137, 2013.
- [105] CANTINI, Federico; ADORNI, Martina; D'AURIA, Francesco. Comportamento del combustibile nucleare durante rampe di potenza: analisi di esperimenti con codici di calcolo di comportamento del combustibile, in particolare in condizioni di alto burn-up. 2011