PRELIMINARES DE ANÁLISIS ESTADÍSTICO APLICADO A DISEÑO Y PERFORMANCE DE COMBUSTIBLES NUCLEARES

Armando Carlos Marino Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 S. C. de Bariloche, Argentina

RESUMEN

El código BACO ha sido desarrollado en CNEA para la simulación del comportamiento de combustibles nucleares. Una de las aplicaciones de este tipo de códigos es predecir, dentro de cierto margen de confiabilidad, los parámetros de diseño a ajustar a fin de conseguir mayor economía o rendimiento, proveyendo una aproximación sistemática a la optimización del diseño del combustible. El código BACO permite el análisis probabilístico como parte de su estructura de programación y puede incluir como datos de entrada a las incertezas asociadas con datos de fabricación, parámetros del código y de los modelos asociados. Como ejemplo de aplicación analizaremos la influencia de parámetros típicos de fabricación y diseño de barras combustibles para el caso de combustibles tipo CANDU y rampas de potencia en la CN Atucha I. Este tipo de técnicas conduce a resultados relevantes que el análisis habitual de las situaciones extremas del combustible nuclear no preveian.

INTRODUCCIÓN

El buen conocimiento de las propiedades de los materiales de las barras combustibles, su performance durante servicio y el desarrollo de herramientas de cálculo orientadas a diseño de elementos combustibles nucleares competitivos, originales y conservativos, es requerido debido a actuales razones de índole económica. Nos hallamos frente a fuertes necesidades en la industria nuclear de mejorar la performance de los combustibles bajo condiciones de operación mas exigentes, tales como la extensión del quemado [1]. Los efectos de irradiación (térmicos, mecánicos y microestructurales) están fuertemente interrelacionados mientras el reactor está operando. El modelado de combustibles es necesario cuando:

- 1) deben ser analizados resultados experimentales,
- 2) se planean experimentos con combustibles,
- se busca el conocimiento de la influencia de una propiedad determinada de los materiales dentro del comportamiento general del combustible,
- 4) se extrapolan condiciones del reactor a partir de experimentos de laboratorio.

El código BACO ha sido desarrollado en CNEA para la simulación del comportamiento de combustibles nucleares [2]. Una de las aplicaciones de este tipo de códigos es predecir, dentro de cierto margen de confiabilidad, los parámetros de diseño a ajustar a fin de conseguir mayor economía o rendimiento, proveyendo una aproximación sistemática a la optimización del diseño del combustible. Por otro lado estos códigos resultan una eficaz herramienta matemática en cuyo marco presentar los resultados experimentales, asignándoles su importancia relativa para el comportamiento del elemento, como así también dar una guía dentro de la cual ensayar los elementos combustibles, disminuyendo el número de costosas

experiencias. El actual avance en el hardware asociado a este tipo de códigos impone la tendencia a comenzar la implementación del análisis estadístico a las situaciones de performance y diseño de elementos combustibles nucleares.

BACO permite el análisis probabilístico como parte de su estructura de programación y puede incluir como datos de entrada a las incertezas asociadas con datos de fabricación, parámetros del código y de los modelos asociados. Siendo uno de los pioneros en este tipo de técnicas [2, 3, 4]. Analizaremos la influencia de parámetros típicos de fabricación y diseño de barras combustibles. Para ello comenzamos con los resultados de BACO para un combustible tipo CANDU bajo exigentes condiciones de irradiación, incluyendo el análisis habitual para este tipo de BB.CC., en estudio de los casos extremos compatibles con tolerancias de fabricación y los resultados de aplicar el método estadístico. Analizaremos la influencia de dichos parámetros típicos en el estudio de la integridad de BB.CC. tipo Atucha I ante rampas de potencia. Para ello estudiamos la sensibilidad de la predicción del "hoop stress" de la cara interna de la vaina y la temperatura central de la pastilla de UO2, con tolerancias de fabricación de la geometría del combustible. Para estos propósitos se efectúan corridas del código con diferentes datos de entrada que simulan los hipotéticos, pero posibles, combinaciones de las dimensiones de las BB.CC. Estas corridas son seleccionadas al azar usando las tolerancias de fabricación de barras combustibles en parámetros tales como: diámetro de la pastilla de UO₂. altura de la pastilla, diámetros de la vaina, densidad de la pastilla, etc. Este tipo de técnicas conduce a resultados relevantes que el análisis habitual de las situaciones extremas del combustible nuclear no preveian.

ANALISIS DE UNA BARRA COMBUSTIBLE CANDU

Simularemos la performance de una barra combustible tipo CANDU bajo una hipotética, pero realística, historia de potencia que incluye altas exigencias para el combustible y que resalta la capacidad de cálculo del código BACO.

CONDICIONES NORMALES DE OPERACIÓN DE BB.CC. CANDU

La historia de potencia asumida para el análisis de la performance de la barra combustible está graficada en la Figura 1. La operación del reactor está considerada a un relativamente alto nivel de potencia durante toda la irradiación y, al comienzo del tercer período, luego de la segunda parada del reactor, el arranque se da de a saltos.

La máxima temperatura calculada en el centro de la pastilla combustible es de $1970 \,^{\circ}$ C (Ver Figura 8 más adelante). En la Figura 2 se encuentran los gases de fisión producidos en el combustible, los liberados, los atrapados en la matriz de UO₂ y,





Figura 1: Barra combustible CANDU. Potencia lineal generada como función del quemado promedio.

finalmente, los gases retenidos en el borde de grano. La fracción de gases liberados a EOL (End Of Life) es 7.2 % (curva fina en la Figura 2). El aumento en la fracción de gases liberados

durante los períodos de alta potencia (más de 500 W/cm), durante la rampa de potencia a 1000 MWd/tonUO₂, durante el primer recambio y durante el pico de potencia a 3300 MWd/tonUO₂ pueden identificados en la figura.

En la Figura 3, graficamos la evolución los radios de la pastilla e interior de la vaina. La vaina y la pastilla entran en contacto luego de un breve período a BOL (Beginning Of Life) y ese contacto se rompe solo durante los recambios. Las variaciones en los radios están relacionados con los cambios de potencia y por los fenómenos competitivos de creep-down de la vaina y el "swelling" (hinchado de la pastilla por gases de fisión) v densificación de la pastilla. La densificación toma lugar luego de 1000 MWd/tonUO₂ y el "swelling" a partir de la mitad de la irradiación. La evolución de la columna de pastillas y la longitud de vaina asociada se encuentra en la Figura 4. Encontramos expansión térmica a BOL,



Figura 2: Evolución de los gases de fisión (curvas gruesas). Las unidades de volumen de gases están en condiciones STP (Standard Temperature and Pressure). La curva superior representa los gases de fisión producidos, la curva inferior son los gases liberados, la curva central-superior son los gases atrapados y la curva central-inferior son los gases en el borde de grano. La curva fina muestra la fracción de gases liberada.

hasta que ocurre el contacto entre pastilla y vaina, a muy bajo quemado. A partir de aquí, el acople radial entre pastilla y vaina impone que ambas curvas evolucionen paralelas excepto durante paradas del reactor, donde el contacto es roto por el efecto de contracción térmica.



Figura 3: Evolución de la pastilla e interior de la vaina. La pastilla y la vaina están en contacto. Las líneas horizontales corresponden a los respectivos radios de fabricación.

Figura 4: Evolución de la columna de pastillas y de la vaina. La línea horizontal corresponde al valor de fabricación.

5000

La "hoop stress" en la cara interna de la vaina (tensión tangencial) calculada muestra que la vaina trabaja en compresión (situación conservativa). Sin embargo, inversión de tensiones puede observarse debido a incrementos locales de potencia, la inversión de tensiones es seguida de relajación de tensiones por el mecanismo de "creep". La máxima tensión calculada es 96 MP. Hay una relación directa de este valor con las tensiones radiales de contacto entre

pastilla y vaina. La máxima tensión de contacto calculada es 16 MPa. (Ver Figura 9 más adelante.)

La Figura 5 muestra la conductancia térmica en el "gap" entre la pastilla y la vaina. La degradación general de este valor durante la vida del combustible es debida a la liberación de gases de fisión. Las variaciones locales son inducidas por los cambios de potencia.

Hay un incremento en la presión de los gases libres (He, Xe, Kr) en la barra combustible debido al fenómeno de liberación de gases.

sumado a variaciones locales producidas por cambios de potencia. La presión de gases calculada a EOL (2.8 MPa) es menor que la presión del refrigerante asumida para los cálculos (10.6 MPa). (Ver Figura 10 mas adelante).

La Figura 6 muestra la evolución de los "cracks" (fisuras) abiertas debido a tensiones tangenciales en la pastilla. Identificamos dos tipos de "cracks" aquellos abiertos desde la superficie de la pastilla ("cracks-out") y aquellos abiertos desde en centro de la pastilla ("cracks-in"). Durante la operación del reactor, los "cracks-out" son los que se presentan





Figure 5: Conductancia térmica de la separación (gap) entre la pastilla y la vaina.

comúnmente. Los "cracks-in" aparecen durante rampas de potencia negativas (bajadas de potencia), especialmente las paradas del reactor ("shutdowns"), y solo permanecen abiertos si la operación se continua a baja potencia (baja temperatura). Los "cracks-in" se cierran (y sellan) por el fenómeno de reestructurado.



Pellet Grain Size CANDU fuel rod



Figura 6: Evolución de los "cracks". La línea superior representa el radio de la pastilla. La curva inferior (muy cercana al eje-x) es el agujero central. La curva superior muestra los "cracks-out" (abiertos desde la superficie). La curva inferior, entre 3800-4000 MWd/tonUO₂, representa los "cracks-in" (desde el centro).



La Figura 7 representa la evaluación del código BACO del crecimiento del tamaño de grano de la pastilla. Se identifican una zona externa sin reestructurado, un agujero central abierto por migración de porosidad, una zona interna con granos columnares y un anillo con granos equiaxiados. Las predicciones volcadas en las Figuras 6 y 7 pueden ser fácilmente verificados efectuando una ceramografías las pastillas combustibles.

CONDICIONES EXTREMAS DE COMPORTAMIENTO EN BB.CC. CANDU

El propósito de este ejercicio es considerar como puede ser afectada la performance de los elementos combustibles, a partir de la combinación de las tolerancias de fabricación de algunos parámetros de la barra, en tal sentido que produzcan comportamientos extremos, por ejemplo en temperaturas y tensiones. Definimos dos situaciones extremas:

- 1) Una barra combustible con el mayor gap entre pastilla y vaina, compatible con las tolerancias especificadas en la fabricación, y
- 2) Una barra con el menor gap.

La primera situación produce las máximas temperaturas en el combustible, y la segunda las máximas tensiones entre la pastilla y la vaina.

Con la misma historia de potencia de la Figura 1, la Figura 8 muestra la temperatura central de la pastilla en la situación de máximo gap. La máxima temperatura obtenida en este caso es 2070 °C (mientras es de 1920 °C para la situación de mínimo gap). La Figura 9 muestra el cálculo de BACO para el "hoop stress" en la cara interna de la vaina con la situación de mínimo gap. Aquí, la inversión de tensiones ocurre continuamente con picos coincidentes con los de la situación standard, pero alcanzando valores que pueden comprometer la integridad de la vaina. El comportamiento hasta 1000 MWd/tonUO₂ tiene diferente tendencia debido a la diferente condición de contacto o no entre la pastilla y la vaina hasta ese valor de quemado.

ANÁLISIS ESTADÍSTICO APLICADO A PERFORMANCE DE BB.CC. CANDU

La flexibilidad de BACO y su rápida respuesta permite el desarrollo de aplicaciones estadísticas utilizando los límites de fabricación permitidos y una distribución estadística de los mismos. Se efectuaron varias corridas del código (un mínimo de 300) con diferentes conjuntos de dimensiones de las barras combustibles. Estudiamos la variación en las predicciones de:

1) Temperatura central de la pastilla,

- 2) "Hoop stress" de la vaina, y
- 3) Presión de gases libres en la barra.

Los datos de entrada seleccionados al azar dentro de los valores de tolerancias de fabricación son: diámetro de la pastilla, diámetros interno y externo de la vaina, altura de y densidad de la pastilla. La selección al azar se efectuó suponiendo una distribución uniforme de valores entre límites.

Las Figuras 8, 9 y 10 representan el análisis paramétrico con BACO para la BC de un reactor CANDU. En las curvas graficamos:

- 1) Los datos de entrada correspondientes a los parámetros standard de la BC,
- 2) Los correspondientes a la situación de máximo gap,
- 3) Los parámetros de la situación de mínimo gap, y
- 4) Los puntos correspondientes a la selección al azar.

La Figura 8 es el resultado de BACO para la temperatura central de la pastilla utilizando la historia de potencia de la Figura 1. Todos los puntos obtenidos con los cálculos probabilísticos se encuentran entre los valores extremos fijados por las tolerancias de fabricación (y los casos extremos asociados). A BOL, y dependiendo de la combinación de los parámetros



Figura 8: Análisis estadístico de una barra combustible CANDU. Temperatura central de la pastilla en función del quemado promedio.



Figura 9: Análisis estadístico aplicado a una barra tipo CANDU. "Hoop stress" de la cara interna de la vaina vs. quemado promedio.

dimensionales, el contacto pastilla-vaina puede o no ocurrir; si embargo converge cerca de los 500 MWd/tonUO₂ de quemado, donde todos los cálculos presentan la situación de contacto. La *Figura 9* muestra la dispersión del "hoop stress" de la vaina. Los puntos obtenidos muestran una gran dispersión a BOL (Beginning Of Life) debido a la situación de contacto o no entre la pastilla y la vaina. BACO muestra que el "hoop stress" converge durante la irradiación; esto es evidente por la baja dispersión a EOL (End OLife).



Figura 10: Análisis estadístico aplicado a una barra tipo CANDU. Presión de los gases libres en la BC vs. quemado promedio.

La Figura 10 muestra la presión de los gases libres en la BC. El cálculo de la presión de gases refleja simultáneamente las evaluaciones térmica, dimensional y de tensiones efectuadas por el código. Esto es el acople de los parámetros del combustible de entrada y modelos (datos de comportamiento). Hay una baja dispersión a BOL. Los valores calculados divergen durante la irradiación. Finalmente, después de 3500 MWd/tonUO₂, hay valores mucho mayores y menores que aquellos predichos por las condiciones extremas fijadas por la "situación del gap". La Figura 11 es un histograma correspondiente a la presión de



Figura 11: Histograma de la presión de los gases libres a EOL (End Of Life).

gases a EOL. El valor medio está en acuerdo con el calculado con los parámetros standard del combustible, y siempre es menor que la presión del refrigerante.

ANALISIS DE SENSIBILIDAD APLICADO A RAMPAS DE POTENCIA

BACO permite el análisis probabilístico como parte de su estructura de programación y puede incluir como datos de entrada a las incertezas asociadas con datos de fabricación, parámetros del código y de los modelos asociados. En esta sección analizaremos la influencia de parámetros típicos de fabricación y diseño de barras combustibles. Para ello estudiamos la sensibilidad de la predicción del "hoop stress" de la cara interna de la vaina con tolerancias de fabricación de la geometría del combustible. Para este propósito se efectuaron 50000 corridas del código con diferentes datos de entrada para Atucha I. Estas corridas fueron seleccionadas al azar usando las tolerancias de:

- 1) diámetro de la pastilla de UO₂,
- 2) altura de la pastilla,
- 3) diámetro interior de la vaina,
- 4) diámetro exterior de la vaina, y
- 5) densidad de la pastilla.

La selección se realizó suponiendo una distribución uniforme entre los valores límites. Las distribuciones de probabilidad correctas deben ser acordes con los procesos de fabricación y escapan al alcance del presente ejemplo.



Figura 12: Historia de potencia utilizada para simular recambio de combustibles en Atucha I (recambio de zona 1 a 2).

primer historia de potencia La Figura 12 corresponde а la con $B_0 = 4500 \text{ MWd/tonU}, q_0 = 400 \text{ W/cm} \text{ y}$ $\Delta q = 200 \text{ W/cm}.$ Calculamos la probabilidad de que, variando homogéneamente los parámetros dimensionales de la BC dentro de las tolerancias de fabricación asumidas, puede ser alcanzada una tensión de 170 MPa durante la rampa (valor umbral para inducir fallas por SCC). La variación de parámetros produce varios cientos de corridas, donde el código calcula el incremento dqscc durante la rampa, el cual es necesario para alcanzar el valor de "hoop stress" σ_{scc} . El resultado obtenido indica un 20 % de los casos en que

efectivamente es alcanzado el valor umbral durante la rampa. En la Figura 13, graficamos la contribución relativa a ese porcentaje en diferentes rangos de dq_{sec}, durante la rampa. Se observa que, para el rango entre 100 y 150 W/cm, la probabilidad aproxima al 5 %.

Repetimos el cálculo anterior con la misma variación de parámetros de la BC pero con un mayor quemado ($B_0 = 7500 \text{ MWd/tonU}$) para la primera posición del combustible. En esta caso (ver Figura 14), el valor prefijado umbral σ_{sec} es alcanzado durante la rampa de 200 W/cm en un 90% de los casos. Puede verse en la Figura 14 que, en la mayoría de los casos (50%), esto ocurre al comienzo de la rampa de potencia (cuando dq_{sec} < 100 W/cm).

Con propósitos ilustrativos, en la Figura 15 graficamos la probabilidad de alcanzar el umbral para SCC a diferentes quemados de preacondicionamiento, durante una rampa de 200 W/cm. En la Figura 15 agregamos el quemado durante el recambio B₀ como un parámetro (o eje coordenado). En este caso representamos el número relativo de casos donde el valor umbral σ_{sec} es alcanzado durante la rampa de potencia. La potencia de preacondicionamiento antes del

recambio es $q_0 = 400$ W/cm y el burnup al recambio, B_0 , varía entre 3000 MWd/tonU y 9000 MWd/tonU. Se incrementa la probabilidad de alcanzar el umbral para SCC al aumentar quemado de recambio B_0 .





Figura 13: Frecuencia de alcance de "hoop stress" umbral durante una rampa de 200 W/cm. Quemado al recambio de 4500 MWd/tonUO₂.

Figura 14: Frecuencia de alcance de "hoop stress" umbral durante una rampa de 200 W/cm. Quemado al recambio de 7500 MWd/tonUO₂.

Este tipo de análisis incluye el cálculo de probabilidades discriminando el rango de potencias de rampa para inducir fallas. En la Figura 16 es una extensión de la Figura 15. Aquí, la primera columna desde la izquierda corresponde a los recambios de combustibles "exitosos". Las tres restantes discriminan el rango de dq_{SCC} necesario para alcanzar σ_{SCC} durante la rampa.

Es evidente como, al aumentar el quemado al recambio B₀, aumenta la susceptibilidad a inducir una falla por el mecanismo de "stress corrosion cracking". Esta conclusión debe tenerse en cuenta dentro del proyecto ULE (uranio levemente enriquecido) para extensión de quemado de los actuales combustibles nacionales.

Probabilidad de alcanzar "hoop stress" umbral durante una rampa de 200 W/cm







Figura 15: Probabilidad de alcanzar el umbral para inducir fallas por SCC durante una rampa en función del quemado de recambio.

Figura 16: Idem Figura anterior, pero discriminando el rango de dq para alcanzar el valor umbral σ_{SCC} .

Estos resultados son fuertemente dependientes de la distribución de probabilidades asociadas a los parámetros analizados. Las mismas están relacionadas con los procesos de fabricación y las características de los materiales involucrados y, además, pueden ser dependientes entre sí. Para ilustrar esta dependencia se incluyen las Figuras 17 y 18. Para la Figura 17 se consideró una

distribución de Gauss asumiendo las desviaciones standard equivalentes a las tolerancias de fabricación. En la Figura 18 se considera la misma distribución de Gauss pero acotando los valores de los parámetros con los valores de las tolerancias. Las reales distribuciones de probabilidad son propiedad de la empresa fabricante de combustibles nucleares.



Figura 17: Idem Figura anterior, utilizando una distribución gaussiana asociada a la dispersión de los parámetros analizados.



CONCLUSIONES

El código BACO se refleja como una poderosa herramienta para el diseño de elementos combustibles, sus aplicaciones y el análisis de la performance de los mismos.

El análisis probabilístico aplicado a combustibles CANDU y a rampas de potencias en la CN Atucha I reflejan el "estado del arte" en cuanto a este tipo de técnicas de análisis con BACO. El código no incluye este tipo de cálculos como una opción habitual para el usuario común. Se debe programar, y agregar código, para cada aplicación. No siendo sencillo sistematizar el análisis probabilístico incluido en BACO.

Las observaciones apuntadas sobre incertezas en el comportamiento de BB.CC. CANDU y sobre recambio de combustibles al extender el quemado son objeto en la actualidad de un riguroso análisis.

REFERENCIAS

- A. C. Marino & E. J. Savino, "Fuel Modelling and its Economical Competitiveness", Proceedings of the International Conference on "Nuclear Power Competitiveness in the Next two decades", (AATN 96), November 18-21, 1996, Buenos Aires, Argentina.
- [2] A. C. Marino, E. J. Savino & S. Harriague, "BACO (BArra COmbustible) Code Version 2.20: a thermo-mechanical description of a nuclear fuel rod", Journal of Nuclear Materials Vol. 229, April II, 1996 (p155-168).
- [3] K. Laßmann, C. O'Carroll & J. van de Laar, "Probabilistic Fuel Rod Analysis using the TRANSURANUS Code", IAEA, TCM on "Water Reactor Fuel Element Modeling at High Burnup and Experimental Support", paper 5/2, Windermere, UK, 1994.
- [4] A. C. Marino & E. J. Savino, "Sensitivity analysis applied to nuclear fuel performance related to fabrication parameters and experiments", 14th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, SMiRT 14, August 17-22, 1997, Lyon, France.