## České vysoké učení technické v Praze Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra jaderných reaktorů Studijní program: Jaderné inženýrství Specializace: Jaderné reaktory



Studium mechanického chování pokrytí pokročilého jaderného paliva a jeho bezpečnostní hodnocení

### Mechanical Behavior of Advanced Technology Fuel Cladding and Its Safety Assessment

## DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vypracovala: Bc. Tereza Kinkorová Vedoucí práce: Ing. Martin Ševeček, Ph.D. Konzultanti práce: Ing. Mojmír Valach, CSc., Ing. Jakub Krejčí, Ph.D. Rok: 2022





Břehová 7 115 19 Praha 1

Katedra jaderných reaktorů

Akademický rok: 2021/2022

## ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student:

Bc. Tereza Kinkorová

Studijní program: Jaderné inženýrství

Specializace: Jaderné reaktory

# Název práce česky: Studium mechanického chování pokrytí pokročilého jaderného paliva a jeho bezpečnostní hodnocení

Název práce anglicky: Study of mechanical behavior of advanced technology fuel cladding and its safety assessment

### Pokyny pro vypracování:

- 1. Seznamte se s používanými experimentálními metodami pro hodnocení mechanického chování pokrytí palivového proutku a navrhněte vhodné parametry testů.
- 2. Proveď te mechanické testy s dodaným palivovým pokrytím na bázi zirkonia a s pokročilým pokrytím typu ATF.
- 3. Vyhodnoť te provedené experimenty pomocí dostupných nástrojů a porovnejte mikrostrukturu materiálů před a po testech.
- 4. Implementujte do výpočetních nástrojů odovozené materiálové a dostupné termofyzikální vlastnosti.
- 5. Proveď te výpočty chování paliva při postulovaných haváriích s tradičním pokrytím na bázi zirkonia a ATF pokrytím a výsledky porovnejte.

#### Doporučená literatura:

- [1] GEELHOOD, K. et al. FRAPTRAN-2.0: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods. Richland: Pacific Northwest National Laboratory, 2016.
- Holmstrom, B. et al. *Test methodologies for determining high temperature material properties of thin walled tubes*. Luxembourg: Publications Office of the European Union, 2017. DOI: 10.2760/702821, ISBN 978-92-79-69515-5.
- [3] JERNKVIST, L. O. a A. R. MASSIH. *Calibration of models for cladding tube high-temperature creep and rupture in the FRAPTRAN-QT-1.5 program*. Uppsala: Quantum Technologies AB, 2021. ISSN: 2000-0456.
- [4] OECD/NEA. *State-of-the-Art Report on Light Water Reactor Accident-Tolerant Fuels*. Paris: Organisation for Economic Co-Operation and Development, 2018.

Jméno a pracoviště vedoucího práce:

**Ing. Martin Ševeček, Ph.D.** KJR FJFI ČVUT v Praze

Jména a pracoviště konzultantů:

**Ing. Jakub Krejčí, Ph.D.** UJP Praha, a.s. **Ing. Mojmír Valach, CSc.** ALVEL, a.s.

Datum zadání diplomové práce:	18. 10. 2021
Datum odevzdání diplomové práce:	2. 5. 2022
Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.	

V Praze dne 18. 10. 2021

doc. Ing. Tomáš Trojek, Ph.D.

Garant studijního programu

Ing. Jan Rataj, Ph.D.

Vedoucí katedry



prof. Ing. Igor Jex, DrSc. Děkan

### Prohlášení

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracovala samostatně, že jsem řádně citovala všechny použité prameny a literaturu a že práce nebyla využita v rámci jiného vysokoškolského studia.

V Praze dne .....

Bc. Tereza Kinkorová

#### Poděkování

Srdečně bych chtěla poděkovat vedoucímu práce Ing. Martinovi Ševečkovi, Ph.D. Obrovské díky za všechny rady, od těch odborných až po praktické, za obrovskou trpělivost, důvěru a vstřícnost při vedení této i předešlých prací.

Další velké poděkování patří Ing. Radkovi Novotnému, Ph.D. za umožnění příjezdu a práce v jeho laboratoři AMALIA v JRC v holandském Pettenu. Jemu i Ing. Michalovi Novákovi ze stejné laboratoře moc děkuji za velmi milé přijetí v JRC, za zaučení v provádění experimentů a za veškerou pomoc nejen s experimenty u nich v laboratoři. Z JRC bych dále ráda poděkovala Ing. Igoru Simonovskému, Ph.D., Peteru Borstovi a spouště dalších lidí, kteří se na provedení testů, byť jen málo, podíleli a kteří mi umožnili spolupráci s JRC.

Dále bych ráda poděkovala také skupině lidí z CVŘ, bez nichž by nebylo možné uskutečnit druhou část experimentů. Konkrétně děkuji Mgr. Ondřeji Srbovi, Ph.D. a Ing. Zbyňkovi Špiritovi za umožnění realizace experimentů. Obrovské poděkování patří Ing. Jaromíru Janouškovi za pomoc se samotným provedením experimentů a za čas, který mi věnoval, stejně tak děkuji i Ing. Davidovi Bricínovi.

V neposlední řadě bych chtěla za cenné komentáře poděkovat konzultantům práce Ing. Mojmírovi Valachovi, CSc. a Ing. Jakubovi Krejčímu, Ph.D.

### Název práce:

# Studium mechanického chování pokrytí pokročilého jaderného paliva a jeho bezpečnostní hodnocení

Autor:	Bc. Tereza Kinkorová
Studijní program:	Jaderné inženýrství
Specializace:	Jaderné reaktory
Druh práce:	Diplomová práce
Vedoucí práce:	Ing. Martin Ševeček, Ph.D.; KJR FJFI ČVUT v Praze
Konzultanti práce:	Ing. Mojmír Valach, CSc.; ALVEL, a.s.
	Ing Jakub Kreičí Ph D·UJP Praha a s

Abstrakt: Dobrá znalost a modelování mechanického chování jaderného paliva je jedním ze základů termomechanické analýzy při provozu i v havarijních stavech, a proto je i při vývoji a počátku používání ATF paliv nutné mít představu o jejich chování založenou na experimentálních datech, na nichž je možné mechanické modely postavit. V rámci této práce byly provedeny dvě sady mechanických testů palivového pokrytí: axiální tahové zkoušky v JRC v Pettenu a creepové tangenciální zkoušky v CVŘ v Plzni. Testovaným materiálem bylo westinghouské Opt. ZIRLO<sup>™</sup> a stejná slitina s chromovou ochrannou vrstvou. Tahové zkoušky byly prováděny v prostředí PWR a za stejných a vyšších teplot na vzduchu. Creepové zkoušky probíhaly na vzduchu za vysokých teplot. Z obou sad zkoušek byly následně odvozeny koeficienty do klasické stavové rovnice

a do creepové rovnice. Modifikované stavové rovnice byly následně implementovány do výpočetního kódu FRAPTRAN a jeho modifikované verze pro pokročilé palivo. Nakonec byly provedeny výpočty LOCA havárie s jednotlivými typy pokrytí.

*Klíčová slova:* modelování mechanického chování, tahové zkoušky, creepové testy, pokročilé jaderné palivo

#### Title:

# Mechanical Behavior of Advanced Technology Fuel Cladding and Its Safety Assessment

Author: Bc. Tereza Kinkorová

*Abstract:* The sufficient knowledge and calculations of mechanical behaviour of fuel are one of the basic of analysis of fuel behaviour during nominal operation and transients, therefore it is necessary to a big amount of experimental results exist during development and begin of using ATF and this results can be base for the mechanical models.

Within this thesis there were provided two sets of tests: axial tensile tests in JRC in Petten and ring creep tests in Research centre Řež in Pilsen. Material, which was tested, was Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> from Westinghouse company and the same alloy with the chromium coating. The tensile tests were provided in the PWR conditions and in the same and higher temperatures in air. The creep tests were provided in air in high temperature. The high temperature experiments should correspond to the first phase of LOCA. The coefficients of equation of state and the coefficient of creep equation were derived from the both sets of experiments. Modified equation of state was then implemented to the computer code FRAPTRAN and its version for ATF. Finally, the calculations of LOCA with some types of cladding were done.

Key words: calculations of mechanical behaviour, tensile tests, creep tests, ATF

# Obsah

Zr	Značení		
Ú	vod		17
1	Mec 1.1 1.2	hanika palivového pokrytíJaderná bezpečnost a mechanika palivaMechanika válcové skořepiny1.2.1Základní poznatky z pružnosti a pevnosti1.2.2Elastoplastický stav tlustostěnné trubky1.2.3Elastoplastický stav tenkostěnné trubkyAnizotropie zirkoniových slitin palivového pokrytí	<ol> <li>19</li> <li>21</li> <li>21</li> <li>22</li> <li>24</li> <li>24</li> </ol>
2	Mec 2.1 2.2 2.3 2.4	hanický model palivového pokrytíAproximace tenkostěnné trubkyFEM přístupVícevrstvé modelyPoužívané korelace v mechanických modelech2.4.1Pevnostní charakteristiky2.4.2Creepové chování	<ul> <li>26</li> <li>31</li> <li>33</li> <li>33</li> <li>34</li> <li>35</li> </ul>
3	Mec 3.1 3.2 3.3 3.4 3.5	hanické zkouškyTahové zkoušky palivového pokrytí3.1.1Axiální tahové zkoušky3.1.2Tangenciální tahové zkoušky3.1.3Historicky provedené experimentyExperimentální část - MateriálExperimentální část - Tahové zkoušky3.3.1Tahové zkoušky v prostředí PWR3.3.2Tahové zkoušky - výsledky3.3.3Tahové zkoušky - výsledky3.4.1Historicky provedené testováníExperimentální část - Creepové zkoušky3.5.1Metodika3.5.2Výsledky	<b>37</b> 37 38 38 39 41 43 43 46 47 53 54 55 56 58
4	Moo liva 4.1	3.5.2 vysiedky	эх <b>63</b> 63

	4.2	Odvození korelací z provedených experimentů	6
		4.2.1 Pevnostní charakteristiky $\ldots \ldots \ldots$	6
		$4.2.2  \text{Creepové koeficienty}  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  \dots  $	8
	4.3	LOCA simulace - IFA-650.9	0
		4.3.1 Výpočet	2
Zá	věr	7	6
Lit	terat	ura 7	9
Př	ílohy	8	4
$\mathbf{A}$	$\mathbf{P\check{r}el}$	nled používaných korelací 8	<b>5</b>
	A.1	Youngův modul pružnosti	5
	A.2	Poissonovo číslo	6
	A.3	Mez kluzu a mez pevnosti	6
	A.4	Primární creep	8
	A.5	Sekundární creep	8
В	IFA	-650.9 9	<b>2</b>
$\mathbf{C}$	Vstu	ıpní soubory 9	6
	C.1	Vstupní soubor - FRAPCON	6
	C.2	Vstupní soubor - FRAPTRAN	8

# Značení

<u>Zkratka</u>	Význam
ΑΝΛΑΤΤΑ	$\overline{\mathrm{V}\circ}$ ýzkumná laboratoř korozního a mechanického chování v prostředí
AMALIA	lehkovodních reaktorů a reaktorů s kritickou vodou
$\Delta TF$	Accident Tolerant Fuel nebo Advanced Technology Fuel
AIT	- palivo se zvýšenou odolností proti haváriím nebo pokročilé jaderné palivo
ATT	Axial Tensile Test - axiální tahová zkouška
AZ	Aktivní zóna
BWR	Boiling Water Reactor - varný reaktor
CVŘ	Centrum výzkumu Řež
ČVUT	České vysoké učení technické v Praze
EDM	Electric Discharge Machining - elektrojiskrové obrábění
	Laboratories of the Environmental & Mechanical Materials Assessment
EMIMA	- výzkumné laboratoře mechanického chování materiálu v prostředích
FEM	Finite Element Method - metoda konečných prvků
FJFI	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
JRC	Joint Research Centre - výzkumné centrum Evropské komise
KJR	Katedra jaderných reaktorů
LOCA	Loss of Coolant Accident - havárie se ztrátou chladiva
LWR	Light Water Reactor - lehkovodní reaktor
MTA EK	Maďarské výzkumné energetické centrum
OM	Optický mikroskop
PVD	Physical Vapour Deposition - fyzikální depozice z plynné fáze
PHWR	Pressurized Heavy Water Reactor - těžkovodní reaktor
PWR	Pressurized Water Reactor - tlakovodní reaktor
RTT	Ring Tensile Testing - tangenciální tahová zkouška
RXA	Recrystallized annealed - plně rekrystalizované
SEM	Scanning electron microscope - rastrovací elektronový mikroskop
SMPA	Structural Materials Performance Assessment Laboratory - výzkumná laboratoř struktury a chování materiálu
SRA	Stress relieved annealed - částečně vyžíhané
SÚJB	Státní ústav pro jadernou bezpečnost
UMI FS	Ústav materiálového inženýrství na fakultě strojní
USNRC	United States Nuclear Regulatory Comission - Americký jaderný regulační úřad
UTS	Ultimate tensile strength - mez pevnosti
VVER	Vodo-vodní energetický reaktor
YS	Yield strength - mez kluzu
Zry-4	Zircaloy-4

Symbol	Význam
$\overline{\alpha (\mathrm{K}^{-1})}$	koeficient teplotní roztažnosti
$\delta \ ({ m mm})$	velikost mezery
$\epsilon$ (-)	deformace
$\epsilon$ (-)	emisivita
$\lambda \; (\mathrm{WK}^{-1}\mathrm{m}^{-1})$	tepelná vodivost
$\nu$ (-)	Poissonovo číslo
$\rho \ (\mathrm{mm})$	drsnost
$ ho ~( m g cm^{-3})$	hustota
$\sigma$ (MPa)	napětí
$\tau$ (MPa)	tangenciální napětí
$A (\mathrm{MPa}^{-1}\mathrm{s}^{-1})$	strukturní parametr
$C_P \; ({\rm Jkg^{-1}K^{-1}})$	tepelná kapacita
$D \ (\mathrm{mm})$	průměr
E (GPa)	modul pružnosti, Youngův modul
$F(\mathbf{N})$	síla
F, G, H (-)	Hillovské koeficienty anizotropie
K (MPa)	pevnostní koeficient
$Q  (\rm J/mol)$	aktivační energie
R (MPa)	smluvní napětí
R (8,314 J/molK)	molární plynová konstanta
$S \ (\mathrm{mm^3})$	obsah
$S_{ij}$	deviátor napětí
T (K)	teplota
$f_R, f_T, f_A$ (-)	Kearnsovy koeficienty
$l \ (mm)$	délka
m(-)	deformační exponent
n(-)	napěťový exponent
$r \ (\mathrm{mm})$	poloměr
p (MPa)	tlak
$t \ (\mathrm{mm})$	tloušťka
$u (\mathrm{mm})$	posuv
$w_g \; (\mathrm{g cm}^{-2})$	hmotnostní přírůstek

$\underline{Index}$	Význam
Θ	obvodový
С	creepový
$\operatorname{Cr}$	chrom
В	burst
Р	plastický
VM	von Mises
Zr	zirkonium
a	axiální
с	pokrytí
ci	vnitřní pokrytí
climb	dislokační
со	vnější pokrytí
cold	za pokojové teploty
eff	efektivní
f	palivo
i	vnitřní
0	vnější
OX	oxid
r	radiální
$^{\mathrm{th}}$	teplotní

# Seznam obrázků

2.1	Schématické zobrazení metody řešení, upraveno z [14]
2.2	Radiálním elementy ve FEM v jedné axiální vrstvě [52]
2.3	Korelace pro mez kluzu a pevnosti v závislosti na teplotě a slitině ve FRAP kódech (stejné se používají ve FINIX) a v kódu TRANSURANUS
	a závislost meze kluzu na teplotě pro chrom
2.4	Používané korelace pro modul pružnosti a Poissonovo číslo zirkoniových slitin
2.5	Creepové korelace používané v kódech FRAPCON, TRANSURANUS, BISON, FINIX a FEMAXI
3.1	Vzorek pro testování v tangenciálním směru
3.2	Různé geometrie provedení tangenciální tahové zkoušky [26]
3.3	Nákres vzorku pro axiální tahovou zkoušku, upravené z [26]
3.4	Nákres vzorku pro tangenciální tahovou zkoušku, upravené z [26] 42
3.5	Řez vzorkem s chromovou ochrannou vrstvou před mechanickým testo- váním
3.6	Autokláv UJV (vlevo), uchycení vzorku při tahové zkoušce v autoklávu
	(vpravo)
3.7	Zjednodušeně schématicky zakreslená smyčka autoklávu s PWR prostře-
<b>१</b> 0	$\operatorname{dim} \dots \dots$
3.8 3.9	Vzorek pro axialní tanovou zkoušku v autoklavu $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 42$ Průběhy tahových zkoušek na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C a rychlosti deformace $10^{-5}$ s <sup>-1</sup> (vlevo), vybrané průběhy taho- vých zkoušek v prostředí PWR (vpravo) - pozorování vlivu chromové ochranné vrstvy (ZCr - vzorky s chromovou ochrannou vrstvou, Z - re- ferenční vzorky Opt. ZIRLO <sup>TM</sup> ) $\ldots \ldots 48$
3.10	Srovnání průběhu tahových zkoušek v prostředí PWR a na vzduchu (vlevo), naměřená závislost meze kluzu a meze pevnosti na teplotě pro materiál bez a s ochrannou vrstvou na vzduchu (vpravo)
3.11	Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v pro- středí PWR se vzorky s chromovou ochrannou vrstvou (ZCRW1 - vlevo, ZCRW2 - vpravo) 50
3.12	Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v pro- středí PWR se vzorky s chromovou ochrannou vrstvou (ZCRW4 - vlevo, ZCRW6 - vpravo)
3.13	Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v pro- středí PWR se vzorky s a bez chromové ochranné vrstvy (ZCRW7 - vlevo, ZW2 - vpravo)

3.14	Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v pro- středí PWR se vzorky bez chromové ochranné vrstvy (ZW3 - vlevo, ZW4	F 1
	-v pravo)	51
3.15	Casová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v pro- středí PWR se vzorky bez chromové ochranné vrstvy (ZW6)	51
3.16	Stav vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po tahové zkoušce v pro- středí PWR	52
3.17	Stav vzorků bez chromové ochranné vrstvy po tahových zkouškách na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C	53
3.18	Stav vzorků s chromovou ochrannou vrstvou po tahových zkouškách na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C	54
3.19	Fotografie z optického mikroskopu vzorku s chromovou ochrannou vrst- vou po tahové zkoušce v PWR prostředí, užší praskliny ochranné vrstvy na kraji aktivní deformované části (vlevo), širší praskliny ochranné vrstvy v oblasti blízké roztržení vzorku (vpravo)	55
3.20	Fotografie z optického mikroskopu vzorku s chromovou ochrannou vrst- vou po tahové zkoušce na vzduchu při teplotě 320 °C, užší praskliny ochranné vrstvy na kraji aktivní deformované části (vlevo), širší praskliny	FF
0.01	ochranne vrstvy v oblasti maximalni deformace (vpravo)	99
3.21	Povrchove praskliny chromove ochranne vrstvy po tahove zkousce na	FC
0.00	vzduchu pri 320 °C	50 50
3.22 3.23	Typické creepové chování, závislost deformace v čase, upravené z [48] . Upevnění vzorku v přípravku a připravení na creepový test před uza- užením do uvgokotenlotní poce	56
2.94		57
3.24	Casova zavislost deformace vzorku s a bez ochranne vrstvy pri zatizeni 30 N a 60 N a teplotách 700 °C (vlevo) a 850 °C (vpravo)	59
3.25	Casová závislost deformace vzorku s a bez ochranné vrstvy při zatížení 30 N a 60 N a teplotě 775 °C	59
3.26	Rychlost sekundárního creepu v závislosti na teplotě pro vzorky s a bez ochranné vrstvy (vlevo), rychlost sekundárního creepu v závislosti na napětí pro vzorky s a bez ochranné vrstvy při uvažování zoxidování vzorků v průběhu náběhu na teplotu (vpravo)	60
3.27	Maximální deformace při creepových testech v závislosti na teplotě při testu - srovnání vzorků s a bez ochranné vrstvy při zatíženích 30 N a 60 N	60
3 28	Stav vzorků po creepové zkoušce vlevo - Opt ZIBLO™ vpravo - Opt ZIBL	
0.20	s chromovou ochrannou vrstvou	61
3.29	Příčný řez vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po creepové zkoušce (700 °C a 60 N), popraskání chromové ochranné vrstvy v oblasti větší de- formace (vlovo), chromové ochranné vrstva mime deformovanou oblast	01
	(vpravo)	61
3.30	Příčný řez vzorku se slitiny Opt. ZIRLO <sup>™</sup> po creepové zkoušce (700 °C a 60 N), praskliny vzniklé v oxidu z obou strany vzorku v deformované části (vlevo), zoxidování vzorku v oblasti vzdálené od deformované části (vpravo)	62
/ 1	Tenlotní závislost koeficientu m korolaco používané vo FRAP kédech a	
т.1	odvozené hodnoty z experimentálních výsledků tahových zkoušek	67

4.2	Teplotní závislost koeficientu $n$ , korelace používané ve FRAP kódech, experimentální data a z nich odvozené korelace (vlevo), teplotní závislost	
	koeficientu $K,$ korelace používané ve FRAP kódech, experimentální data	
	a z nich odvozené korelace (vpravo)	68
4.3	Odvození napěťového exponentu a aktivační energie z creepových testů,	
	logaritmická závislost rychlosti deformace na logaritmu napětí (vlevo),	
	logaritmická závislost rychlosti deformace na reciproké teplotě (vpravo)	69
4.4	Výkonová historie palivového proutku před LOCA experimentem IFA-	
	650.9	70
4.5	Průběh tlaku chladiva a teploty pokrytí při experimentu - IFA-650.9	71
4.6	Průběh tloušťky oxidické vrstvy (vlevo) a koncentrace (vpravo) vodíku	
	při základním ozáření pro tři různé druhy pokrytí	72
4.7	Průběh vnitřního tlaku proutku pro tři typy pokrytí	74
4.8	Obvodová deformace proutku po testu v závislosti na axiální pozici	74
4.9	Nárůst oxidické vrstvy v průběhu simulované LOCA havárie pro tři typy	
	pokrytí	75
B.1	Selhání pokrytí po vyboulení - IFA-650.9 [38]	93
B.2	Gama skenování aktivity <sup>137</sup> Cs a <sup>103</sup> Ru šest týdnů po testu $[2]$	94
B.3	Naměřené teploty v průběhu experimentu (TCC1 - dolní termočlánek,	
	TCC2 - termočlánek uprostřed, TCC3 - horní termočlánek, TIA - prů-	
	měrná vstupní teplota chladiva, TOA - průměrná výstupní teplota chla-	
	diva) a lineární výkon topného zařízení v okolí proutku (LHR)	94
B.4	Relativní odezvy vanadiových detektorů (ND1 - dolní detektor, ND2 -	
	detektor uprostřed, ND3 - horní detektor)	95
B.5	Průběh vnitřního tlaku v proutku při experimentu (RP), tlak ve vstup-	
	ním potrubí (PI), odezva gama záření ve výstupním potrubí (MON).	95

# Seznam tabulek

1.1	Vlastnosti slitiny Zry-4 a chromu při pokojové teplot ě $[3,19,47,49]$	20
3.1 3.2 3.3 3.4	Naměřené hodnoty meze pevnosti v jednotkách MPa	40 41 42
3.5	a na vzduchu	48
3.6	selhání	48 58
4.1	Modifikované vlastnosti pokrytí ve FRAPCON-4.0P1-CTU [3]	64
4.2	Koeficienty <i>a</i> a <i>b</i> pro napetove kriterium pro slitinu Opt. ZIRLO <sup>IM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou [25]	65
4.3 4.4	Koeficienty <i>a</i> a <i>b</i> pro napětové kritérium pro slitinu Opt. ZIRLO <sup><math>M</math></sup> [25] Porovnání creepových koeficientů pro Zry-4 odvozených v [36] a cre- epových koeficinetů odvozených z creepových zkoušek provedených v rámci této práce pro slitiny Opt. ZIRLO <sup><math>M</math></sup> a stejnou slitinu v chromovou	65
	ochrannou vrstvou	70
$4.5 \\ 4.6$	Přehled parametrů testovaného proutku - IFA-650.9	71
4.7	4.0-CTU pro tři různí typy pokrytí	72 73
A.1	Parametry creepové rovnice používané ve FRAPCON a FINIX pro SRA a RXA slitiny [30]	88
A.2	Parametry creepové rovnice používané v kódu TRANSURANUS pro slitinu Zry-4 - Correlation 18 [12]	89
C.1	Označení používaných typů pokrytí při výpočtech	96

## Úvod

Problematika pokročilého jaderného paliva, dříve častěji označovaného palivem s vyšší odolností vůči haváriím, je mezi odbornou veřejností rozšířená už pár desítek let, ačkoli intenzivněji se začala řešit až po havárii v japonské elektrárně Fukushima-Daiichi v roce 2011. Do povědomí širší části veřejnosti se pravděpodobně informace o pokročilém jaderném palivu dostala až na začátku letošního roku, kdy byla podmínka užití pokročilých jaderných paliv v jaderných elektrárnách přidána do evropské taxonomie. Vzhledem ke stupni vývoje tohoto paliva a stavu jeho licencování ve většině států na starém kontinentu asi k překvapení všech zasvěcených počítala s počátkem používání ATF paliva (jak je pokročilé palivo také často z angličtiny označováno) už v roce 2025.

V současnosti není v žádné evropské zemi licencován žádný koncept pokročilého jaderného paliva, jen v některých zemích povolily regulační úřady zavezení jednotek testovacích souborů do komerčních reaktorů. Samotný proces licencování nového paliva je zdlouhavá záležitost. Např. v České republice jsou licenční požadavky na projekt paliva vydány v bezpečnostním návodu Státního úřadu pro jadernou bezpečnost (SÚJB) - Koncepce posuzování nových typů jaderného paliva v České republice: Licenční požadavky na projekt paliva a aktivní zóny [51], tyto požadavky jsou podobné jako jinde ve světě, všude jsou z velké části založeny na požadavcích Amerického jaderného úřadu pro jadernou bezpečnost (USNRC). Základním požadavkem je splnění hlavních bezpečnostních cílů, pro palivo je to nepoškození palivového systému v projektem předvídatelných režimech a jen takové poškození paliva v projektových nehodách, aby bylo možné případné zavedení regulačních orgánů. Prokazování zajištění bezpečnostních cílů je prováděno splněním bezpečnostních kritérií ve všech projektem očekávaných stavech (tj. při nominálním provozu i projektových nehodách) a splnění kritérií je doporučeno dokazovat jak výpočetně, tak experimentálně.

Výpočetní prokazování splnění kritérií je konkrétně pro termomechanickou část často postaveno na výpočetních nástrojích, které jsou založeny na empirických modelech a korelacích. Pro vývoj takových nástrojů je potřeba velké množství experimentálních dat pro každý materiál. Ve světě se už delší dobu objevuje snaha vyvinout výpočetní kódy, které by byly založeny čistě jen na fyzikálních principech a s daty z experimentů by byly jen porovnávány, nikoli na nich stavěny. Takové výpočetní nástroje by za sebou nepotřebovaly mít obrovské množství experimentálních dat, jejichž získání je často velmi časově a ekonomicky náročné, a zároveň by byly vhodné i pro další materiály, nejen pro dnes tradičně používané. Pravdou ovšem je, že vývoj těchto typů kódů není jednoduchý a při porovnání výsledků s kódy založenými na experimentálních datech nejsou přesnější. Samozřejmě se jejich nesporná výhoda skrývá v možnosti výpočtů všech typů paliva, ale otázkou zůstává, jak by jejich používání bylo hodnoceno státními regulačními úřady.

Při licencování paliva je asi stále lepší spoléhat na ověřené využití experimentálních dat. V současné době je pravděpodobně nejvíce dat pro koncept pokročilého paliva, který se zabývá jen lehkou modifikací palivového pokrytí, a to použití chromové ochranné vrstvy na vnější straně tradičního zirkoniového pokrytí. Zároveň je tento koncept nejdál ve vývoji a nejblíže realizaci.

Při vývoji nebo modifikaci výpočetních nástrojů stále zůstává otázkou, jak vůbec chování takového materiálu řešit. Je-li nejlepší řešení použití stejných korelací jako pro zirkoniové pokrytí, tedy postavení odvozeních na předpokladu jednoho homogenního materiálu a z jeho chování odvodit jednotlivé experimentální konstanty. Zde se nabízí další otázka, jestli je vůbec vhodné pro jiné materiály používat stejné tvary korelací, jestli jejich chování nebude ukazovat úplně jiný trend, nebo zda je lepší předpokládat vícevrstvý materiál a jednotlivé korelace a vlastnosti určovat pro základní slitinu a ochrannou vrstvu zvlášť a spojovat to až ve vícevrstvé teorii. Dále se nabízí otázky modelování jevů, které se u současných materiálů palivového pokrytí vůbec neobjevují. Již bylo ukázáno, že při deformaci chromová vrstva praská, jak řešit její popraskání, při jaké deformaci začne praskat a nezpůsobí to zvýšenou lokální oxidaci základní slitiny a lokální zkřehnutí materiálu? Jak tyto jevy modelovat? To jsou všechno otázky, které je nutné zodpovědět před termomechanickými analýzami, které by sloužily jako podklad k licencování tohoto typu paliva.

## Kapitola 1

## Mechanika palivového pokrytí

### 1.1 Jaderná bezpečnost a mechanika paliva

Jaderné palivo lehkovodních reaktorů (LWR) se v nejobecnější představě skládá z palivové pelety a palivového pokrytí. Tyto části bývají označované jako první dvě bariéry ochrany do hloubky. Palivová peleta je v jaderném průmyslu důležitá především jako matrice pro palivo, kde probíhá štěpná řetězová reakce a vzniká požadovaná energie, ale zároveň bývá považována i za první bariéru ochrany, která udržuje a koncentruje pevné produkty štěpení na jednom místě. Palivové pokrytí bývá často považováno za druhou bariéru ochrany, která udržuje všechny produkty štěpení v daném prostoru (někdy bývá označována jako první vzhledem k tomu, že matrice palivové pelety nezachytí všechny plynné produkty štěpení při provozu). Dále palivové pokrytí slouží k udržení pelet v dané geometrii. Z toho všeho vyplývá, že mechanické chování celého proutku značně ovlivňuje a je ovlivňováno provozem reaktoru. Změna průřezu proutku nebo jeho ohýbání ovlivňuje průtok chladiva aktivní zónou. Dále mechanika proutku ovlivňuje velikost mezery mezi palivem a pokrytím, a tedy i přestup tepla, který je důležitý z hlediska maximální teploty paliva a teplotního gradientu v proutku. K uzavírání mezery mezi palivovou peletou a palivovým pokrytím dochází v průběhu provozu kombinací několika jevů týkajících se jak pelety, tak pokrytí: teplotní roztažnost paliva, swelling (napuchání) paliva a creep pokrytí.

Dobré pevnostní a mechanické chování palivového pokrytí je jednou z nejdůležitějších vlastností pokrytí a při i po provozu jsou na něj kladeny vysoké požadavky. Na počátku kampaně po zavezení do tlakovodního reaktoru (PWR) musí pokrytí vydržet vnější přetlak kolem 12 až 16 MPa (v závislosti na typu reaktoru), postupně se tlakové a napětové poměry mění a obrací. Po uzavření mezery dochází k postupnému navyšování tlaku na vnitřní stěnu pokrytí. Po celou dobu působení v reaktoru a následně i po vyvezení do bazénu skladování i při suchém skladování by měl palivový proutek udržet integritu.

Ještě vyšší požadavky jsou kladeny na pokrytí při přechodových stavech a haváriích. V takovýchto případech je připouštěno a očekáváno selhání části palivových proutků.

Tyto hypotetické stavy musí být propočítávány v rámci bezpečnostních analýz, v nichž musí být určeno, zda a popřípadě kdy proutek selže, musí být uvažovány jevy, které při takovýchto událostech probíhají jako je vysokoteplotní creep a deformace, teplotní roztažnost, různými jevy způsobené křehnutí atd. Při analýzách nominálního provozu musí být dále uvažován vliv radiace na mechanické vlastnosti, radiační creep a růst a radiační poškození.

Základní součástí všech termomechanických výpočtů jsou experimentální data, na jejichž základě byly odvozeny korelace pro jednotlivé jevy. Vzhledem k tomu, že většina jevů je silně závislá na teplotě, jsou i korelace zpravidla závislé na teplotě a experimentální měření by měla být prováděny v určitém teplotním intervalu, který odpovídá provozním teplotám a teplotám při očekávaných událostech a haváriích. Některé jevy jsou závislé i na dalších parametrech, např. na zatížení, oxidaci, typu pokrytí a jeho výrobě atd.

S tradičním jaderným pokrytím byla provedena celá řada experimentálních studií a jejich nejen mechanické a pevnostní chování je dobře zmapováno i ze stovek-tisíců reaktor-roků provozu. Je odzkoušeno, že používané korelace jsou dostatečné pro klasické bezpečnostní analýzy. Stejný postup by měl následovat i v případě nově zavážených typů paliv, především pokrytí. Jedním z konceptů pro pokročilé jaderné pokrytí je pokrytí s ochrannou vrstvou - v současné době je nejvíce diskutovaná chromová ochranná vrstva. V následující Tab. 1.1 jsou srovnány některé vlastnosti slitiny zirkonia Zircaloy-4 (Zry-4), dříve rozšířené slitiny používané jako palivové pokrytí, a čistého chromu. [47] Chrom má nižší mez kluzu i mez pevnosti při pokojové teplotě, ale na rozdíl od zirkoniových slitin výrazně neklesá s teplotou (viz dále v grafu na Obr. 2.3). Při vyšších teplotách má chrom lepší pevnostní vlastnosti než zirkoniové slitiny a lze předpokládat, že by lepší vlastnosti měla mít i výsledná kombinace zirkoniové slitiny jako základního materiálu a chromové tenké vrstvy jako povlaku.

	Zircaloy-4	Chrom
Mikroskopický účinný průřez	0.2 b	3.03 b
pro absorpci tepelných neutronů	0,2 0	0,00 0
Hustota	$6,56~{ m g/cm^3}$	$7,19 \mathrm{~g/cm^3}$
Tvrdost	275  HV10	250  HV10
Měrná tepelná kapacita	$0,285 \mathrm{~J/gC}$	$0,461 \mathrm{~J/gC}$
Tepelná vodivost	$21,5 \mathrm{W/mK}$	93,7  W/mK
Poissonovo číslo	$0,\!37$	$0,\!21$
Modul pružnosti	97,5  GPa	279 GPa
Mez kluzu	$594 \mathrm{MPa}$	$245 \mathrm{MPa}$
Mez pevnosti	$644 \mathrm{MPa}$	$277 \mathrm{MPa}$

Tab. 1.1: Vlastnosti slitiny Zry-4 a chromu při pokojové teplotě [3, 19, 47, 49]

## 1.2 Mechanika válcové skořepiny

### 1.2.1 Základní poznatky z pružnosti a pevnosti

Mechanika těles je obecně popisována pomocí 15 komponent, přičemž se jedná o tři složky posuvu (u, v, w), šest složek deformace  $(\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, \gamma_{yz}, \gamma_{xz}, \gamma_{xy})$  a šest složek napětí  $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \tau_{yz}, \tau_{xz}, \tau_{xy})$ . Zatěžování materiálu v pružné oblasti (materiál se po odtížení vrací do původního stavu) lze popsat pomocí tří skupin rovnic: 1) **rovnice rovnováhy**, které udávají vztahy pro derivace jednotlivých složek napětí a vyjadřují, že po zatížení jsou všechny části tělesa v klidu, 2) **fyzikální rovnice**, označované jako Hookeův zákon, které udávají závislost mezi elastickou deformací a napětím pomocí materiálových konstant E (modul pružnosti, Youngův modul) a  $\nu$  (Poissonovo číslo) a 3) **Cauchyho (geometrické) vztahy** (označované také jako rovnice kompatibility), udávající deformaci v závislosti na posuvu. Modul pružnosti a Poissonovo číslo jsou materiálové elastické konstanty, které jsou pro každý materiál jiné.

Zatěžuje-li se materiál až do oblasti mimo pružné chování materiálu, dochází ke vzniku plastických deformací. Bod, kde končí pružná oblast a materiál se začíná chovat plasticky, se nazývá mez kluzu a je udávána ve formě napětí. V praxi se při výpočtech určuje stav materiálu (zda se materiál nachází v pružné nebo plastické oblasti) porovnáním meze kluzu pro daný materiál s vypočítanou hodnotou tzv. efektivního napětí, které je obecně dáno jako:

$$\sigma_{\text{eff}} = \sqrt{\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 - \sigma_x \sigma_y - \sigma_x \sigma_z - \sigma_y \sigma_z - 3(\tau_{xy}^2 + \tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2)}$$
(1.1)

kde  $\sigma_i$ , i=1,2,3, je normálové (hlavní) napětí ve směrech x, y a z a  $\tau_{xy}, \tau_{xz}$  a  $\tau_{yz}$  jsou jednotlivé tangenciální napětí.

V elastoplastickém stavu opět platí rovnice rovnováhy a geometrické vztahy, ale neplatí už stejné fyzikální vztahy jako v pružné oblasti. Celková deformace v tomto stavu je rovna součtu elastické a plastické deformace. Experimentálně bylo ukázáno, že neexistuje jednoznačný obecný vztah, který by popisoval závislost napětí a plastické deformace v elastoplastické oblasti, to souvisí s tím, že při plastické deformaci dochází ke změně látky a není možné materiál v různých elastoplastických stavech popsat konstantami jako v elastickém stavu v případě modulu pružnosti a Poissonova čísla. V elastoplastických fyzikálních vztazích vystupují různé koeficienty podobající se elastickým konstantám E a  $\nu$ , ale nejedná se o materiálové konstanty, protože jsou v každém časovém kroku jiné a stejně jako napjatost a stav materiálu v této oblasti závisí také na historii zatěžování. Při výpočtech je nutné historii zatěžování sledovat, a to se provádí po malých přírůstcích zatížení. Od toho se tato teorie nazývá přírůstková teorie plasticity. [40]

K určení elastoplastického chování válcové skořepiny jsou používány dva přístupy v závislosti na geometrii (především tloušťce) válcové stěny. Pokud je poměr tloušťky

stěny a jejího průměru dostatečně velký, uvažuje se, že se jedná o tlustostěnnou válcovou skořepinu, v případě malého poměru tloušťky a průměru se uvažuje tenkostěnná válcová skořepina.

### 1.2.2 Elastoplastický stav tlustostěnné trubky

Pod pojmem tlustostěnné trubky je uvažována válcová skořepina pro niž platí:  $\frac{t}{D} > \frac{1}{15}$ , kde t je tlouštka stěny a D je průměr trubky. Dále je v následujícím rozboru uvažován vnitřní tlak  $p_1$  a vnější tlak  $p_2$ , vnitřní poloměr  $r_1$  a vnější poloměr  $r_2$ .

1. Elastický stav

Experimentálně bylo sledováno, že příčné průřezy zůstávají při zatížení v rovině kolmé ke střednici, dalším předpokladem je pak rotační symetrie a že je funkce posuvů v ose z lineární, pak lze psát:

$$u_r = u_r(r)$$
  

$$u_\phi = 0$$
  

$$u_z = C_1 z + C_2$$
(1.2)

kde  $u_i$ , i = r,  $\phi$ , z, jsou posuvy v jednotlivých směrech a  $C_1$  a  $C_2$  jsou experimentálně stanovené konstanty. [40]

V příčném průřezu je těmito posuvy vyvoláno napětí  $\sigma_r$ ,  $\sigma_{\phi}$  a  $\sigma_z$ . A dále se předpokládá rovnoměrné rozložení tlaků uvnitř i vně válcové skořepiny a dostatečná vzdálenost od konců, kde vzniká složitá napjatost. Nejjednodušší je určení axiálního napětí (často označované jako osové napětí), síla působící na dno válcového objektu musí splňovat:

$$F = p_1 \cdot \pi \cdot r_1^2 - p_2 \cdot \pi \cdot r_2^2.$$
(1.3)

Tato síla následně vyvolává axiální napětí ve stěně nádoby, které se předpokládá konstantní po celé tloušťce nádoby:

$$\sigma_z = \frac{p_1 \cdot r_1^2 - p_2 \cdot r_2^2}{r_2^2 - r_1^2}.$$
(1.4)

Odvození průběhu radiálního a obvodového napětí po tloušťce nádoby je prováděno z rovnic rovnováhy, deformačních podmínek a za předpokladu platnosti Hookeova zákona a rotační symetrie. Zároveň musí být splněny okrajové podmínky: na vnitřním poloměru je radiální napětí rovno vnitřním tlaku a na vnějším poloměru je rovno vnějšímu tlaku. Odvozené průběhy obvodového a radiálního napětí ve stěně tlustostěnné nádoby jsou pak následující:

$$\sigma_{\Theta} = K + \frac{C}{r^2}$$

$$\sigma_r = K - \frac{C}{r^2}$$
(1.5)

kde pro K a C platí z okrajových podmínek:

$$K = \frac{p_1 \cdot r_1^2 - p_2 \cdot r_2^2}{r_2^2 - r_1^2}$$
  

$$C = (p_1 - p_2) \cdot \frac{r_1^2 \cdot r_2^2}{r_2^2 - r_1^2}.$$
(1.6)

Při praktických výpočtech se často využívá vztah, který vzniká sečtením obou předchozích vztahů:

$$\sigma_r(r) + \sigma_\Theta(r) = 2K. \tag{1.7}$$

Ke stanovení deformace tlustostěnné trubky je třeba využít rozšířeného Hookeova zákona a vztahu pro výpočet tečných deformací:

$$\epsilon_{\Theta}(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{1.8}$$

v tomto vztahu lze za u(r), dosadit změnu vnitřního a vnějšího poloměru ( $\delta r_1$ a  $\delta r_2$ ) a změny poloměrů vyjádřit:

$$\Delta r_i = r_i \cdot \epsilon_{\Theta}(r_i), \ i = 1, 2. \tag{1.9}$$

Obvodová deformace lze následně přepsat pomocí rozšířeného Hookeova zákona a celý vztah přejde do následující podoby:

$$\Delta r_i = r_i \cdot \sigma_{\Theta}(r_i) - \nu \cdot [\sigma_r(r_i) + \sigma_z], \ i = 1, 2$$
(1.10)

Stejný způsobem lze dojít i ke vztahu pro změnu rozměrů v axiálním směru:

$$\Delta l = l \cdot \epsilon_z = \frac{l}{E} \cdot \sigma_z - \nu \cdot [\sigma_{\Theta}(r) + \sigma_r(r)].$$
(1.11)

#### 2. Elastoplastický stav

Matematický popis elastoplastického stavu je značně komplikovanější než je tomu v případě vratného lineárního chování elastických deformací. Materiál při překročení meze kluzu přechází z pružného do plastického stavu, kde deformace představují nevratné vychýlení atomů z rovnovážných poloh v mříži.

Při řešení základních rovnic pro elastoplastický stav se často uvažuje několik zjednodušujících předpokladů. Při mechanickém namáhání se uvažují jen malé

deformace, ideální izotropní chování materiálu a někdy také dochází k zanedbání zpevnění po překročení meze kluzu.

V praxi je závislost mezi napětím a deformací získávána z tahových zkoušek a často bývá popisována rovnicí tvaru:

$$\epsilon = K \cdot \sigma^m \tag{1.12}$$

kde K a m jsou konstanty stanovené experimentálně. [33]

### 1.2.3 Elastoplastický stav tenkostěnné trubky

Tenkostěnnou válcovou nádobou je myšlena ta, která není tlustostěnná a tedy splňuje podmínku poměru tloušťky a průměru:  $\frac{t}{D} \leq \frac{1}{15}$ . Oproti tlustostěnné válcové skořepině lze předpokládat, že nejen axiální, ale i obvodové a radiální napětí je stejné v celé tloušťce stěny. Ostatní předpoklady jsou totožné s těmi pro tlustostěnný válec a vztahy pro výpočet napětí jsou následující:

$$\sigma_z = \frac{p_1 \cdot r_1^2 - p_2 \cdot r_2^2}{r_2^2 - r_1^2} \tag{1.13}$$

$$\sigma_{\Theta} = \frac{r_1 \cdot p_1 - r_2 \cdot p_2}{r_2 - r_1}.$$
(1.14)

## 1.3 Anizotropie zirkoniových slitin palivového pokrytí

Anizotropie je vlastnost materiálu, která se definuje jako směrová závislost mechanických a fyzikálních vlastností. Často se objevuje u kovů, které prošly procesem válcování, při kterém dochází k charakteristickému přetvoření, změně tvaru zrna a změně orientace zrn. [43] Anizotropické chování se projevuje i u zirkoniového palivového pokrytí. Anizotropní chování je dáno preferenční orientací zrn, hexagonální krystalová mřížka je orientovaná tak, že rovina c v krystalu je v radiálním směru pokrytí. V praxi to znamená, že pro úplné určení vlastností pokrytí je třeba provádět experimentální zkoušky ve dvou základních geometrií - axiální a tangenciální.

Preferenční orientace lze popsat např. pomocí Kearnsových koeficientů  $f_R$ ,  $f_T$ ,  $f_A$ , které udávají objemové zlomky krystalů s bazálními póly přirovnanými k danému směru vzorku. Pro tři navzájem kolmé směry je součet koeficientů vždy roven jedné a pro izotropní materiál platí, že jsou si všechny tři koeficienty rovny a jejich hodnota je 1/3. [15,45]

 $<sup>^1 \</sup>rm Hraniční hodnota poměru průměru a tloušťky mezi tenkostěnnou a tlustostěnnou nádobou se liší mezi jednotlivými publikacemi.$ 

Ve výpočetních kódech, je-li v nich uvažována anizotropie, se lze často setkat s přístupem k anizotropii pomocí Hillovských koeficientů F, G, H. Jejich součet je roven 1,5 a v případě izotropního materiálu jsou všechny rovny 0,5. V kódech jsou jejich pomocí upravovány standardní izotropní modely (viz dále v textu), příkladem kódu, který uvažuje anizotropii palivového pokrytí a modeluje ji pomocí Hillovských koeficientů, je kód TRANSURANUS. [12]

## Kapitola 2

# Mechanický model palivového pokrytí

Mechanické modely ve výpočetních kódech slouží k výpočtu napětí, deformace a posuvů v pokrytí a palivu. U výpočtů ustálených stavů (nominálního provozu) jsou důležité především k určení rozložení teploty v palivovém proutku, které je výrazně ovlivněno velikostí mezery mezi palivem a pokrytím. Při výpočtech abnormálních a havarijních stavů jsou mechanické modely dále využívány k řešení velkých deformací a ke stanovení selhání proutku.

V následujícím textu jsou uvedeny používané přístupy k mechanickým výpočtům a jednotlivé modely používané ve vybraných výpočetních kódech.

V modelech je většinou uvažována inženýrská (logaritmická) deformace a jako referenční geometrie je brána geometrie z výroby. Při výpočtech ustálených stavů dochází zpravidla jen k malým deformacím, u kterých mají skutečná a inženýrská deformace velmi podobnou hodnotu.

### 2.1 Aproximace tenkostěnné trubky

Mechanické modely založené na přiblížení tenkého válcového objektu jsou nejčastějším přístupem k řešení malých deformací palivového proutku. Na tomto přístupu je založený model FRACAS-I, který je implementován do všech FRAP kódů (FRAP-CON [14], FRAPTRAN [13] a FAST [42]), v těchto kódech je možnost mechanického výpočtu i metodou konečných prvků (FEM), ale od vývojářů kódu je doporučené použití modelu FRACAS-I. Velice podobný model je používán i v kódu FINIX [29] a stejný přístup je implementován i v kódu TRANSURANUS [12]. V kódech FRAP-TRAN a TRANSURANUS [11] je tento model doplněn modely pro výpočet velkých deformací (vyboulení pokrytí), které jsou očekávány při havarijních stavech.

Tyto modely jsou určené pro výpočet malých posuvů a deformací paliva a palivového pokrytí. Celý přístup k modelování je založen na celé řadě zjednodušení, prvním je zanedbání deformace paliva vyvolané napětím, proto se modely s tímto předpokladem označují také jako "rigid pellet model". Dalšími zjednodušeními je přiblížení tenkostěnné nebo tlustostěnné válcové skořepiny, z kterého plyne předpoklad konstantnosti axiálního napětí (v případě tenkostěnného přiblížení i dalších složek napětí), deformace a teploty v celé tlouštce palivového pokrytí (při výpočtu se uvažuje průměrná teplota v radiálním směru v pokrytí určená z tepelné analýzy), předpoklad osově symetrického zatěžování a zanedbávají se ohybové deformace a napětí. Dále se předpokládá, že pokrytí drží stále válcový tvar a jsou uvažovány následující jevy ovlivňující mechanické chování palivového proutku: 1) palivová peleta: teplotní roztažnost paliva, swelling, densifikace a relokace, 2) palivové pokrytí: teplotní roztažnost, creep a plasticita a dále 3) štěpné plynné produkty a tlak chladiva.

Celý model má dva základní módy výpočtu, první, určený pro čerstvé palivo a palivo s nízkým vyhořením, kdy je ještě mezera mezi pokrytím a palivem, tzv. "open gap" režim výpočtu. Tento výpočet je založen na rovnicích rovnováhy s hraniční podmínkou v podobě vnitřního tlaku proutku, jenž je dán rovnicí ideálního plynu a dále je řešen problém distribuce teploty ve válcové skořepině s daným vnitřním a vnějším tlakem. Druhý režim výpočtu je spuštěn, pokud je pokrytí v kontaktu s peletou, tato situace nastává vlivem teplotní roztažnosti, swellingu a relokace paliva a creepu pokrytí, jedná se o tzv. "closed gap" režim výpočtu, zde jsou mechanické rovnice rovnováhy dány hraniční podmínkou na vnitřní stěnu pokrytí, která je pevně držena a řízena palivovým sloupcem, uvažuje se podmínka neprokluzu mezi peletou a pokrytím, tj. je dán vnitřní kontaktní tlak a axiální deformace.

V "**open gap**" režimu výpočtu je důležité určit velikost mezery, na které je závislé rozložení teploty v proutku. Požadovaný vnitřní poloměr pokrytí  $r_{ci}$  je závislý na vnitřním tlaku, ten je dále závislý na objemu plynu v mezeře. Celé řešení probíhá následujícím způsobem iterativně. Nejprve jsou z tenkostěnné aproximace válcové skořepiny určeny obvodová a axiální napětí:

$$\sigma_{\Theta} = \frac{r_{\rm ci} p_{\rm i} - r_{\rm co} p_{\rm o}}{r_{\rm co} - r_{\rm ci}} \tag{2.1}$$

$$\sigma_z = \frac{r_{\rm ci}^2 p_{\rm i} - r_{\rm co}^2 p_{\rm o}}{r_{\rm co}^2 - r_{\rm ci}^2} \tag{2.2}$$

kde  $r_{\rm ci}$  je vnitřní poloměr pokrytí,  $r_{\rm co}$  vnější poloměr,  $p_{\rm i}$  je vnitřní tlak v proutku a  $p_{\rm o}$  je okolní tlak. V dalším kroku řešení je počítáno efektivní napětí a efektivní deformace jako součet viskoplastických, teplotních a elastických deformací. Dále jsou počítány deformace v jednotlivých směrech dle zobecněného Hookeova zákona:

$$\epsilon_{\Theta} = \frac{1}{E}(\sigma_{\Theta} - \nu\sigma_z) + \epsilon_{\Theta}^{\rm th} + \epsilon_{\Theta}^{\rm P} + \mathrm{d}\epsilon_{\Theta}^{\rm P} + \epsilon_{\Theta}^{\rm C} + \mathrm{d}\epsilon_{\Theta}^{\rm C}$$

$$\epsilon_{z} = \frac{1}{E}(\sigma_{z} - \nu\sigma_{\Theta}) + \epsilon_{z}^{\text{th}} + \epsilon_{z}^{\text{P}} + \mathrm{d}\epsilon_{z}^{\text{P}} + \epsilon_{z}^{\text{C}} + \mathrm{d}\epsilon_{z}^{\text{C}}$$

$$\epsilon_{r} = -\frac{\nu}{E}(\sigma_{\Theta} + \sigma_{z}) + \epsilon_{r}^{\text{th}} + \epsilon_{r}^{\text{P}} + \mathrm{d}\epsilon_{r}^{\text{P}} + \epsilon_{r}^{\text{C}} + \mathrm{d}\epsilon_{r}^{\text{C}} \qquad (2.3)$$

kde *E* je Youngův modul pružnosti,  $\nu$  Poissonovo číslo,  $\epsilon_i^{\text{th}}$  jsou teplotní deformace v jednotlivých směrech,  $\epsilon_i^{\text{P}}$  plastické deformace a  $\epsilon_i^{\text{C}}$  creepové deformace  $(i = \Theta, z, r)$ . V posledním kroku výpočtu jsou z deformací v jednotlivých směrech spočítány nové rozměry pokrytí:

$$l_{\rm c} = (1 + \epsilon_z) l_{\rm c,cold} \tag{2.4}$$

$$r_{\rm ci} = r_{\rm ci,cold} \left(1 + \frac{1}{2}\epsilon_{\Theta} + \frac{1}{2}\epsilon_r\right) + r_{\rm co,cold} \left(\frac{1}{2}\epsilon_{\Theta} - \frac{1}{2}\epsilon_r\right)$$
(2.5)

$$r_{\rm co} = r_{\rm ci,cold} \left(\frac{1}{2}\epsilon_{\Theta} - \frac{1}{2}\epsilon_r\right) + r_{\rm co,cold} \left(1 + \frac{1}{2}\epsilon_{\Theta} + \frac{1}{2}\epsilon_r\right)$$
(2.6)

kde index cold označuje stav za pokojové teploty,  $r_{\rm ci}$  vnitřní poloměr pokrytí,  $r_{\rm co}$  vnější, l<sub>c</sub> délku proutku a  $\epsilon_i$  deformace v jednotlivých směrech ( $i = \Theta, z, r$ ).

Celý "open gap" režim je řešen iterativně. Na začátku výpočtu jsou použity odhady hodnot vnějšího a vnitřního poloměru a z nich jsou určovány hodnoty obvodového a axiálního napětí, které jsou dále využity při výpočtech až jsou na konci spočítány nové hodnoty vnějšího a vnitřního poloměru.

Druhý, "**closed gap**", režim výpočtu nastává, když je ve výpočetním kódu FINIX splněna podmínka:

$$r_{\rm ci} \le r_{\rm f} + \rho_{\rm f} + \rho_{\rm c} \tag{2.7}$$

kde  $r_{\rm f}$  je vnější poloměr paliva a  $\rho_{\rm f}$  je dr<br/>snost pelety a  $\rho_{\rm c}$  je dr<br/>snost vnitřní stěny pokrytí. Nebo při splnění principiálně stejné podmínky ve FRAP kódech, která je udávána v radiálních po<br/>suvech vnitřní stěny pokrytí a povrchu pelety:

$$u_r^{\rm f} \ge u_r^{\rm ci} + \delta \tag{2.8}$$

kde  $u_r^{\rm f}$  je radiální posuv povrchu paliva,  $u_r^{\rm ci}$  radiální posuv vnitřní stěny pokrytí a  $\delta$  představuje původní velikost mezery.

V tomto režimu jsou v modelu rozlišeny další dva případy: pevný a slabý kontakt. Stav, kdy je peleta s pokrytím v pevném kontaktu, je řešen stejnými rovnicemi a teoriemi jako v případě režimu otevřené mezery jen s jinými hraničními podmínkami. Není zde pevně dán vnitřní tlak, naopak je nutné určit kontaktní tlak, ale je zde pevně daný vnitřní poloměr pokrytí (z podmínky 2.7). Druhou hraniční podmínkou je axiální deformace, která je řízena axiální deformací sloupce paliva:

$$\epsilon_z^{\rm c} = \epsilon_{z,0}^{\rm c} + \epsilon_z^{\rm f} - \epsilon_{z,0}^{\rm f} \tag{2.9}$$

kde index 0 odpovídá stavu před uzavřením mezery. V dalším kroku je ze známých hod-

not  $r_{ci}$ ,  $\epsilon_z$ , modulu pružnosti, Poissonova čísla a jednotlivých deformací určen vnější poloměr pokrytí. Dále jsou počítány deformace v radiálním a obvodovém směru a z nich je na základě zobecněného Hookeova zákona spočítáno obvodové a axiální napětí. Nakonec je počítán kontaktní tlak:

$$p_{\text{contact}} = \frac{\sigma_{\Theta}(r_{\text{co}} - r_{\text{ci}}) + p_{\text{o}}r_{\text{co}}}{r_{\text{ci}}}$$
(2.10)

kde  $\sigma_{\Theta}$  je obvodové napětí,  $r_{co}$  a  $r_{ci}$  vnější a vnitřní poloměr pokrytí a  $p_o$  je vnější tlak chladiva na pokrytí. V modelu FRACAS-I jsou tyto kroky výpočtu prováděny analogicky s posuvy namísto deformace.

V dalším kroku výpočtu je kontaktní tlak porovnáván s vnitřním tlakem a může dojít ke stavu, kdy je kontaktní tlak menší než vnitřní tlak  $p_{\text{contact}} < p_i$ , pokrytí pak není pevně drženo peletou a může docházet k axiálním prokluzům mezi peletou a pokrytím. Při výpočtu nelze použít hraniční podmínka axiální deformace daná peletou stejně jako v případě pevného kontaktu. Zde se předpokládá, že vnitřní tlak je roven tlaku kontaktnímu a druhou hraniční podmínkou je vnitřní poloměr daný stejně jako v případě silného kontaktu. V dalším kroku je řešen vnější poloměr a z těchto údajů obvodové a axiální napětí ze vztahů (2.1) a (2.2), ve kterých je místo vnitřního tlaku dosazen tlak kontaktní. Nakonec jsou ze vztahů (2.6) určeny deformace ve všech směrech.

#### Určení a výpočet elastoplastického stavu

V obou výpočetních režimech je důležité dostatečně přesně určit, zda se materiál nachází v oblasti elastické nebo plastické deformace a jednotlivé deformace spočítat. Zatímco lineární elastická deformace a teplotní a creepové deformace dané korelacemi (viz dále) lze relativně snadno určit, teorie plastického deformování je velice složitá a její modelování je založené na celé řadě zjednodušujících předpokladů a teorií. V modelování termomechanického chování jaderného paliva se nejčastěji uvažuje izotropní chování materiálu pokrytí, jeho nestlačitelnost, deformační zpevňování (FINIX) nebo energetické zpevňování (FRAP kódy), von Misesova podmínka plasticity (HMH podmínka) a platnost Prandtl-Reussových vztahů a přírůstkové teorie plasticity.

V obou režimech je model plastické deformace stejný a začíná určením bodu přechodu z elastické do plastické oblasti, který udává von Misesova podmínka plasticity (2.11), pokud je tato funkce záporná je deformace stále elastická a probíhá výpočet creepu, pokud je funkce rovna nule dochází k vývoji plastických deformací a výpočet pokračuje modely pro časově nezávislou plastickou deformaci<sup>1</sup>.

$$f_{\rm VM} = \sigma_{\rm eff} - YS(\epsilon_{\rm eff}) \tag{2.11}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Kladná hodnota funkce je nefyzikální.

kde  $\sigma_{\rm eff}$ je efektivní napětí dané von Misesem následovně:

$$\sigma_{\rm eff} = \frac{1}{2} [(\sigma_{\Theta} - \sigma_r)^2 + (\sigma_r - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_{\Theta})^2]^{\frac{1}{2}}.$$
 (2.12)

Druhý člen v podmínce plasticity (2.11) představuje mez kluzu, která je kvůli změnám ve vlastnostech materiálu v průběhu zatěžování funkcí efektivní plastické deformace, mez kluzu se poté určuje na základě křivky napětí-deformace při jednoosém zatěžování.

Při indentifikaci plastické deformace přechází výpočet na modely plastické deformace a řešení probíhá pomocí přírůstkové teorie deformace, podmínka pro její použití je napětí v řádech meze kluzu, což lze očekávat pro typické rozložení tlaků v reaktoru. Při takto velkých napětích nedochází při plastické deformaci ke změně objemu a tudíž platí:

$$\mathrm{d}\epsilon_{\Theta}^{\mathrm{P}} + \mathrm{d}\epsilon_{r}^{\mathrm{P}} + \mathrm{d}\epsilon_{z}^{\mathrm{P}} = 0. \tag{2.13}$$

Celé řešení přírůstkové teorie plastické deformace pak probíhá v následujících krocích: Nejprve je celá zatěžovací historie rozdělena do malých přírůstků. Poté je pro každý přírůstek postupně udělán počáteční odhad přírůstku plastické deformace  $\epsilon_i^{\rm P}$ , z něhož jsou následně počítány rovnice rovnováhy, fyzikální rovnice (zobecněný Hookeův zákon) a rovnice kompatibility (Cauchyho vztahy) jako pro elastický problém a ze získaných napětí je spočítán deviátor napětí  $S_{ij}$ .

Nezávisle na tomto je počítán celkový přírůstek plastické deformace z d $\epsilon_{ij}^{P}$ . Přírůstek plastické deformace je počítán v každém kroku a celková plastická deformace je suma všech jejích přírůstků:

$$\epsilon^{\rm P} = \sum \mathrm{d}\epsilon^{\rm P} \tag{2.14}$$

kde d $\epsilon^{\rm P}$ odpovídá efektivnímu přírůstku, který je dán přírůstky deformace v jednotlivých směrech:

$$d\epsilon^{\rm P} = \frac{\sqrt{2}}{3} \left[ (d\epsilon^{\rm P}_{\Theta} - d\epsilon^{\rm P}_r)^2 + (d\epsilon^{\rm P}_r - d\epsilon^{\rm P}_z)^2 + (d\epsilon^{\rm P}_z - d\epsilon^{\rm P}_{\Theta})^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$
(2.15)

následně lze z křivek napětí-deformace získat hodnoty jednotlivých napětí a z toho dále hodnotu efektivního napětí.

Nakonec je pomocí Prandtl-Reussovových vztahů (2.16), udávajících závislost přírůstku plastické deformace v jednotlivých směrech na efektivním přírůstku plastické deformace, určen nový odhad pro přírůstek plastické deformace  $d\epsilon_i^{\rm P}$ :

$$d\epsilon_i^{\rm P} = \frac{3}{2} \frac{d\epsilon^{\rm P}}{\sigma_{\rm eff}} S_i, \ i = \Theta, r, z.$$
(2.16)

Prandtl- Reussovy vztahy říkají, že přírůsky plastické deformace jsou uměrné deviátoru napětí  $S_i$  a konstanta úměrnosti je dána podmínkou plasticity.

Celý tento proces (schématicky zobrazený na Obr. 2.1) je opakován, dokud nedojde

ke konvergenci.



Obr. 2.1: Schématické zobrazení metody řešení, upraveno z [14]

V kódu TRANSURANUS [12] jsou deformace počítány v závislosti na anizotropii materiálu, efektivní napětí je dáno následujícím způsobem:

$$\sigma_{\text{eff}} = \sqrt{F(\sigma_r - \sigma_{\Theta})^2 + G(\sigma_{\Theta} - \sigma_z)^2 + H(\sigma_z - \sigma_r)^2}$$
(2.17)

kde F, G a H jsou anizotropní koeficienty a jsou dány zvlášť pro každou slitinu. V takovém případě jsou rychlosti deformace v jednotlivých směrech dány zobecněnou rovnicí plastického přetváření:

$$\dot{\epsilon_r} = \frac{\dot{\epsilon_{eff}}}{\sigma_{eff}} [(H+F)\sigma_r - F\sigma_\Theta + H\sigma_z]$$
(2.18)

$$\dot{\epsilon_{\Theta}} = \frac{\dot{\epsilon_{eff}}}{\sigma_{eff}} [(F+G)\sigma_{\Theta} - G\sigma_z + F\sigma_r]$$
(2.19)

$$\dot{\epsilon_z} = \frac{\dot{\epsilon_{eff}}}{\sigma_{eff}} [(G+H)\sigma_z - H\sigma_r + G\sigma_\Theta]$$
(2.20)

Z dosavadních poznatků plyne, že tato metoda je vhodná pro ustálené i transientní stavy.

### 2.2 FEM přístup

Dalším způsobem modelování mechanického chování paliva ve výpočetních kódech je využití numerické metody konečných prvků (FEM). Tato metoda je často používána k simulacím průběhu napětí a deformací. Je postavena na rozdělení spojité oblasti do konečného počtu prvků - diskretizaci řešené oblasti. Jednotlivé základní rovnice pružnosti jsou poté řešeny v uzlových bodech. Přesnost metody je výrazně závislá na hustotě a topologii prvků v síti.

Při termomechanických výpočtech je metoda konečných prvků využívána především

ve 2D (FEMAXI, FALCON) a 3D (BISON, ALCYONE) kódech<sup>2</sup>, ve 3D kódech se kvůli výpočetní náročnosti pomocí FEM analýzy většinou řeší jen malá oblast.

Celý proutek je i zde rozdělen na daný počet axiálních nódů a ty jsou dále rozděleny na kruhové elementy v radiálním směru. Jednotlivé nódy jsou dále pro účely FEM rozděleny do čtyřúhelníkových elementů se čtyřmi stupni volnosti, zjednodušené schéma nódů je zobrazeno na Obr. 2.2, kde je vyobrazeno 10 elementů v peletě (včetně elementů představující zkosení a prohlubeň) a čtyři v pokrytí, kde poslední představuje oxidickou vrstvu.



Obr. 2.2: Radiálním elementy ve FEM v jedné axiální vrstvě [52]

Každý stupeň volnosti představuje možnost pohybu v jednom směru, axiálně nebo radiálně a předpokladá se, že se celá vrstva pohybuje se stejnou axiální deformací.

Samotný výpočet je postavený na již několikrát zmiňovaných základních rovnicích obecné pružnosti a pevnosti: rovnice rovnováhy, geometrické vztahy a fyzikální vztahy, doplněných o podmínku konstantnosti objemu:

$$\epsilon_r + \epsilon_\Theta + \epsilon_z = 0. \tag{2.21}$$

Při výpočtech je uvažována homogenita materiálu a jednotná teplota v malé oblasti řešení, gravitační, setrvačné a elektromagnetické síly jsou zanedbatelné, dále je uvažována symetrie a podmínka rovinné deformace nebo rovinného napětí.

Konkrétně v kódu FEMAXI [52] je obecný zjednodušený algoritmus v každém časovém kroku výpočtu následující: Nejdříve jsou pro každý uzlový bod připraveny přírůstky deformace a elastoplastická matice. Dále je stanoveno, zda je palivo a pokrytí v kontaktu a hraniční podmínky v nódech, pro každý prvek je určena změna zatížení a z elastoplastické matice je počítána matice tuhosti. Celková změna zatížení a celková matice tuhosti je získána posčítáním příspěvků ze všech prvků. Následuje řešení rovnice tuhosti:

$$[\mathbf{K}_{n+1}^i]\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{i+1} = \Delta \mathbf{F}_{n+1}^i \tag{2.22}$$

Z řešení  $\Delta \mathbf{u}_{n+1}^{i+1}$  jsou dále získány přírůstky deformace a napětí  $d\epsilon_{n+1}^{i+1}$  a  $d\sigma_{n+1}^{i+1}$  pro každý uzlový bod. Tento proces je iterativně řešen, dokud nedojde ke konvergenci Newton-Raphsonovy metody, konvergenci deformace a nejsou splněny hraniční podmínky. Na konci časového kroku je určeno, zda došlo k plastickým deformacím, zatížení nebo

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Možnost}$ mechanické modelování pomocí FEM je i v 1,5D kódech, např. ve FRAP kódech není doporučená.

odtížení a zda je peleta a pokrytí v kontaktu.

Podmínka vzniku plastických deformací je stejně jako v předchozím přístupu dána překročením meze kluzu, tedy pokud platí:

$$\mathbf{h}(\sigma) = \mathbf{K}(\bar{\epsilon}^P, T) \tag{2.23}$$

kde K je funkce meze kluzu závislá na plastické deformaci a teplotě a h představuje effektivní napětí, které je počítáno s ohledem na anizotropii materiálu:

$$h = \sigma_{eff} = \sqrt{\frac{3}{2(F+G+H)} [G(\sigma_{\Theta} - \sigma_r)^2 + H(\sigma_r - \sigma_z)^2 + F(\sigma_z - \sigma_{\Theta})^2]}$$
(2.24)

kde F, G a H jsou Hillovské koeficienty anizotropie.

### 2.3 Vícevrstvé modely

K mechanickému popisu pokročilého jaderného pokrytí, konkrétně konceptu s ochrannými vrstvami by mohly sloužit vícevrstvé modely, které jsou už ze svého názvu, určeny k řešení mechaniky tělesa z více na sebe naskládaných materiálů. Vícevrstvá teorie je odvozena ze stejných rovnic jako přiblížení tlustostěnné a tenkostěnné trubky: z rovnic rovnováhy, Hookeova zákona a rovnic kompatibility. Jednotlivé rovnice jsou aplikovány pro obě<sup>3</sup> vrstvy s hraničními podmínkami, které představují hodnoty vnitřního tlaku  $p_i$  a vnějšího tlaku  $p_o$ . Dále toto odvození vychází ze znalosti vnějšího a vnitřního poloměru celé válcové skořepiny a poloměru kontaktu vrstev, modulů pružnosti a Poissonova čísla materiálů, z kterých jsou vrstvy vyrobeny. [16]

Příkladem takového přístupu je vyvíjená verze vícevrstvého mechanického modelu ve FRAPCON, nazývaná FRACAS-CT [21]. Tento model je založen na tlustostěnné aproximaci válcové skořepiny tak, aby byl možný výpočet vícevrstvého pokrytí pokročilého paliva. Stejně jako původní FRACAS i tento model má dva hlavní režimy výpočtu - otevřená a uzavřená mezera a hraniční podmínky pro oba režimy jsou totožné jako v původním modelu FRACAS-I.

### 2.4 Používané korelace v mechanických modelech

Z popisu mechanických modelů palivových pokrytí je zřejmé, že k výpočtu některých druhů deformací a dalších parametrů v mechanických vztazích slouží empiricky určené závislosti. Nejdůležitější a z hlediska této práce nejzajímavější jsou představeny v následujícím textu.

 $<sup>^3</sup>$ Vzhledem k řešenému konceptu ATF - základní slitina a ochranná vrstva - jsou zde předpokládány jen dvě vrstvy, vícevrstvé řešní by bylo analogické, např. pro koncepty uvažující "sandwichové" uspořádání.

### 2.4.1 Pevnostní charakteristiky

Hlavními pevnostními charakteristikami materiálu jsou mez kluzu (YS), která označuje napětí, při němž přechází elastické chování na plastické, a mez pevnosti (UTS), která udává napětí, při kterém se materiál přestává zpevňovat a dochází ke vzniku krčku a dalšímu prodlužování krčku za klesající zatěžovací síly. Dalšími důležitými parametry v analyzování pevnostního chování jsou Youngův modul pružnosti charakterizující tuhost materiálu v elastické oblasti a Poissonovo číslo, které představuje relativní prodloužení k relativnímu příčnému zkrácení.

Všechny tyto parametry lze v principu určit z tahové zkoušky a jejich hodnoty jsou závislé na typu materiálu, jeho výrobě, teplotě a ozáření. Zatímco určení mezí kluzu a pevnosti je relativně jednoduché přímo z dat z jednoosé tahové zkoušky, stanovení modulu pružnosti vyžaduje komplexnější analýzu zkoušky, včetně pevnostní charakterizace čepů pro uchycení vzorku při zkoušce a dalších součástí experimentální instrumentace.

Ve výpočetních kódech jsou napěťovo-deformační vlastnosti po překročení meze kluzu jednotlivých typů pokrytí počítány pomocí klasické stavové rovnice:

$$\sigma = K (\frac{\dot{\epsilon}}{10^{-3}})^m \cdot \epsilon_{\rm p+e}^n \tag{2.25}$$

kde K je pevnostní koeficient, m je deformační exponent a n je napěťový exponent, jsou to materiálové konstanty, které jsou závislé na teplotě, fluenci a typu slitiny pokrytí a korelace pro jejich výpočet jsou sepsány v Příloze A.

V následujícím grafu (Obr. 2.3) jsou zobrazeny jednotlivé korelace používané pro výpočet meze kluzu a pevnosti ve výpočetních kódech v závislosti na teplotě a typu slitiny. Zároveň byla do grafu přidána také křivka závislosti meze kluzu na teplotě pro chromu [3], vzhledem k jeho využití jako ochranné vrstvy v jednom z konceptů pro ATF palivo.



Obr. 2.3: Korelace pro mez kluzu a pevnosti v závislosti na teplotě a slitině ve FRAP kódech (stejné se používají ve FINIX) a v kódu TRANSURANUS a závislost meze kluzu na teplotě pro chrom

V grafu na Obr. 2.4 jsou zobrazeny používané teplotní korelace pro modul pružnosti a Poissonovo číslo. Do těchto grafů nebyly přidány hodnoty pro chrom, protože se výrazněji liší od hodnot pro zirkoniové slitiny, modul pružnosti je výrazně vyšší (při těchto teplotách cca 260-210 GPa) a hodnota Poissonova čísla je 0,22. [3] Jednotlivé rovnice popisující tyto závislosti jsou uvedeny v Příloze A.



Obr. 2.4: Používané korelace pro modul pružnosti a Poissonovo číslo zirkoniových slitin

### 2.4.2 Creepové chování

Creepem je obecně myšlena jakákoli časově závislá deformace a často je uvažováno, že je při ní zachován objem, jedná se o napětím řízený proces, který je vysoce závislý na teplotě a na hustotě toku rychlých neutronů<sup>4</sup>. Creep je jeden z důležitých deformačních mechanismů palivového pokrytí a tudíž musí být uvažován i výpočetními kódy. Creep se stává hlavním deformačním mechanismem především při vysokoteplotních tranzientech, a proto je obzvlášť důležité modelování vysokoteplotního creepového chování.

Ve FRAP kódech je creep modelován rozšířením již popsaného klasického přístupu modelování deformací. Stejný způsob řešení, jaký platí pro časově nezávislé řešení může být využit i pro časově závislý problém. Jediná změna je rozšíření Prandtl-Reussových vztahů (2.16) o creepový člen:

$$d\epsilon_1^{\rm C} = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon} \Delta t}{\sigma_{\epsilon}} S_1 + \frac{\dot{V^{\rm C}} \Delta t}{9} \frac{(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)}{\sigma_m}$$
(2.26)

první člen na pravé straně počítá creepovou deformaci, při které nedochází ke změně objemu a druhý člen uvažuje trvalou změnu objemu při deformaci. K vyjádření těchto dvou členů je nutné dodat další materiálové korelace.

Pro první člen je to korelace pro výpočet rychlosti creepu, která je ve FRAPCON-4.0 založena na klasickém Nortonovu vztahu pro creep:

$$\dot{\epsilon} = A \exp(-\frac{Q}{RT}) \sigma^n \tag{2.27}$$

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>V této práci je řešen jen teplotní creep a nikoli creep radiační.

kde  $\dot{\epsilon}$  je rychlost deformace, T teplota,  $\sigma$  napětí, R je molární plynová konstanta (8,314 Jmol<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>)), Q aktivační energie (J/mol), A je materiálová konstanta a n je napěťový exponent<sup>5</sup>. Jednotlivé experimentálně určené paramtery jsou odvozeny zvlášť pro SRA a RXA pokrytí (viz Příloha A).

V druhém členu se jedná o korelaci pro výpočet trvalé objemové deformace, která je funkcí napětí, teploty, času a maximální trvalé změny objemu:  $\dot{V^{C}} = g(\sigma, T, t, V_{\text{avail}})$  a platí  $dV^{C} = d\epsilon_{1}^{C} + d\epsilon_{2}^{C} + d\epsilon_{3}^{C}$ . [13, 14, 42]

Creepový model ve FINIX nepočítá vysokoteplotní creep a uvažuje dvě fáze creepu - primární a sekundární. V sekundární části dále uvažuje creep tepelný a radiační. Primární creep je počítán z rychlosti sekundárního a ze saturované deforamce primárního creepu. Přírůstek deformace primárního creepu je následně počítán z rovnice:

$$\Delta \epsilon_{\rm c,p} = a(\epsilon_{\rm c,p}(t_1) - \epsilon_{\rm c,p}(t_0)) \tag{2.28}$$

kde a označuje směr. Sekundární creep je počítán jako součet rychlostí teplotního a radiačního creepu:

$$\Delta \epsilon_{\rm c,s} = b(\epsilon_{\rm c,s,th} + \epsilon_{\rm c,s,irr}) dt \qquad (2.29)$$

kde b určuje směr creepu. Při výpočtu je možné vybrat ze dvou creepových modelů: Limbäck-Anderssonova a Geelhoodova. [29]

Ve výpočetním kódu TRANSURANUS [12] je zavedeno několik korelací pro slitinu Zircaloy a slitinu Zr1%Nb. Pro slitinu Zircaloy se např. jedná o korelaci založenou na klasické Nortonově rovnici (2.27), pro slitinu Zr1%Nb jsou to korelace odvozené pro palivo pro VVER-440 a VVER-1000, přesné vztahy jsou uvedeny v Příloze A.

Srovnání jednotlivých používaných korelací je v grafu na Obr. 2.5. Do tohoto grafu nebyla přidána závislost pro chrom, protože je rychlost creepu chromu o desítky řádu nižší  $(10^{-6}-10^{-4} \text{ s}^{-1})$ .



Obr. 2.5: Creepové korelace používané v kódech FRAPCON, TRANSURANUS, BI-SON, FINIX a FEMAXI

 $<sup>^5 \</sup>mathrm{Tento}$ napěťový exponent číselně neodpovídá stejně označené konstantně v klasické stavové rovici.
# Kapitola 3

# Mechanické zkoušky

### 3.1 Tahové zkoušky palivového pokrytí

Zirkoniové palivové pokrytí je vzhledem ke způsobu výroby silně anizotropní materiál. Jeho materiálové vlastnosti a chování se v jednotlivých směrech liší, a proto je důležité, v jakém směru probíhá zatěžování, a mechanické chování by mělo být hodnoceno právě s ohledem na anizotropii. U většiny zkoušek, a stejně tak u zkoušky v tahu, se dělají zkoušky axiální a tangenciální, rozlišuje se pak axiální tahová zkouška (ATT axial tensile test) a tangenciální tahová zkouška (RTT - ring tensile test, tangenciální tahové zkoušky jsou zpravidla se vzorky ve tvaru prstýnků).

Tahové zkoušky jsou prováděny v trhacím stroji, do kterého je upevněn zkoumaný vzorek a následně je deformován konstantní deformační rychlostí. V závislosti na vzniklé deformaci (prodloužení) je zaznamenávána zatěžující síla. Vzniklá křivka síla-prodloužení bývá dále přepočítávána na křivku napětí-deformace, kde inženýrské (smluvní) napětí R je počítané jako:

$$R = \frac{F}{S_0} \tag{3.1}$$

kde F je zatěžující síla a  $S_0$  je počáteční průřez aktivních částí vzorku, kolmý ke směru namáhání. Podobně se spočítá deformace (někdy označovaná jako poměrné prodloužení) z celkového prodloužení vzorku jako poměr přírůstku prodloužení a počáteční délky:

$$\epsilon = \frac{\Delta l}{l_0} \tag{3.2}$$

kde  $l_0$  je počáteční délka aktivní části <br/>a $\Delta l$  je prodloužení.

Při vyhodnocení tahové zkoušky se sledují především dva momenty, prvním je určení meze kluzu, tj. hodnoty napětí, kdy se mění elastická deformace na plastickou a často je udávána jako hodnota napětí, která je dosažena v průsečíku posunutí lineární části křivky o deformaci 0,2 % a původní křivky. Druhým zkoumaným bodem je hodnota meze pevnosti, která představuje maximální možné zatížení, než začne vznikat krček

a dojde k následnému selhání vzorku. [31]

Chování materiálu při tahové zkoušce je silně závislé na teplotě, metodě výroby vzorku a při testování v tangenciálním směru je významná i závislost na tření mezi vzorkem a uchycením. Rozdíl je také v tom, zda už byl daný materiál namáhán či nikoli, při namáhání a opětovném odlehčení dochází k tzv. zpevnění materiálu a posunu meze kluzu.

### 3.1.1 Axiální tahové zkoušky

Existuje několik přístupů a technik, jak axiální tahové zkoušky palivového pokrytí provádět, odlišnosti jsou od různých trhacích zařízeních až po použité vzorky. Za jednu z nejpřesnějších se považují trubky s redukovanými stěnami a přesně definovaným prostorem, kde dojde k plastickými deformacím a k lomu. V některých případech se měří jen polovina této geometrie. Nevýhodou tohoto způsobu testování jsou vysoké požadavky na techniku výroby vzorků a její náročnost. Zkoušky jsou relativně jednoduché na provedení i interpretaci a mohou být prováděny v podmínkách simulujících nominální provoz i havarijních stavy. Z hlediska hodnocení bezpečnosti jsou výsledky z ATT důležité při nominálním provozu po uzavření mezery, kdy je axiální namáhání pokrytí plně řízeno palivovými peletami, které mají vyšší teplotní roztažnost a při rychlých změnách výkonu může dojít k velkému axiálnímu zatěžování pokrytí. A při projektových haváriích především na konci scénáře LOCA havárie, kdy dochází ke znovuzaplavení aktivní zóny a rozžhavené palivové pokrytí je vystaveno teplotnímu šoku, vlivem kterého dochází k namáhání palivového proutku v axiálním směru a je důležité, aby proutek udržel integritu. Naopak v počáteční fázi LOCA havárie při vyboulení pokrytí je největší namáhání v obvodovém směru a při experimentech simulujících tuto fázi havárie byly pozorovány selhání vlivem velkého obvodového napětí (praskliny rovnoběžné s axiálním směrem). Při hodnocení bezpečnosti jsou důležité i výsledky tangenciálních zkoušek.

### 3.1.2 Tangenciální tahové zkoušky

Tangenciální nebo také prstýnkové tahové zkoušky jsou nejčastěji prováděny na vzorku prstýnkového tvaru (viz Obr. 3.1). Při zkouškách jsou sledovány stejné charakteristiky jako v případě axiálních zkoušek, ale dochází zde k výraznější změně v geometrii při zatížení. Pro přesnější výsledky jsou kruhové vzorky často v měřené části seřezávány, aby zde byla přesně definovaná geometrie. S takto připravenými vzorky je možné provést tahovou zkoušku několika různými způsoby, jednotlivá geometrie je zobrazena na Obr. 3.2. V prvních dvou případech je vzorek natahován stejnými dvěma půlkruhy, které mají téměř stejný průměr jako je vnitřní průměr pokrytí. Liší se jen v umístění, v prvním případě (A) je zkoušená připravená část vzorku umístěna přímo tam, kde se půlkruhy střetávají a testovaná plocha je kolmá ke směru zatížení. V druhém případě (B) jsou testované části na vrších půlkruhů - ve směru zatížení, při tomto způsobu testování je dosahováno vyšších hodnot zatížení než v předchozím, dochází k velkému tření mezi vzorkem a půlkruhy.



Obr. 3.1: Vzorek pro testování v tangenciálním směru

Třetí způsob zatěžování při prstýnkovém testu (C) je obdobný jako předchozí dva, místo půlkruhů je používána vnitřní část nazývána "dogbone", která by měla bránit větším změnám geometrie při zatěžování. Zatěžování probíhá kolmo k tažené ploše. Poslední ukázaný způsob testování je vyvinutý a používaný Kurčatovským institutem v Rusku, zatěžovací půlkruhy jsou výrazně menší než vnitřní průměr vzorku a dochází k výrazné změně v geometrii při zatěžování, největší ohýbání vzorku nastává ihned po inicializaci zatěžování. [26]



Obr. 3.2: Různé geometrie provedení tangenciální tahové zkoušky [26]

### 3.1.3 Historicky provedené experimenty

Už z experimentů se samotným zirkoniem vyplývá silná závislost meze kluzu a meze pevnosti na teplotě, obě meze výrazně klesají s rostoucí teplotou [44], tyto trendy jsou dále ukázány i v dalších studiích už s konkrétními slitinami používanými jako palivové pokrytí [23]. Dále lze pozorovat závislost velikosti meze kluzu na způsobu výroby slitiny (RXA vs SRA), na příměsích (meze byly například měřeny na samotném zirkoniu, s příměsí cínu, niobu, chromu a molybdenu, ve všech případech s příměsi dochází ke zvýšení meze kluzu i meze pevnosti, ale ke zmenšení tažnosti - nejvýrazněji v případě molybdenu [54]) a velikosti ozáření, bylo ukázáno, že mez kluzu i mez pevnosti roste s ozářením materiálu, ale výrazně se snižuje tažnost materiálu [6,41].

Nejrozšířenější testy a nejvíce dostupných dat je z tahových zkoušek se slitinou Zircaloy. Jedněmi z počátečních tahových zkoušek byly ty, které měly ukázat, že při provozu při teplotě okolo 300 °C jsou splněny podmínky, že UTS je minimálně 1/3 UTS při pokojové teplotě a YS jsou minimálně 2/3 YS při pokojové teplotě. [32] Dalším příkladem může být testování a porovnávání ozářeného a neozářeného materiálu. [23] Tahové zkoušky byly prováděny v tangenciálním směru s rychlostí deformace  $0.01 \text{ s}^{-1}$ . bylo pozorováno výrazné snížení mezí po překročení teploty 600 °C. U neozářeného materiálu docházelo k houževnatému lomu, zatímco u ozářeného ke křehkému. Dále byl testován vliv vodíku na tažné vlastnosti materiálu [34]. Při koncentraci vodíku pod 500 ppm nebyl jeho vliv významný, významnější roli hrál až při koncentraci nad 600 ppm při pokojové teplotě, při vyšší teplotě (nad 300 °C) mechanické vlastnosti znovu příliš neovlivňoval. Tahové vlastnosti ovlivňuje taky velikost zoxidování vzorků, bylo testováno, jak je ovlivní teplota při oxidaci a čas oxidace [49]. Mez kluzu i pevnosti zpočátku lehce rostla s rostoucí teplotou oxidace a poté klesala, počáteční růst vymizí s delší oxidační dobou. Další tahové (axiální i tangenciální) testování s dalšími slitinami ZIRLO a M5 bylo prováděno v rámci programu PROMETRA. [8] I na dalších slitinách byly prováděny mechanické testy, naměřené hodnoty meze kluzu a meze pevnosti byly zapsány do tabulek 3.1 a 3.2.

	PT	150 °C	$300 \ ^{\circ}\mathrm{C}$	$400~^{\circ}\mathrm{C}$	450 °C	500 °C	$600 \ ^{\circ}\mathrm{C}$	$800 \ ^{\circ}\mathrm{C}$
Zry-4 <sup>a</sup> [23]	942,7				678,8		282,6	58,3
Zry-4 [10]	706							
Zry-2 <sup>b</sup> [32]			372					
Zry-2 <sup>a</sup> [32]			359					
Zry-4 <sup>c</sup> [49]	644							
ZIRLO <sup>b</sup> [22]	465,8							
ZIRLO <sup>b</sup> [27]	450							
Zry-4 $a[8]$			775	653	579	498	328	90
M5 $^{a}[8]$			505	447	408	363	263	93
ZIRLO <sup>a</sup> [8]			652	570	527	482	366	30
E110 [26]	361	262	194					
E110G [26]	405	282	193					
Zr1Nb [53]	390	275	200		155	130		
E110 $^{b}[35]$	379	265		167				

Tab. 3.1: Naměřené hodnoty meze pevnosti v jednotkách MPa

<sup>a</sup> tangenciální

<sup>b</sup> axiální

<sup>c</sup> rozměry obvyklé pro těžkovodní reaktory (PHWR)

Mechanických zkoušek s různými koncepty pokročilého pokrytí jaderného paliva nebylo zatím provedeno příliš, ale bylo ukázáno, že ochranné vrstvy nezanedbatelně ovlivňují mechanické chování pokrytí [50]. Konkrétně s chromovou ochrannou vrstvou je dostupných jen několik experimentálních dat. Bylo pozorováno, že při testování v pokojové teplotě chromová ochranná vrstva příliš nemění mez kluzu a pevnosti, ale musí být kladen důraz na to, aby nebyly při nanášení ochranné vrstvy s příliš vysokou

	PΤ	150 °C	$300 \ ^{\circ}\mathrm{C}$	350 °C	400 °C	500 °C	$600 \ ^{\circ}\mathrm{C}$	$800 \ ^{\circ}\mathrm{C}$
Zry-4 <sup>a</sup> [23]	825	740	550		500		180	50
Zry-4 [10]	578							
Zry-2 <sup>b</sup> [32]			310					
Zry-2 <sup>a</sup> [32]			345					
$Zry-4^{c}[49]$	594							
Zry-4 <sup>b</sup> [56]	760							
Zry-4 <sup>a</sup> [56]	880							
ZIRLO [22]	379,3							
ZIRLO [27]	450							
Zry-4 <sup>a</sup> [8]			685	638	585	372	284	42
M5 $^{a}[8]$			444	413	379	251	202	47
ZIRLO <sup>a</sup> [8]			610	565	520	357	281	21
Zr1Nb [53]	280	200		140		120	95	
<sup>a</sup> tangenciáln <sup>b</sup> axiální <sup>c</sup> rozměry PH	í IWR							

Tab. 3.2: Naměřené hodnoty meze kluzu v jednotkách MPa

teplotou změněny vlastnosti původní základové slitiny [4]. Jedním z dalších zkoušení bylo tangenciální testování na základní slitině Zr1Nb s ochrannou vrstvou chromu o tloušťce 5 a 8  $\mu$ m. [1] Tahové zkoušky byly prováděny na referenčním vzorku jen se slitinou Zr1Nb a na vzorku s ochrannou vrstvou při pokojové teplotě a teplotě 350 °C. Při pokojové teplotě byla naměřena mez kluzu zirkoniové slitiny 277 MPa a mez pevnosti 355 MPa, na vzorku s ochrannou vrstvou nabývaly obě meze vyšších hodnot. Naopak při testech při teplotě 350 °C došlo ke snížení meze pevnosti u vzorků s ochrannou vrstvou a tažnosti, rozdíl v mezi kluzu pro referenční vzorek a vzorek s ochrannou vrstvou nebyl výrazný (mez kluzu Zr1Nb - 190 MPa, mez pevnosti Zr1Nb - 235 MPa). V axiálním směru došlo ke snížení meze kluzu při pokojové teplotě u vzorku s ochrannou vrstvou.

### 3.2 Experimentální část - Materiál

Testovaným materiálem byl již diskutovaný koncept ATF, zirkoniová slitina jako základní materiál a chrom jako ochranná vrstva, konkrétně se jednalo o slitinu Opt. ZIRLO<sup>™</sup>. Chromová vrstva měla tloušťku 18 µm a byla nanesena metodou fyzikální depozice z plynné fáze (PVD) v Ústavu materiálového inženýrství na fakultě strojní (UMI FS ČVUT) pomocí přístroje Hauser Flexicoat 850. Metoda PVD spočívá v nanášení vrstev materiálu, který je převeden z pevné do kapalné nebo plynné fáze, v této fázi je ve vakuu nebo při nízkém tlaku transportován a následně deponován na základní materiál. Při procesu nedochází k chemické změně nanášeného materiálu.

Referenčním materiálem byla pokročilá zirkoniová slitina používaná v západních

typech tlakovodních reaktorů (PWR) vyvíjená a vyráběná americkou firmou Westinghouse - Opt. ZIRLO<sup>TM</sup>, jejíž složení je v tabulce 3.3. Geometrie testovaného materiálu byla shodná s pokrytími používanými ve VVER, tj. vnější průměr trubek byl 9,14 mm a tloušťka byla 0,57 mm.

Tab. 3.3: Složení slitiny Opt. ZIRLO™

	Nb	Sn	Fe	0
Opt. ZIRLO <sup>TM</sup>	1 %	0,7~%	0,1~%	0,1~%

#### Vzorky

Pro axiální i tangenciální zkoušení byly z 30 cm dlouhých trubek nařezány vzorky o rozměrech i tvaru tradičně používaném k těmto typům testu. Vyřezání vzorků probíhalo pomocí technologie elektrojiskrového obrábění (EDM), kde funkci elektrody zastával mosazný drát a dielektrikum byla voda. Stejné rozměry a geometrie byly používány při tahových zkouškách např. i při testování slitiny E110 v maďarském MTA EK [26]. Pro axiální zkoušení se jedná o segmenty 50 mm dlouhé s dvěma testovacími regiony, které jsou dlouhé 10 mm a široké 3 mm (Obr. 3.3).



Obr. 3.3: Nákres vzorku pro axiální tahovou zkoušku, upravené z [26]

U tangenciálního testování se jednalo o tzv. prstýnkové vzorky, jejichž geometrie je na Obr. 3.4 a byl vybrán typ zatěžování, kdy je aktivní část vzorku umístěna rovnoměrně se směrem zatěžování (viz Obr. 3.2 (A)).



Obr. 3.4: Nákres vzorku pro tangenciální tahovou zkoušku, upravené z [26]

Před testováním byly vzorky odmaštěny ultrazvukem v acetonu po dobu 5 minut. Stejně tak byly acetonem odmaštěny i ostatní části testovacího zařízení.

V rámci přípravy testů byly udělány snímky na elektronovém mikroskopu (SEM), aby byla vidět celistvost a přilnavost chromové ochranné vrstvy před testováním a bylo

možné porovnat změny v průběhu mechanických zkoušek. Snímek z mikroskopu před testováním je zobrazen na Obr. 3.5.



Obr. 3.5: Řez vzorkem s chromovou ochrannou vrstvou před mechanickým testováním

### 3.3 Experimentální část - Tahové zkoušky

Všechny tahové zkoušky byly prováděny v JRC v nizozemském Pettenu ve skupině laboratoří EMMA. Zirkoniové pokrytí bylo zkoušeno v axiální směru. Jedna část zkoušek probíhala v typickém vodním prostředí PWR (LiOH - 2 ppm Li,  $H_3BO_3$  -1000 ppm B) a druhá část na vzduchu při teplotách odpovídajících zkoušení v PWR prostředí a při vyšších teplotách (320 °C, 400 °C, 500 °C).

### 3.3.1 Tahové zkoušky v prostředí PWR

#### Parametry

Zkoušky v prostředí PWR probíhaly ve velkém autoklávu UJV (Obr. 3.6) v laboratoři AMALIA, ve kterém jsou tři testovací sekce a je možné provádět tři experimentální měření současně, jednotlivé testovací sekce jsou na sobě nezávislé a jejich řízení je taktéž oddělené. Testování v autoklávu probíhalo při teplotě 320 °C a tlaku 13 MPa. Voda autoklávem protékala a byla kontrolována v cirkulující smyčce (Obr. 3.7).

Jak již bylo zmíněno tahové zkoušky v prostředí PWR probíhaly při teplotách odpovídajícím výstupním teplotám vody v PWR třetí generace (320  $^{\circ}$ C). Testovací tlak



Obr. 3.6: Autokláv UJV (vlevo), uchycení vzorku při tahové zkoušce v autoklávu (vpravo)

byl nižší než tlak při stejných podmínkách v reaktorech (13 MPa), na takto vysoký tlak byla ozkoušena těsnost autoklávu a zároveň je dostatečný k udržení vody v kapalném skupenství.

Testovací rychlost deformace byla zvolena  $10^{-6}$  s<sup>-1</sup> (po přepočtu na aktivní délku vzorků to odpovídá přibližně rychlosti 0,038 mm/h). Tato rychlost byla vybrána v závislosti na časové náročnosti zkoušky a zároveň je to rychlost blízká limitní rychlosti deformace v jaderných elektrárnách při najíždění a bylo uvažováno, že je to rychlost dostatečně malá k zachycení změn v měření korozního potenciálu.

#### Postup

Povrch vzorků, byl před zkouškami kontrolován optickým mikroskopem, zda nebyl poničen při výrobě vzorku a především zda nebyla porušena chromová vrstva. Dále byly ke vzorkům laserem přivařeny elektrody (Obr. 3.8), pomocí kterých byl při celé zkoušce sledován rozdíl potenciálů, jehož změna měla indikovat počátek praskání chromové ochranné vrstvy. Jako referenční hladina potenciálu sloužila elektroda AgCl/Ag. Jednotlivé vzorky byly před měřením usazeny do testovacích sekcí a drženy v pozici pomocí čepů z nerezové oceli, přivařené elektrody byly připojeny k elektrodám uvnitř testovacího zařízení, které mají vývod mimo aktivní část autoklávu, celé zapojení je zobrazeno na Obr. 3.6 (vpravo).

Dalším krokem přípravy testu bylo uzavření autoklávu, na celou aktivní část autoklávu se vzorky byl umístěn zvon, který byl poté upevněn pomocí 18 šroubů a utažen momentovým klíčem na 550 N·m. Dále bylo prováděno zaplavení a natlakování autoklávu, autokláv byl před zahříváním natlakován na tlak okolo 8 MPa a byla provedena



Obr. 3.7: Zjednodušeně schématicky zakreslená smyčka autoklávu s PWR prostředím

kontrola těsnosti. Následně mohlo být na autokláv položeno topné těleso a s dalším navyšováním tlaku začínalo i zahřívání. Dosažení požadovaných podmínek a jejich ustálení trvalo zpravidla přibližně 24 hodin.



Obr. 3.8: Vzorek pro axiální tahovou zkoušku v autoklávu

#### Vyhodnocení

Samotný test byl řízen rychlostí posuvu, jenž byla kontrolována řízením jedné z čelistí trhacího stroje. Při testu byla zaznamenávána externí síla v testovací sekci, která byla následně kalibračním vztahem přepočítávána na čistou sílu působící na vzorek. Z takto zkalibrovaných dat byla vykreslena křivka závislosti síly na prodloužení, z které byla určena maximální síla a z ní ze vzorce (3.1) mez pevnosti materiálu při daných testovacích podmínkách. Následně byla celá křivka závislosti síly na prodloužení pomocí vzorců (3.1) a (3.2) převedena na křivku závislosti napětí na deformaci. Z tohoto grafu byla určena smluvní mez kluzu materiálu při daných testovacích podmínkách.

Dalším krokem bylo určení tažnosti materiálu ze vzorce:

$$A = 100 \cdot \epsilon_{\rm P} \tag{3.3}$$

kde  $\epsilon_P$  odpovídá plastické deformaci, tj. hodnotě deformace v okamžiku prudkého poklesu síly bez počáteční elastické deformace.

Někdy bývá při tahových zkouškách analyzován a odvozován také modul pružnosti v tahu. I zde byl při vyhodnocování odvozován, ale jeho hodnoty jsou v tomto případě nicneříkající, protože nejsou známy tuhosti čelistí trhacích zařízení a navíc se v tomto ohledu chová i každá testovací sekce odlišně.

Následně probíhalo vyhodnocení dat z měření změn v korozním potenciálu. Měření korozního potenciálu probíhalo odděleně na druhém počítači s pomocí systému Gamry a pro správné sjednocení a vyhodnocení dat bylo nutné si pečlivě zaznamenávat časy spuštění měření a počátku zatěžování. Výsledky z korozního měření byly srovnávány s časovým vývojem zatěžující síly.

Nakonec po vyjmutí vzorků z autoklávu, jehož postup otevírání a odtlakování byl opačný k popsanému postupu uzavření, natlakování a ohřevu, bylo prováděno postexperimentální vyhodnocení stavu vzorků. Rozměry vzorků, u kterých nedošlo k selhání, byly přeměřeny a všechny vzorky byly prohlíženy na optickém mikroskopu (OM), část vzorků byla analyzována na elektronovém mikroskopu (SEM). Jednalo se především o vzorky s ochrannou vrstvou, u nichž bylo sledováno, zda došlo k porušení a popraskání ochranné vrstvy, popř. jak vypadají vzniklé praskliny, jak jsou široké, jaká je jejich hustota.

### 3.3.2 Tahové zkoušky na vzduchu

#### Metodika a parametry

Tahové zkoušky na vzduchu probíhaly v laboratoři SMPA v zatěžovacím stroji Instron E3000 při atmosférickém tlaku. Vzorek byl umístěn do středu pece na dlouhé čepy ze slitiny nimonic tak, aby zatěžovací zařízení byla mimo zahřívanou komoru, zároveň byla zatěžovací zařízení neustále chlazena proudem vzduchu, aby jejich teplota nepřesáhla 50 °C. Upevnění vzorku při zkoušce bylo totožné jako při testování v PWR prostředí, pomocí čepů z nerezové oceli. Ke vzorku byl připevněn termočlánek, pomocí kterého byla měřena teplota přímo vzorku, která byla cca o 15 °C menší než teplota naměřená v blízkosti topnice komory, jenž byla zároveň teplotou nastavovanou. Po dosažení požadované teploty vzorku byl celý ohřátý systém držen 1 hodinu bez zatěžování vzorku, aby došlo k ustálení podmínek.

Celý test byl řízen softwarem tak, aby při zahřívání nebylo zatěžování větší než 2 N a aby nedošlo k roztržení vzorku, aby byl test ukončen při poklesu zatěžovací síly o 150 N.

Vybrané testovací teploty byly 320 °C, 400 °C a 500 °C, kdy 320 °C bylo vybráno, aby bylo možné srovnat vliv prostředí a rychlosti deformace při jednotlivých zkouškách a vyšší teploty byly určeny na základě možností topné komory a požadavku testování při vyšších teplotách, které by nastaly v reaktoru při havarijních situacích. Testování probíhalo při deformační rychlosti  $10^{-5}$  s<sup>-1</sup> (odpovídá 0,0001 mm/s). Stejně jako v případě výběru teploty i určení testovací deformační rychlosti bylo požadováno podobné

jako v při testování v prostředí PWR a zároveň bylo omezeno testovacím zařízením, u kterého by při nižších rychlostech a tedy delších dobách zatěžování mohlo docházet k přehřívání elektromotoru.

#### Vyhodnocení

Postup vyhodnocování tahových zkoušek na vzduchu při vyšších teplotách byl v podstatě totožný s aplikovaným na tahové zkoušky v prostředí PWR. Znovu byly z naměřených dat určovány meze kluzu a meze pružnosti. Vzhledem k tomu, že řízení těchto zkoušek bylo naprogramováno tak, aby došlo k zastavení testu při poklesu síly o 150 N od maximální síly, nedošlo k selhání vzorků a nebyla určována tažnost. Testy byly zastavovány před selhání z důvodu možnosti sledování popraskání chromové ochranné vrstvy.

Po proběhlé tahové zkoušce probíhalo (stejně jako po zkoušce v PWR prostředí) vyhodnocení stavu vzorku. Vzorky byly přeměřeny, byly prohlíženy na OM a část vzorků byla sledována na SEM.

### 3.3.3 Tahové zkoušky - výsledky

Celkem bylo provedeno 5 testů v prostředí PWR se vzorky s ochrannou vrstvou a se vzorky referenčními, na stejných trhacích zařízeních byly provedeny i testy na vzduchu pro přímé porovnání výsledků dále byly provedeny 3 testy se vzorky s a bez chromové ochranné vrstvy na vzduchu při zvýšené teplotě a s větší rychlostí deformace. Vyhodnocení výsledků probíhalo podle dříve popsaného postupu. V Tab. 3.4 jsou uvedeny hodnoty meze kluzu (YS) a meze pevnosti (UTS) obou testovaných materiálů při jednotlivých testech.

Vzhledem k tomu, že testy byly ve většině případů zastaveny před selháním, při poklesu síly, nemělo smysl u většiny testů vyhodnocovat tažnost, byla vyhodnocována jen u pěti vzorků, u kterých došlo k selhání, konkrétně u 2 vzorků s ochrannou vrstvou a 3 vzorků referenčních při testech v PWR prostředí. Hodnoty tažnosti byly zapsány do Tab. 3.5. Tažnost samotné slitiny Opt. ZIRLO<sup>™</sup> byla výrazně vyšší než tažnost slitiny s ochrannou vrstvou, je vidět zpevňující charakter chromu, jehož vlivem dochází k menším deformacím.

Porovnání průběhů jednotlivých typických testů bylo zakresleno do grafů, v grafu na Obr. 3.9 (vlevo) lze vidět vliv teploty na průběh tahové zkoušky pro obě slitiny, graf na Obr. 3.9 (vpravo) pak ukazuje porovnání tahových zkoušek pro materiál s ochrannou vrstvou a referenční materiál v prostředí PWR. Graf zobrazující srovnání jednotlivých prostředí je zobrazen na Obr. 3.10 (vlevo) a v grafu na Obr. 3.10 (vpravo) je zobrazena závislost meze kluzu a meze pevnosti na teplotě při testech na vzduchu pro vzorky s i bez ochranné vrstvy.

Materiál <sup>a</sup>	Prostředí	$T(^{\circ}\mathrm{C})$	$\dot{m{\epsilon}}(\mathrm{s}^{-1})$	YS (MPa)	UTS (MPa)	prodloužení při max. síle (mm)
ZCr (W1)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	270	318	0,8
$\operatorname{ZCr}(W2)$	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	268	353	1,5
$\operatorname{ZCr}(W4)$	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	245	291	0,5
ZCr (W6)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	285	372	1,0
ZCr (W7)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	320	397	1,0
Z (W1)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	335	393	1,1
Z(W2)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	308	371	1,5
Z (W3)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	293	363	0,9
Z (W4)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	282	368	1,1
Z (W6)	PWR-13 MPa	320	$10^{-6}$	330	380	1,1
$\operatorname{ZCr}(W5)$	vzduch-atm	320	$10^{-6}$	363	456	1,0
ZCr (W3)	vzduch-atm	320	$10^{-6}$	386	445	1,0
Z (W5)	vzduch-atm	320	$10^{-6}$	346	474	1,0
ZCr (A1)	vzduch-atm	320	$10^{-5}$	372	439	0,9
ZCr (A2)	vzduch-atm	400	$10^{-5}$	251	310	0,8
ZCr (A3)	vzduch-atm	500	$10^{-5}$	80	100	0,7
Z(A1)	vzduch-atm	320	$10^{-5}$	344	428	1,0
Z(A2)	vzduch-atm	400	$10^{-5}$	269	312	0,8
Z (A3)	vzduch-atm	500	$10^{-5}$	65	90	0,9

Tab. 3.4: Meze kluzu a pevnosti při testování při vyšší teplotě v prostředí PWR a na vzduchu

 $^{\rm a}$  ZCr = Cr-coated Opt. ZIRLOTM - slitina Opt. ZIRLOTM s chromovou ochrannou vrstvou, Z = Opt. ZIRLOTM

Tab. 3.5: Hodnoty tažností pro vzorky, u kterých proběhla tahová zkouška až do selhání



Obr. 3.9: Průběhy tahových zkoušek na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C a rychlosti deformace  $10^{-5}$  s<sup>-1</sup> (vlevo), vybrané průběhy tahových zkoušek v prostředí PWR (vpravo) - pozorování vlivu chromové ochranné vrstvy (ZCr - vzorky s chromovou ochrannou vrstvou, Z - referenční vzorky Opt. ZIRLO<sup>TM</sup>)

Ze srovnání jednotlivých průběhů tahových zkoušek v grafech na Obr. 3.9 a Obr. 3.10



Obr. 3.10: Srovnání průběhu tahových zkoušek v prostředí PWR a na vzduchu (vlevo), naměřená závislost meze kluzu a meze pevnosti na teplotě pro materiál bez a s ochrannou vrstvou na vzduchu (vpravo)

lze pozorovat, že při zkouškách na vzduchu vykazují obecně vyšší mez kluzu i mez pevnosti vzorky s ochrannou vrstvou (jen při teplotě 400 °C byl pozorován opačný trend). Ale rozdíly v hodnotách mezí mezi vzorky s a bez ochranné vrstvy jsou zanedbatelné, v řádu jednotek MPa. Naopak při testech v PWR prostředí byly sledovány vyšší meze u vzorků bez ochranné vrstvy než u vzorků s ochrannou vrstvou, rozdíly byly v řád desítek MPa. Z grafu na Obr. 3.9 je také zřejmé, že průběhy některých testů jsou výrazně odlišnější od ostatních, pravděpodobně to může být dáno, nepřesným uchycením vzorku, vadou na vzorku z výroby nebo špatným utažením čelistí trhacího stroje.

Při porovnání tahových zkoušek v jednotlivých prostředích v grafu na Obr. 3.10 (vlevo) je zřejmé, že na vzduchu je při zkouškách dosahováno vyšších hodnot meze kluzu i meze pevnosti než v prostředí PWR. Naměřené rozdíly mezi jednotlivými prostředími jsou neočekávatelně velké a bylo by třeba ověřit kalibrační rovnice přístroje pro vysoké tlaky.

Korozní potenciál byl měřen u všech testů, které probíhaly v autoklávu v prostředí PWR, elektrody byly tedy přivařeny i ke vzorkům bez ochranné vrstvy (až na jeden vzorek bez ochranné vrstvy, kam se nepodařilo elektrodu přivařit). Ze zaznamenaných dat korozního měření, která jsou v závislosti na čase spolu se zatěžující sílou zobrazena pro jednotlivé testy v grafech na Obr. 3.11, Obr. 3.12, Obr. 3.13, Obr. 3.14 a Obr. 3.15, nelze jednoznačně určit trend vývoje korozního potenciálu v závislosti na praskání chromové ochranné vrstvy. V měřeních korozního potenciálu je jasně vidět okamžik roztržení vzorku, u části měření lze pozorovat i výkyvy v měření, které by mohly být v oblasti vzniku prasklin v chromové vrstvě, to ale nelze v takto malém počtu měření jednoznačně stanovit.



Obr. 3.11: Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v prostředí PWR se vzorky s chromovou ochrannou vrstvou (ZCRW1 - vlevo, ZCRW2 - vpravo)



Obr. 3.12: Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v prostředí PWR se vzorky s chromovou ochrannou vrstvou (ZCRW4 - vlevo, ZCRW6 - vpravo)



Obr. 3.13: Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v prostředí PWR se vzorky s a bez chromové ochranné vrstvy (ZCRW7 - vlevo, ZW2 - vpravo)

Nakonec byl analyzován stav vzorků po proběhlých tahových zkouškách. Po zkouškách v PWR prostředí po otevření autoklávu, kdy bylo zároveň zkontrolováno, že usazení vzorků drželo po celou dobu testu správně, bylo ihned viditelné zoxidování obou typů vzorků černým oxidem. Stav vzorku ihned po otevření autoklávu a jeho černé zoxidování lze vidět na Obr. 3.16, bílý prášek na snímku z autoklávu je sražená kyselina boritá z PWR prostředí.

Po zkouškách na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C bylo ihned po testech pozorováno zoxidování vzorků bez chromové ochranné vrstvy (míra zoxidování rostla



Obr. 3.14: Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v prostředí PWR se vzorky bez chromové ochranné vrstvy (ZW3 - vlevo, ZW4 - vpravo)



Obr. 3.15: Časová závislost síly a korozního potenciálu pro tahové zkoušky v prostředí PWR se vzorky bez chromové ochranné vrstvy (ZW6)

s rostoucí teplotou), jednotlivé snímky vzorků po testu jsou na Obr. 3.17. U vzorků s chromovou vrstvou míra viditelnosti zoxidování vnější strany vzorku silně závisela na teplotě, zatímco po testu při teplotě 320 °C nebylo viditelné žádné zoxidování, po testu při teplotě 500 °C je černý oxid zřejmý (viz Obr. 3.18). Zároveň bylo u všech vzorků s chromovou ochrannou vrstvou po testech na vzduchu vidět popraskání chromové vrstvy v aktivní části vzorku. Popraskání chromové vrstvy u vzorků po testech v PWR prostředí se také objevilo u všech vzorků s ochrannou vrstvou, ne u všech to ale bylo možné sledovat ihned po ukončení testu pouhým okem a bylo to až posléze potvrzené na OM.

Analýza vzorků na optickém mikroskopu sloužila především k rychlému a nenáročnému zmapování povrchu vzorků, k určení, zda došlo k popraskání ochranné vrstvy, a ke stanovení, zda nedošlo k selhání vlivem nějakého jiného jevu, např. defektu v materiálu z výroby. Snímky z OM nejsou ostré v celé zachycené oblasti, to je dáno válcovým tvarem vzorků, ale i tak jsou dostatečné k určení trendu ve velikosti a hustotě prasklin ochranné vrstvy. Očekávaným jevem byl vznik prasklin kolmých ke směru zatěžování. U vzorků z PWR prostředí (Obr. 3.19), jejichž testování bylo pozastaveno před selháním vzorků při deformacích 11 % a 15,5 % byly naměřeny koncentrace prasklin chromové vrstvy přibližně mezi 7 až 11 prasklinami na mm délky a 8 až 15 prasklinami na mm délky, u vzorku z PWR prostředí, který při tahové zkoušce selhal byla



Obr. 3.16: Stav vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po tahové zkoušce v prostředí PWR

naměřena koncentrace prasklin chromové vrstvy od 6 do 19 prasklin na mm délky po dosažení deformace 17,5 %. Intervaly v hodnotách koncentrace prasklin jsou dány vzdálenosti od místa vzniku krčku, na krajích aktivní délky vzorku byly menší koncentrace než v centru. Stejná závislost byla sledována i ve velikosti prasklin, nejmenší byly na krajích aktivní délky v místě jejich malé koncentrace a nejširší byly v místě největší deformace ve středu aktivní délky vzorku. U neroztržených vzorků po tahové zkoušce byly šířky prasklin v rozmezí 1-7  $\mu$ m, u roztrženého vzorku se šířky prasklin chromové vrstvy pohybovaly v rozmezí 1-32  $\mu$ m v závislosti na vzdálenosti od místa selhání, u kterého byly praskliny nejširší.

Při vyhodnocení praskání ochranné vrstvy na vzduchu (Obr. 3.20) je nutné uvažovat, že nedošlo k selhání, maximální deformace byla cca 20 % a hustota prasklin se pohybovala od 5,5 do 8,5 prasklin na mm délky. Šířka prasklin se stejně jako u testů v prostředí pohybovala od jednotek  $\mu$ m do cca 45  $\mu$ m v závislosti na vzdálenosti od místa největší deformace.

Tato pozorování lze vzdáleně srovnat se sledováním vývoje prasklin chromové ochranné vrstvy při testech v Číně [20] při tahových zkouškách při pokojové teplotě a při 400 °C se základní slitinou Zry-4 s 10  $\mu$ m tlustou chromovou vrstvou. Při tahové zkoušce při pokojové teplotě byla hustota prasklin v chromové vrstvě při deformaci 8 % skoro 13 prasklin na mm délky. Při zvýšené teplotě (400 °C) byla hustota prasklin několikanásobně nižší, při deformaci 15 % byla cca 1,5 praskliny na mm délky. Další sledování praskání chromové ochranné vrstvy bylo pozorováno při testování ATF ve Francii [37], zde prováděli mechanické testy při pokojové teplotě se slitinou M5 jako základním materiálem a 15  $\mu$ m tlustou chromovou vrstvou. Bylo pozorováno, že kolem deformace 0,4 % začaly vznikat praskliny v chromové vrstvě, dále v rozmezí deformace 0,4-1 % rychle narůstala jejich hustota, která se blížila saturovanému stavu a při vyšších deformacích už příliš nerostla, saturovaná hodnota hustota prasklin se pohybovala v in-



Obr. 3.17: Stav vzorků bez chromové ochranné vrstvy po tahových zkouškách na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C

tervalu 9-10 mm<sup>-1</sup>. Velikost prasklin byla měřena při deformaci 6 % a pohybovala se okolo 3 µm. Tyto výsledky nelze přímo srovnávat s touto prací, testování probíhalo při rozdílné rychlosti deformace (obě studie v řádu  $10^{-4}$ ) a s rozdílnými základními slitinami.

Lepší rozlišovací schopnost než OM má elektronový mikroskop, a proto byla část vzorků analyzována na SEM. Na snímcích na Obr. 3.21 je vidět povrch vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po tahové zkoušce na vzduchu při teplotě 320 °C.

### 3.4 Creepové zkoušky palivového pokrytí

Stejně jako pevnostní chování zirkoniových palivových pokrytí i creepové chování je anizotropní a pro úplný popis je třeba sledovat odezvu materiálu jak v axiálním, tak tangenciálním směru. Creepové zkoušky probíhají při konstantním zatížení materiálu za konstantní teploty a je sledována deformace v závislosti na čase. Celkový průběh creepu lze rozdělit na tři oblasti primární, sekundární a terciální (viz Obr. 3.22). Z hlediska modelování creepu ve výpočetních kódech je nejdůležitější sekundární (steady-state, ustálená) oblast, která trvá nejdelší dobu, a proto jsou dle jejího průběhu vytvářeny modely. Při creepové zkoušce jsou obvykle sledovány všechny tři oblasti a zkouška je ukončena selháním vzorku.

Používá se několik typů zkoušek k testování palivových pokrytí. Jedním z přístupů je testování několika centimetrů dlouhého segmentu plné trubky pokrytí, zatěžování je zprostředkováváno konstantním vnitřním přetlakem a je biaxiální, při zkoušce dochází k vyboulení pokrytí až do prasknutí. Dalším způsobem je použití stejné geometrie jako při tahových zkouškách, jen průběh je odlišný (test není řízen deformací, ale silou,



Obr. 3.18: Stav vzorků s chromovou ochrannou vrstvou po tahových zkouškách na vzduchu při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C

která je po celou dobu konstantní). Zatěžování vzorku je uniaxiální a testování udává vlastnosti vždy jen v daném směru.

Rychlost creepové deformace výrazně závisí na velikosti zatížení a na teplotě, s rostoucí teplotou i zatížením roste rychlost deformace. Dále je závislá také na typu slitiny a způsobu výroby trubky.

### 3.4.1 Historicky provedené testování

Creepové chování zirkoniových slitin bylo sledováno při celé řadě experimentů. Základní poznatky byly odvozeny z prvních testů se slitinou Zircaloy. V jaderném odvětví jsou rozlišovány dva typy creepů, teplotní a radiační creep. Jak už název napovídá teplotní creep je vysoce závislý na teplotě a na zatížení, byl pozorován exponenciální nárůst rychlosti deformace s rostoucí teplotou a rostoucí rychlost creepu s rostoucím napětím, radiační creep je závislý na toku rychlých neutronů. Teplotní creep ozářeného materiálu je při stejných podmínkách menší než neozářeného, protože ozářený materiál je radiačně zpevněný. Creepové chování je výrazně ovlivněné také způsobem výroby palivové trubky. Při napětích menších než 12 MPa je rychlost creepu nižší s rostoucí teplotou žíhání, tj. RXA slitiny mají menší deformaci než SRA slitiny. Při vyšších napětích je naopak rychlejší deformace u RXA slitin. [28]

Byla provedena celá řada creepových zkoušek se staršími typy slitin, z jejichž výsledků byly odvozeny jednotlivé creepové korelace (viz Obr. 2.5 a Příloha A). Experimentálních creepových měření s typy pokrytí, která jsou uvažována jako pokročilé typy jaderného paliva, konkrétně s konceptem s chromovou ochrannou vrstvou, zatím nebylo provedeno takové množství. Např. ve Francii bylo při vícero semiintegrálních testech simulujících LOCA u vzorků Zry-4 s chromovou ochranou vrstvou pozorováno



Obr. 3.19: Fotografie z optického mikroskopu vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po tahové zkoušce v PWR prostředí, užší praskliny ochranné vrstvy na kraji aktivní deformované části (vlevo), širší praskliny ochranné vrstvy v oblasti blízké roztržení vzorku (vpravo)



Obr. 3.20: Fotografie z optického mikroskopu vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po tahové zkoušce na vzduchu při teplotě 320 °C, užší praskliny ochranné vrstvy na kraji aktivní deformované části (vlevo), širší praskliny ochranné vrstvy v oblasti maximální deformace (vpravo)

menší vyboulení způsobené menším creepem [5,18].

### 3.5 Experimentální část - Creepové zkoušky

Creepové zkoušky probíhaly v plzeňském oddělení Centra výzkumu v Řeži (CVŘ). Zirkoniové pokrytí s chromovou ochrannou vrstvou i bez ochranné vrstvy bylo zkoušeno v tangenciálním směru na vzduchu při vysokých teplotách odpovídajícím teplotám palivového pokrytí na začátku vysokoteplotní projektové havárii se ztrátou chladiva (LOCA).



Obr. 3.21: Povrchové praskliny chromové ochranné vrstvy po tahové zkoušce na vzduchu při 320 °C



Obr. 3.22: Typické creepové chování, závislost deformace v čase, upravené z [48]

### 3.5.1 Metodika

Zatěžování vzorků bylo prováděno na elektromechanickém stroji KAPPA 100 SS-CF, na táhla stroje byl upevněn přípravek z nerezové oceli určený a vyrobený pro tangenciální zkoušky s prstýnkovými vzorky. Přípravek i s upevněným vzorkem byl umístěn do středu pece, přímo k neaktivní části vzorku byl připevněn řídící termočlánek, další dva termočlánky, jejichž pomocí byla zajišťována stálost a homogenní rozložení teploty v peci, byly připevněny k horní a dolní části přípravku. Ke střední části přípravku byl přichycen také kontaktní extenzometr, který měřil po celou dobu testu prodloužení vzorku. Připravená aparatura k testu je zobrazena na Obr. 3.23 (vlevo). Prodloužení bylo zaznamenáváno také na příčníku, zde bylo měřené prodloužení větší z důvodu deformování celého experimentálního sestavení. Celá aparatura byla následně zavřena do vysokoteplotní pece (Obr. 3.23 (vpravo)).



Obr. 3.23: Upevnění vzorku v přípravku a připravení na creepový test před uzavřením do vysokoteplotní pece

Ještě před samotným umístěním vzorku do přípravku byla vynulována zatěžující síla. Poté už byl celý průběh testu řízen softwarově tak, že nejprve došlo k ohřátí vzorku na požadovanou teplotu a její ustálení, tento krok trval přibližně 3 hodiny. Po dosažení a ustálení požadované teploty došlo k zatížení vzorku na zadané napětí, to trvalo v řádu jednotek minut v závislosti na velikosti cílové síly. Celý test se nakonec zastavil při přetržení vzorku a ihned došlo i k vypnutí pece a začátku chlazení.

#### Paramtery

Jak již bylo zmíněno, zkoušky probíhaly na vzduchu při vysokých teplotách v rozmezí 700-850 °C. Vzhledem k rychlosti oxidace zirkoniových slitin při takto vysokých teplotách a délce náběhu na teplotu byly zkoušky prováděny jen do teploty 850 °C, i přestože experimentální zařízení by to principiálně umožňovalo a bylo to původně zamýšleno i při teplotách kolem 950 °C. Při takto vysokých teplotách by oxidace zirkoniové slitiny byla tak velká, že creepové měření by bylo výrazně ovlivněno a zkresleno oxidací a jeho porovnání s dalšími creepovými testy by nedávalo smysl.

Dále byly vybrány dvě síly, na které byly vzorky při testech zatíženy: 30 a 60 N. Při prvním odhadu, tedy zanedbání oxidace a uvažování plné tloušťky vzorku, odpovídají tyto síly přibližnému napětí ve stěně vzorku 12 a 24 MPa. Tyto obvodové napětí by v uzavřeném vzorku nebo přímo v palivovém pokrytí přibližně odpovídaly vnitřním tlakům 1,7 a 3,4 MPa.

#### Vyhodnocení

Nejdříve byly naměřené prodloužení přepočítány na deformace ze vztahu (3.2) a byly vykresleny typické creepové křivky závislosti deformace na času. Z nich bylo

možné porovnat vliv ochranné vrstvy, teploty i zatěžující síly. Pro další analýzu testů a možnost odvození creepových korelací bylo dále nutné určit rychlost deformace a napětí. Rychlost deformace byla určována pro každý test ze sekundární části creepové křivky jako směrnice. Napětí bylo počítáno ze vzorce (3.1), kde jako počáteční plocha byla uvažována plocha kovu po průřezu vzorkem po náběhu na teplotu, kdy část vzorku zoxidovala. Zoxidovaná tloušťka byla počítána z parabolického zákona z Cathcart-Pawelovy korelace pro Zry-4 [7]:

$$\frac{\mathrm{d}r_{\mathrm{ox}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{r_{\mathrm{ox}}} \cdot K \cdot \exp(-\frac{E}{RT}) \tag{3.4}$$

kde  $r_{\rm ox}$  je tloušťka oxidu a koeficienty K a E jsou pro Cathcart-Pawelovu korelaci uvedeny v Tab. 3.6. Z naměřených časů náběhu na teplotu byly určeny doby, kdy výrazněji

Tab. 3.6: Koeficienty pro Cathcart-Pawelovu korelaci

$$\frac{K | 1,126 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}}{E | 1,502 \cdot 10^5 \text{ J/mol}}$$

docházelo k oxidaci a z toho byla spočítána narostlá tloušťka oxidu na začátku creepové zkoušky. Z té byla z Pilling-Bedworthova poměru počítána zoxidovaná tloušťka pokrytí a dále nová tloušťka zirkoniové slitiny, z níž už byla počítána nová plocha pro výpočet napětí před zkouškou. U vzorků s chromovou ochrannou vrstvou byla uvažována jedno-stranná oxidace vzorku (uvnitř), oxidace chromové vrstvy nebyla uvažována, tloušťka chromové oxidické vrstvy byla vůči tloušťce zirkoniové oxidické vrstvy zanedbatelná. U referenčních vzorků bez ochranné vrstvy byla uvažována oboustranná oxidace.

### 3.5.2 Výsledky

Z prvních výsledků už během creepových zkoušek bylo zřejmé, že vzorky s chromovou ochrannou vrstvou creepují výrazně pomaleji a vydrží přibližně dvojnásobnou dobu do selhání než vzorky bez ochranné vrstvy. Z části je toto pozorování dáno již zmíněnou oboustrannou oxidací vzorků bez ochranné vrstvy, ale i přesto bylo creepové chování vzorků s ochrannou vrstvou lepší. Creepové chování bylo ovlivněno teplotou a zatížením, s rostoucí teplotou i zatížením je creep rychlejší. Srovnání závislostí creepové deformace aktivních částí vzorku na čase vzorků s i bez ochranné vrstvy při teplotách 700 °C, 775 °C a 850 °C a zatíženích 30 N a 60 N je zobrazeno v grafech na Obr. 3.24 a Obr. 3.25.

Dále byly srovnávány rychlosti creepové deformace sekundární (ustálené) fáze. V grafech na Obr. 3.26 jsou zobrazeny rychlosti creepu při jednotlivých testech, vlevo v závislosti na teplotě, při které test probíhal. Je možné sledovat, že materiál s ochrannou vrstvou creepoval výrazně pomaleji než vzorky bez ochranné vrstvy, při totožné teplotě a zatížení byla rychlost deformace u vzorků s chromovou ochrannou vrstvou přibližně



Obr. 3.24: Časová závislost deformace vzorku s a bez ochranné vrstvy při zatížení 30 N a 60 N a teplotách 700 °C (vlevo) a 850 °C (vpravo)



Obr. 3.25: Časová závislost deformace vzorku s a bez ochranné vrstvy při zatížení 30 N a 60 N a teplotě 775 °C

dvakrát menší než u vzorků bez ochranné vrstvy. Při všech testovacích teplotách byla rychlost deformace vzorků s ochrannou vrstvou při zatížení 60 N přibližně rovna rychlosti deformace vzorků bez ochranné vrstvy při zatížení 30 N. Dále je možné pozorovat, že rychlost creepu vzorků s chromovou ochrannou vrstvou při teplotách 700 °C a 775 °C a při zatížení 30 N byla zanedbatelná oproti creepové rychlosti při ostatních testech.

V grafu na Obr. 3.26 (vpravo) je zobrazena rychlost sekundárního creepu v závislosti na napětí. Napětí bylo počítáno z dané zatěžující síly a při úvaze zoxidování nepokryté strany vzorku podle Cathcart-Pawelova vztahu. Je zřejmé, že levá část grafu odpovídá zatěžující síle 30 N a pravá 60 N a že vzorky bez ochranné vrstvy, které zoxidovaly oboustranně byly po náběhu na teplotu vystavěny většímu napětí při stejném zatížení než vzorky s chromovou ochrannou vrstvou, které výrazně zoxidovaly jen z jedné strany. I v tomto grafu lze pozorovat výrazně pomalejší creep u vzorků s chromovou ochrannou vrstvou.

Dále byla porovnávána maximální deformace při roztržení vzorku, její hodnoty a srovnání u jednotlivých testů jsou v grafu na Obr. 3.27. Lze pozorovat, že vzorky bez chromové ochranné vrstvy se deformovaly výrazně více než vzorky s chromovou ochrannou vrstvou, a to především při teplotách 700 °C a 775 °C. Při teplotě 850 °C byl tento trend také pozorován, ale nebyl tak výrazný, to je pravděpodobně dáno vyšší rychlostí deformace obecně při vysokých teplotách.



Obr. 3.26: Rychlost sekundárního creepu v závislosti na teplotě pro vzorky s a bez ochranné vrstvy (vlevo), rychlost sekundárního creepu v závislosti na napětí pro vzorky s a bez ochranné vrstvy při uvažování zoxidování vzorků v průběhu náběhu na teplotu (vpravo)



Obr. 3.27: Maximální deformace při creepových testech v závislosti na teplotě při testu - srovnání vzorků s a bez ochranné vrstvy při zatíženích 30 N a 60 N

Nakonec byl charakterizován stav vzorků po creepových zkouškách. Na Obr. 3.28 jsou fotky vybraného vzorku bez ochranné vrstvy (vlevo) a s chromovou ochrannou vrstvou (vpravo). U referenčního vzorku bez ochranné vrstvy je vidět výrazný bílý oxid z obou stran vzorku a jeho popraskání v oblastech největší deformace. Na vzorku s chromovou ochrannou vrstvou je možné pozorovat stejné zoxidování z vnitřní strany vzorku, z vnější strany vzorku je vidět tmavý oxid chromu.

Stav vzorků po creepových zkouškách byl sledován také elektronovým mikroskopem. Na Obr. 3.29 jsou detailní snímky chromové ochranné vrstvy po creepové zkoušce při 700 °C a zatížení 60 N. Na levém snímku lze vidět praskliny v chromové vrstvě v blízkosti oblasti maximálně deformace a následného přetržení vzorku, v blízkosti praskliny v chromové vrstvě lze dále pozorovat zoxidovanou část zirkoniové slitiny, která byla před prasknutím chromové vrstvy chráněna před oxidací. Na pravém snímku je detailní pohled na místo přetržení vzorku, jedná se o místo největší deformace, po stejné creepové zkoušce (700 °C a 60 N). Na vrchní straně vzorku na snímku (vnější strana vzorku) jsou vidět zbytky chromové ochranné vrstvy a pod nimi je zoxidovaná zirkoniová slitiny. Z vnitřní strany vzorku je možné pozorovat popraskaný oxid zirkoniové slitiny.



Obr. 3.28: Stav vzorků po creepové zkoušce, vlevo - Opt. ZIRLO<sup>TM</sup>, vpravo - Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou



Obr. 3.29: Příčný řez vzorku s chromovou ochrannou vrstvou po creepové zkoušce (700 °C a 60 N), popraskání chromové ochranné vrstvy v oblasti větší deformace (vlevo), chromová ochranná vrstva mimo deformovanou oblast (vpravo)

Na snímcích na Obr. 3.30 je vyobrazen stav vzorku bez chromové ochranné vrstvy po creepové zkoušce se stejnými parametry jako na snímcích se vzorky s chromovou ochrannou vrstvou (700 °C a 60 N). Na levém snímku je možné vidět oboustranně zoxidovanou zirkoniovou slitinu v aktivní deformované části vzorku, kde je oxid výrazně popraskaný. Na pravém snímku je zobrazena oblast mimo aktivní část vzorku, jejíž deformace byla v průběhu creepové zkoušky minimální.



Obr. 3.30: Příčný řez vzorku se slitiny Opt. ZIRLO<sup>m</sup> po creepové zkoušce (700 °C a 60 N), praskliny vzniklé v oxidu z obou strany vzorku v deformované části (vlevo), zoxidování vzorku v oblasti vzdálené od deformované části (vpravo)

## Kapitola 4

# Modelování termomechanického chování pokročilého jaderného paliva

### 4.1 Použité termomechanické kódy

K modelování termomechanického chování jaderného paliva byly vybrány dva navzájem se doplňující výpočetní kódy, a to FRAPCON-4.0 a FRAPTRAN-2.0. Oba kódy jsou vyvíjeny v USNRC a jsou založeny na programovacím jazyku Fortran. Zatímco prvně zmiňovaný slouží k termomechanickým výpočtům ustáleného stavu, tedy nominálního provozu, druhý zmiňovaný je určen k bezpečnostním analýzám a výpočtům transientních stavů, tj. abnormálního provozu a postulovaných havárií. S kódy lze provádět výpočty s palivem v lehkovodních reaktorech a jejich nejaktuálnější (při výpočtech použité) verze obsahují korelace pro většinu v současnosti používaných slitin pokrytí.

Modelování termomechanického chování pokročilých typů jaderného paliva je značně složitější, vzhledem k omezenému počtu experimentálních dat, nebyl zatím plně vyvinut výpočetní kód, který by měl implementované veškeré modely pro ATF (pro oba uvažované typy výpočtu - ustálený i transientní). V této práci byly pro potřeby výpočtu termomechanického chování pokročilého paliva použity již zmíněné kódy FRAPCON a FRAPTRAN, které byly modifikovány na KJR FJFI. Jednotlivé modifikace jsou v kódech implementovány ve formě korelací pro různé termofyzikální a materiálové vlastnosti, které byly odvozeny na základě dostupných experimentálních dat se zirkoniovými slitinami pokrytými chromovou ochrannou vrstvou anebo odhadnuty na základě dostupných charakterizací chromu.

Pro výpočet nominálního provozu a ozařovací historie byl použit modifikovaný FRAPCON, označený jako FRAPCON-4.0P1-CTU [3]. V tomto kódu je oproti klasickému kódu FRAPCON přidán další typ pokrytí pod číslo 8, který označuje zirkoniovou slitinu Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou - icm = 8 Cr-coated Optimized ZIRLO<sup>TM1</sup>. Tento typ pokrytí vychází z modelů pro slitinu Opt. ZIRLO, jen některé korelace jsou pozměněné, jejich seznam i s novými hodnotami je v Tab. 4.1.

Vlastnosti	Korelace			
Bod tání eutektika Cr-Zr	$T_{\rm t,Cr-Zr} \sim 1600 {\rm ~K}$			
Hustota	$ \rho_{\rm Cr} = 7.15 \ {\rm gcm}^{-3} $			
Modul pružnosti	$E = f(T)^{a}$			
Poissonovo číslo	$\nu = 0,22$			
Tepelná kapacita	$C_{\rm p} = f(T)^{\rm b}$			
Tepelná vodivost	$\lambda = \mathbf{f}(T)^{\mathbf{c}}$			
Koeficient teplotní roztažnosti	$\alpha = f(T)^d$			
Emisivita	$\epsilon = \mathbf{f}(T)$ - dáno tabelárně e			
Oxidace	$w_g = f(T,t)^f$			
Teplotní creep	$\dot{\epsilon} = \mathrm{f}(T,\sigma)^{\mathrm{g}}$			
<sup>a</sup> $E(T) = (-2,5 \cdot 10^{-5} - 0,01T + 264,11)$ G	Pa			
<sup>b</sup> $C_{\rm p}(T) = (483, 2-0, 09T + 3, 39 \cdot 10^{-4}T^2 - 10^{-4}T^2)$	$1,28 \cdot 10^{-7} T^3$ ) Jkg <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>			
$\lambda(T) = (101,75-0,06T+4,85\cdot10^{-5}T^2-2)$	$2,07 \cdot 10^{-8} T^3$ ) WK <sup>-1</sup> m <sup>-1</sup>			
$d\alpha(T) = (7,87-0,0015T+5,41\cdot10^{-7}T^2-1,27\cdot10^{-10}T^3)\cdot10^{-6} \text{ K}^{-1}$				
$e^{\epsilon}(589)=0.08, \epsilon(755)=0.18, \epsilon(923)=0.27, \epsilon(1089)=0.36, \epsilon(1255)=0.66$				
$fw_{q} = 4.83 \cdot 10^{-2} \exp(\frac{10.481}{T}) \sqrt{t} \text{ gcm}^{-2}$				
$\dot{s} \dot{\epsilon} = 3,2555 \cdot 10^{-40} \exp(-\frac{306268,8}{8,3145T}) \cdot \sigma^n \text{ s}^{-1}$				

Tab. 4.1: Modifikované vlastnosti pokrytí ve FRAPCON-4.0P1-CTU [3]

Výsledná hodnota dané veličiny je nakonec počítána ze vztahu:

$$P_{\rm CrZr} = r \cdot P_{\rm Cr} + (1-r) \cdot P_{\rm Zr} \tag{4.1}$$

kde  $P_{\rm Cr}$  je hodnota dané veličiny pro chrom a  $P_{\rm Zr}$  je hodnota dané veličiny pro zirkoniovou slitinu a r je poměr tlouštěk, počítaný podle následující rovnice:

$$r = \frac{t_{\rm Cr}}{t_{\rm Zr} + t_{\rm Cr}} \tag{4.2}$$

kde $t_{\rm Cr}$  je tloušťka chromové vrstvy <br/>a $t_{\rm Zr}$  je tloušťka základní zirkoniové slitiny.

Dále jsou v kódu implementovány vlastnosti oxidu chromu  $Cr_2O_3$ , jejich hodnoty a podrobnější informace k použitým korelacím jsou uvedeny v [3].

K výpočtům chování pokročilého jaderného paliva př<br/> postulované havárii byl použit modifikovaný kód FRAPTRAN-2.0-CTU [46]. Stejně jako u kódu FRAPCON i zde byl do původního kódu přidán nový typ pokrytí - CladType = 12 - Cr-coated Optimized ZIRLO<sup>TM2</sup> a pro tento typ pokrytí byly přidány korelace podobně jako v případě kódu

 $<sup>^1 \</sup>rm Navíc oproti ostatním typům pokrytí je nutné vložit tloušťku chromové vrstvy - udává ji<math display="inline">thkcoat$ v jednotkách metru.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Navíc oproti ostatním slitinám je nutné vložit tloušťku chromové vrstvy - *thkcoat* v metrech a pro výpočet kinetiky oxidace chromu nastavit *baker* = 1 a cathca = 0.

FRAPCON. Obecné vlastnosti (hustota a teplota tání) byly implementovány totožně a stejné hodnoty jako uvádí Tab. 4.1. Stejné hodnoty zůstaly také pro hodnotu Poissonova čísla a výpočty tepelné vodivosti, tepelné kapacity, součinitele teplotní roztažnosti a modulu pružnosti, u kterých bylo uvažováno, že dané korelace platí až do teploty 1500 K.

Pro emisivitu byla uvažována lineární závislost na teplotě a do kódu byla implementována korelace:  $\epsilon(T)=0,0008T-0,4316$ . Dále byl do kódu implementován oxidační model odvozený na základě experimentů vysokoteplotní oxidace v páře. Tato korelace má tvar:

$$w_g(t)^2 = w_g(t_0)^2 + k_1(T)^2(t - t_0)$$
, pro  $k_1$  platí  $:k_1(T) = 1735836 \cdot \exp(-\frac{16220}{T})$  (4.3)

kde  $w_g$  je hmotnostní přírůstek, T teplota, t čas a  $t_0$  čas na začátku transientu.

Z burst testů v UJP Praha, a.s. byly v [25] odvozeny korelace pro výpočet napěťového kritéria porušení slitiny Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou a v rámci stejné práce byly implementovány do kódu FRAPTRAN-2.0-CTU. Korelace byla odvozena jen v omezeném rozsahu teplot odpovídajícím  $\alpha$  fázi zirkonia a přechodové oblasti mezi  $\alpha$  a  $\beta$  fází zirkoniové slitiny a má klasický tvar odpovídající napěťovému kritériu porušení:

$$\sigma_{\rm B} = a \cdot \exp(-b \cdot T_{\rm B}) \tag{4.4}$$

kde  $\sigma_{\rm B}$  je napětí, při kterém dochází k selhání za daných podmínek,  $T_{\rm B}$  je teplota při selhání a *a* a *b* jsou experimentálně stanovené konstanty uvedené v Tab. 4.2. V ostatních teplotních intervalech byly použity původní korelace pro Opt. ZIRLO.

Tab. 4.2: Koeficient<br/>yaab pro napěťové kritérium pro slitinu Opt. ZIRLO<br/>mschromovou ochrannou vrstvou [25]

	a (MPa)	$b  ({\rm K}^{-1})$
$\alpha (900 \text{ K} < T < 1100 \text{ K})$	23404	0,00462
$\alpha + \beta \ (1100 \text{ K} < T < 1255 \text{ K})$	1174100	0,008611

Ze stejných testů [25] bylo odvozeno také napěťové kritérium pro samotnou referenční slitinu Opt. ZIRLO<sup>™</sup>. Odvozené koeficienty byly zapsány do Tab. 4.3 a napěťové kritérium bylo implementováno do kódu FRAPTRAN.

Tab. 4.3: Koeficienty  $a \neq b$  pro napěťové kritérium pro slitinu Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> [25]

	a (MPa)	$b  ({\rm K}^{-1})$
$\alpha (900 \text{ K} < T < 1100 \text{ K})$	26569	0,00457
$\alpha + \beta \ (1100 \text{ K} < T < 1255 \text{ K})$	1316100	0,00820

### 4.2 Odvození korelací z provedených experimentů

### 4.2.1 Pevnostní charakteristiky

K odvození pevnostních charakteristik a korelací pro koeficienty klasické stavové rovnice byla použita experimentální data z tahových zkoušek prováděných na vzduchu při různých teplotách a rychlostech deformace. Samotný výpočet potřebných koeficientů z experimentálních dat byl prováděn stejně jako v [55]. Stavová rovnice popisuje vztah mezi napětím a deformací následujícím způsobem:

$$\sigma = K\epsilon^n (\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon_0}})^m \tag{4.5}$$

kde  $\sigma$  je skutečné efektivní napětí,  $\epsilon$  je skutečná efektivní deformace,  $\dot{\epsilon}$  je okamžitá rychlost deformace,  $\dot{\epsilon}_0$  je označovaná jako základní rychlost deformace a K, m a njsou koeficienty stavové rovnice. Z úprav této rovnice lze získat vztahy pro stanovení stavových koeficientů z experimentálních dat, a to za předpokladu, že koeficienty Ka n nejsou závislé na rychlosti deformace a jednotlivé výpočty jsou provedeny při stejné teplotě. Za těchto podmínek jsou stavové koeficienty dány vztahy:

$$m = \frac{\ln \frac{R_{\rm YS}(\dot{\epsilon}_1)}{R_{\rm YS}(\dot{\epsilon}_0)}}{\ln \frac{\dot{\epsilon}_1}{\dot{\epsilon}_0}} \tag{4.6}$$

$$\epsilon_{\rm UTS} = \ln(1 + \epsilon_{\rm eng, UTS}) = \frac{n}{1+m} \tag{4.7}$$

$$R_{\rm UTS} \cdot \exp(\frac{n}{1+m}) = K \cdot \left(\frac{n}{1+m}\right)^n \tag{4.8}$$

kde K, m a n jsou koeficienty stavové rovnice, R je smluvní napětí dle indexu na mezi kluzu (YS) a mezi pevnosti (UTS),  $\epsilon_{\text{UTS}}$  je deformace na mezi kluzu,  $\epsilon_{\text{eng,UTS}}$  je inženýrská deformace na mezi kluzu a  $\dot{\epsilon}$  je rychlost deformace.

Vzhledem k tomu, že v kódu FRAPTRAN je výpočet koeficientů do stavové rovnice pro slitinu Opt. ZIRLO stejný jako pro slitiny Zircaloy, ale vlastnosti těchto slitin se liší, bylo odvození prováděno nejen pro vzorky s chromovou ochrannou vrstvou, ale i pro samotnou referenční slitinu Opt. ZIRLO<sup>™</sup>.

Nejprve byl ze vztahu (4.6) stanoven koeficient m z výsledků experimentů při teplotě 320 °C, které byly prováděny při rychlostech deformace  $10^{-5}$  s<sup>-1</sup> a  $10^{-6}$  s<sup>-1</sup>. Takto odvozený koeficient m byl velmi blízký korelaci používané ve FRAPTRAN pro slitiny Zry (viz graf na Obr. 4.1). Změny ve výpočtu při změně tohoto koeficientu byly zanedbatelné, a proto byl výpočet tohoto koeficientu pro oba dva materiály (Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s a bez chromové ochranné vrstvy) ponechán stejný jako pro slitinu Zry-4.

V druhém kroku byl odvozován koeficient n ze vztahu (4.7), pro oba materiály byl určen při teplotách 320 °C, 400 °C a 500 °C. Získané hodnoty koeficientu při daných teplotách byly zakresleny do grafu na Obr. 4.2 (vlevo), ve stejném grafu je zobrazena také korelace používaná výpočetními kódy a nově vytvořené korelace, které



Obr. 4.1: Teplotní závislost koeficient<br/>umkorelace používané ve FRAP kódech a odvozené hodnoty z experimentálních výsledků tahových zkoušek

vznikly proložením experimentálních dat křivkou a v oblasti, kde nebylo možné využít experimentální data byly odvozeny tak, aby se co nejvíce a se stejným trendem blížily hodnotám původní korelace pro Zry-4. Pro slitinu Opt. ZIRLO<sup>™</sup> je korelace následující:

$$T < 593 \text{ K}: \qquad n = \text{stejné jako pro Zry}$$
  
593 K  $\leq T < 773 \text{ K}: \qquad n = 0,00000033 \cdot T^2 - 0,00062771 \cdot T + 0,35571022$   
1200 K  $\leq T: \qquad n = \text{stejné jako pro Zry}$ 
(4.9)

kdeTje teplota v kelvinech. Odvozená korelace pro stejnou slitinu s chromovou ochrannou vrstvou má tvar:

 $T < 300 \text{ K}: \qquad n = 0,1046$   $300 \text{ K} \leq T < 593 \text{ K}: \qquad n = -0,00000044 \cdot T^2 + 0,00034378 \cdot T + 0,03749253$   $593 \text{ K} \leq T < 773 \text{ K}: \qquad n = 0,0000003 \cdot T^2 - 0,00056544 \cdot T + 0,32029429$   $1200 \text{ K} \leq T: \qquad n = \text{stejné jako pro Zry} \qquad (4.10)$ 

kde T je teplota v kelvinech.

Nakonec byly z experimentálních dat ze vztahu (4.8) počítány hodnoty koeficientu K pro jednotlivé materiály, jejich hodnoty jsou společně s korelací používanou ve FRAPTRAN zakresleny v grafu na Obr. 4.2 (vpravo). Hodnoty koeficientu K byly pro oba dva materiály velmi podobné, a proto byla odvozena jedna korelace pro oba, která byla následně do FRAPTRAN implementována pro oba materiály, a má následující tvar:

$$T < 593 \text{ K}: \qquad K = 859,020497 \cdot \exp(-0,000606 \cdot T)$$
  

$$593 \text{ K} \leq T < 773 \text{ K}: \qquad K = -2,5323 \cdot T + 2093,2$$
  

$$773 \text{ K} \leq T: \qquad K = 41541,021027 \cdot \exp(-0,007504 \cdot T) \quad (4.11)$$

kdeT je teplota v kelvinech a koeficient K je v jednotkách MPa. Všechny tyto korelace

byly implementovány do kódu FRAPTRAN do modulu ZrModels a subroutiny ckmn, korelace pro Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> byly vloženy pod ve FRAPTRAN již zavedenou slitinu Opt. ZIRLO (*CladType = 3 - Opt. ZIRLO*). Korelace pro Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou byly implementovány do FRAPTRAN-2.0-CTU, stejně jako výše zmíněné korelace pod nový typ pokrytí *CladType = 12 - Cr-coated Opt. ZIRLO<sup>TM</sup>*.



Obr. 4.2: Teplotní závislost koeficientu n, korelace používané ve FRAP kódech, experimentální data a z nich odvozené korelace (vlevo), teplotní závislost koeficientu K, korelace používané ve FRAP kódech, experimentální data a z nich odvozené korelace (vpravo)

### 4.2.2 Creepové koeficienty

Z druhé sady experimentů byly odvozovány creepové koeficienty pro klasický Nortonův vztah (2.27). Postup odvození byl stejný jako v [9], jen zjednodušený o jeho aplikaci jen v jednom směru, v tomto případě se jednalo jen o uniaxiální testy v tangenciálním směru, a proto nebylo třeba řešit přepočítávání koeficientů pomocí anizotropních koeficientů. Odvození stavělo na předpokladu, že napětový exponent *n* odpovídá směrnici logaritmické závislosti rychlosti deformace na logaritmu napětí (graf na Obr. 4.3 (vlevo)). U referenční slitiny Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> se hodnoty koeficientu *n* pohybovaly v rozmezí od 1 do 3, kdy hodnoty kolem 2,2 odpovídají  $\alpha$  fázi zirkonia a teplotám creepových zkoušek 700 °C a 775 °C. Při teplotě 850 °C, kdy je zirkoniová slitina v přechodové oblasti mezi  $\alpha$  a  $\beta$  fází, byla odvozená hodnota napětového exponentu 1,1. Pro slitinu s chromovou ochrannou vrstvou lze jen těžko najít nějaký vývoj koeficientu s teplotou, jeho hodnoty se pohybovaly v intervalu 1,3-3,5, kdy nejvyšší hodnota byla při teplotě 775 °C a nejnižší při teplotě 850 °C.

Podobným způsobem byly stanoveny hodnoty aktivační energie Q, toto odvození bylo založeno na předpokladu, že poměr  $\frac{Q}{R}$ , kde Q je aktivační energie v J/mol a Rje molární plynová konstanta v jednotkách JK<sup>-1</sup>mol<sup>-1</sup>), je roven směrnici logaritmické závislosti rychlosti deformace na reciproké teplotě. Hodnoty tohoto zlomku byly v jednotlivých teplotních intervalech zakresleny do grafu na Obr. 4.3 (vpravo). Hodnoty aktivační energie je nutné sledovat zvlášť v jednotlivých teplotních intervalech, první interval 700-775 °C odpovídá  $\alpha$  fázi zirkonia, druhý interval 775-850 °C odpovídá přibližně první polovině přechodové oblasti mezi jednotlivými fázemi. U samotné slitiny Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> se hodnota aktivační energie ve fázi  $\alpha$  pohybuje kolem 210 kJ/mol pro obě napětí (to odpovídá hodnotě aktivační energie používané kódy FRAPCON a FINIX - viz Příloha A), na začátku přechodové oblasti jsou hodnoty nižší a řádově se liší v závislosti na zatížení. Odvozené hodnoty aktivační energie pro slitinu s chromovou ochrannou vrstvou jsou značně nejednotné a nelze v nich pozorovat jasně danou závislost na teplotě.



Obr. 4.3: Odvození napětového exponentu a aktivační energie z creepových testů, logaritmická závislost rychlosti deformace na logaritmu napětí (vlevo), logaritmická závislost rychlosti deformace na reciproké teplotě (vpravo)

Nakonec byly oba odvozené koeficienty společně s hodnotami naměřenými při zkouškách dosazeny do rovnice (2.27) a pro jednolivé creepové zkoušky byl vyjádřen a spočítán koeficient A (někdy také označovaný jako strukturní parametr):

$$A_{\Theta} = \dot{\epsilon_{\Theta}} \cdot \exp(\frac{Q}{RT}) \cdot \sigma_{\Theta}^{-n}.$$
(4.12)

Výsledné hodnoty jsou shrnuty v Tab. 4.4, kde jsou zároveň porovnány s creepovými koeficienty odvozenými v [36] pro slitinu Zry-4. V tabulce je ukázáno, že zatímco odvozené hodnoty napěťového exponentu a aktivační energie se pohybují v podobných intervalech jako stejné koeficienty pro slitinu Zry-4, hodnoty koeficientu A se mezi jednotlivými testy výrazně lišily, a to až v jednotkách řádů (z tohoto důvodu nebyly pro Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou ani zapisovány do tabulky). Rozptyl v hodnotách koeficientu A je pravděpodobně dán malým počtem experimentálních měření a neopakováním měřeních na stejných parametrech, čímž nebylo možné vyloučit neodpovídající experimentální data. Obrovský rozptyl v odvozených hodnotách creepových koeficientů slitiny Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou může být dát i tím, že creepová korelace a její odvození v tomto tvaru nemusí být vhodné pro vícevrstvé materiály.

Tab. 4.4: Porovnání creepových koeficientů pro Zry-4 odvozených v [36] a creepovýc
koeficinetů odvozených z creepových zkoušek provedených v rámci této práce pro slitin
Opt. ZIRLO™ a stejnou slitinu v chromovou ochrannou vrstvou

		$\alpha$ fáze	$\alpha + \beta$	$\beta$ fáze
А	Zry-4	19370	0,24	7,9
$(MPa^{-n}s^{-1})$	Opt. ZIRLO	$1 - 8 \cdot 10^{7}$	0,3-32000	-
	Cr-ZIRLO			-
n	Zry-4	$5,\!89$	2,33	3,78
(-)	Opt. ZIRLO	2,2	$1,\!1$	-
	Cr-ZIRLO	$1,\!9-\!3,\!5$	$1,\!3$	-
Q	Zry-4	320	102	142
(kJ/mol)	Opt. ZIRLO	210	16-124	-
	Cr-ZIRLO	95-216	149-345	-

K dalšímu vyhodnocení dat a celkovému creepovému chování by byl nutný větší počet experimentálních dat. Vzhledem k velkému rozptylu odvozených koeficientů nebyly tyto hodnoty a celá tato korelace implementována do výpočetního kódu. Dalším důvodem je také řešení vysokoteplotního creepu v kódu FRAPTRAN, které není prováděno pomocí Nortonova creepového vztahu.

### 4.3 LOCA simulace - IFA-650.9

K výpočtu chování paliva při postulované havárii byl vybrán jeden ze scénářů LOCA havárie z haldenských experimentů. Konkrétně byl zvolen test označený jako IFA-650.9, při kterém byl testován segment palivového proutku s vysokým vyhořením. Jednalo se o standardní 15x15 PWR palivo francouzského Framatome ANP, které bylo 7 kampaní v reaktoru švýcarské jaderné elektrárny Gösgen (vstupní teplota vody 292 °C a tlak 15,4 MPa) a výkonová historie je zobrazena v grafu na Obr. 4.4. Základní rozměry palivového proutku a jeho stav před experimentem v Haldenu jsou v Tab. 4.5. [38]



Obr. 4.4: Výkonová historie palivového proutku před LOCA experimentem IFA-650.9

Pokrytí	Zry-4 (SRA)
Palivo	$UO_2$
Aktivní délka - základní ozáření/experiment(mm)	3550/480
Vnější průměr pokrytí (mm)	10,75
Tloušťka pokrytí (mm)	0,752
Průměr pelety (mm)	9,13
Výška pelety (mm)	8
Obohacení (%)	3,5
Průměrné vyhoření (MWd/kgU)	89,9
Plynná náplň proutku	95 % Ar a 5 % He
Plnící tlak (MPa)	4

Tab. 4.5: Přehled parametrů testovaného proutku - IFA-650.9

Samotná LOCA simulace probíhala podobným způsobem jako všechny předešlé testy série IFA (podrobnější popis např. v [24] nebo [39], přímo experimentu IFA-650.9 v Příloze B). Před zahájením LOCA testu byl v testovací smyčce tlak kolem 7 MPa, následně byla inicializována LOCA otevřením ventilu do vedlejší nádrže. Průběh tlaku chladiva před a po inicializaci LOCA simulace byl vykreslen do grafu na Obr. 4.5, kde je vidět začátek LOCA v čase 300 sekund a následný okamžitý pokles tlaku. Ve stejném grafu je zobrazen také průběh maximální teploty pokrytí, která v dolní části segmentu palivového proutku dosáhla při LOCA simulaci hodnoty 1200 °C.

K selhání proutku po vyboulení vlivem vysokého vnitřního tlaku došlo přibližně ve 133 sekundě, v čase 143 s došlo k zahájení sprchování a v čase 316 s bylo simulováno odstavení reaktoru odstavením topného tělesa. Selhání proutku bylo možné pozorovat rapidním snížením vnitřního tlaku proutku. Selhání bylo pozorováno v oblasti maximální teploty (při teplotě 862 °C), kde došlo ještě před selháním k vyboulením palivového pokrytí.



Obr. 4.5: Průběh tlaku chladiva a teploty pokrytí při experimentu - IFA-650.9

### 4.3.1 Výpočet

Nejprve byly pomocí kódu FRAPCON (ukázka vstupního souboru je v Příloze C) počítány vstupní parametry pro výpočet scénáře havárie LOCA. Byly provedeny tři výpočty základního ozáření, první výpočet měl nejpřesněji modelovat historii testovaného proutku a jako pokrytí byla uvažována slitina Zry-4, další dva výpočty sloužili k porovnání chování jednotlivých druhů pokrytí. V druhém výpočtu, který sloužil jako referenční k poslednímu, byla uvažována slitina Opt. ZIRLO a ve třetím pak byla uvažována slitina Opt. ZIRLO<sup>™</sup> s chromovou ochrannou vrstvou. Do Tab. 4.6 byly zapsány základní parametry palivového proutku vypočítané po sedmi kampaních v energetickém reaktoru pro zmíněné tři typy palivového pokrytí. Průběh tloušťky oxidické vrstvy

Tab. 4.6: Počáteční parametry vypočítané kódem FRAPCON-4.0 a FRAPCON-4.0-CTU pro tři různí typy pokrytí

	1. výpočet	2. výpočet	3. výpočet
Pokrytí	Zry-4	Opt. ZIRLO	Cr-Opt. ZIRLO
Vyhoření (MWd/kgU)	87,4	87,4	87,4
Maximální tloušťka oxidu $(\mu m)$	47	22,9	3,7
Koncentrace vodíku (ppm)	309	178	12,7

a koncentrace vodíku byly následně zakresleny do grafů na Obr. 4.6. Je možné vidět, že obě hodnoty (jak tloušťka oxidické vrstvy, tak koncentrace vodíku) jsou pro výpočet s pokrytím s chromovou ochrannou vrstvou zanedbatelné oproti výpočtům s dalšími dvěma typy pokrytí. Zároveň je v grafech ilustrován vývoj zirkoniových slitin používaných jako palivové pokrytí, kdy novější slitiny (jako např. ZIRLO) mají vylepšené vlastnosti oproti původně používaným slitinám Zircaloy.



Obr. 4.6: Průběh tloušťky oxidické vrstvy (vlevo) a koncentrace (vpravo) vodíku při základním ozáření pro tři různé druhy pokrytí

Stejně jako pro výpočet počátečních podmínek ve FRAPCON i samotný výpočet průběhu LOCA experimentu ve FRAPTRAN (ukázka vstupního souboru je v Příloze C) byl proveden třemi výpočty. V prvním bylo jako slitina pokrytí uvažováno Zry-4 (stejně jako při experimentu), v druhém byla pro srovnání s ATF výpočtem uvažována slitina Opt. ZIRLO a třetí byl výpočet průběhu LOCA s ATF konceptem s
chromovou ochrannou vrstvou. V Tab. 4.7 jsou srovnány některé parametry výpočtu a některé dostupné parametry z měření.

exp.	1. výpočet	2. výpočet	3. výpočet
Zry-4	Zry-4	Opt. ZIRLO	Cr-Opt. ZIRLO
133	135,4	102,62	143,8
862	878	759	926
	67,1	51,4	4,3
	35	35	0,9
	5,8	5,4	5,9
	10,6	10,6	10,8
	exp. Zry-4 133 862	exp.         1. výpočet           Zry-4         Zry-4           133         135,4           862         878           67,1         35           5,8         10,6	exp.1. výpočet2. výpočetZry-4Zry-4Opt. ZIRLO133135,4102,6286287875967,151,435355,85,410,610,6

Tab. 4.7: Srovnání experimentu IFA-650.9 a výpočtu se třemi různými typy pokrytí

Selhání proutku výpočet předpověděl ve všech třech případech, časy selhání proutku při experimentu a při výpočtu se slitinou Zry-4 byly velmi podobné. Naopak výpočet se slitinou Opt. ZIRLO předpověděl selhání o více než 30 sekund dříve, a to ačkoli je slitina Opt. ZIRLO modernější a slitina Zry-4 byla touto slitinou postupně obměněna. Tento neočekávaný výsledek je pravděpodobně dán tím, že v původním kódu FRAP-TRAN jsou všechny vlastnosti počítány pro Opt. ZIRLO a Zry-4 stejně na základě experimentálních dat se slitinou Zry-4. V modifikovaném kódu byly změny jen pevnostní charakteristiky slitiny Opt. ZIRLO, které nejsou tak dobré jako slitiny Zry-4, a proto ve výsledném srovnání vypadají vlastnosti slitiny Opt. ZIRLO horší. Kdyby byly do výpočetního kódu implementovány všechny vlastnosti explicitně pro Opt. ZIRLO, měla by tato slitina vykazovat lepší vlastnosti. Selhání proutku s chromovou ochrannou vrstvou předpověděl výpočet skoro o 10 sekund později než u proutku se Zry-4, takto malý rozdíl je pravděpodobně dán stejně jako pro Opt. ZIRLO horšími pevnostními charakteristikami a naopak neimplementací vlastností (např. creepu), které by u pokrytí s chromovou ochrannou vrstvou byly výrazně lepší než pro Zry-4. Čas selhání je možné pozorovat v průběhu vnitřního tlaku proutku při LOCA scénáři, který byl zakreslen do grafu na Obr. 4.7. Ve stejném grafu je znázorněn také průběh teploty pokrytí. Času selhání odpovídá také maximální vnitřní tlak, který byl nejvyšší v proutku s chromovou ochrannou vrstvou, zatímco nejmenší vnitřní tlak byl v proutku ze slitiny Opt. ZIRLO.

Dále byla porovnávána obvodová deformace na konci výpočtu, tj. 700 s po inicializaci LOCA havárie, v závislosti na axiální pozici byla zakreslena do grafu na Obr. 4.8. Lze vidět, že největší deformace byla pro všechny tři typy pokrytí přibližně stejně velká a že byla ve výšce kolem 72 mm, která odpovídá místu selhání proutku, a to i v experimentu. Ve velikosti deformací v ostatních axiálních pozicích se už výpočty lišily. Nejmenší deformace byla vypočítána pro pokrytí s chromovou ochrannou vrstvou, která je pravděpodobně dána pevností chromu, naopak největší u slitiny Opt. ZIRLO, kde je stejně jako v předchozím případě rozdíl oproti slitině Zry-4 dán implementovanými horšími pevnostními vlastnostmi.

Nakonec byly porovnány velikosti oxidické vrstvy, velké rozdíly v tloušťce oxidu byly



Obr. 4.7: Průběh vnitřního tlaku proutku pro tři typy pokrytí



Obr. 4.8: Obvodová deformace proutku po testu v závislosti na axiální pozici

u jednotlivých typů pokrytí pozorovány už před výpočtem LOCA, a tedy významné rozdíly ve velikosti oxidické vrstvy byly už vstupem do výpočtu. V průběhu LOCA simulace došlo k dalšímu výraznému nárůstu oxidické vrstvy (viz graf na Obr. 4.9). Nárůst oxidu u slitin Zry-4 a Opt. ZIRLO je stejně velký, ve FRAPTRAN je narozdíl od FRAPCON pro výpočet oxidace stejná korelace pro oba typy slitin. Při výpočtu paliva s chromovou ochrannou vrstvou je naopak nárůst oxidické vrstvy zanedbatelný, byl spočítán 0,9  $\mu$ m (oproti 35  $\mu$ m u ostatních slitin).



Obr. 4.9: Nárůst oxidické vrstvy v průběhu simulované LOCA havárie pro tři typy pokrytí

## Závěr

Dobré znalosti mechanického chování jaderného paliva a celého palivového systému jsou základní předpoklady pro jeho správné modelování. A správné modelování chování palivového proutku je zase základem pro dobře provedené bezpečnostní analýzy. Modelování mechanického chování paliva výpočetními nástroji je dnes zpravidla prováděno jedním ze dvou směrů. Prvním způsobem je modelování založené na základních mechanických rovnicích, které předpokládají celou řadu zjednodušení, jejichž společným základem je aproximace tenkostěnné trubky. Příkladem tohoto způsobu modelování je např. FRACAS-I, model mechanického chování palivového proutku používaný americkými kódy FRAPCON, FRAPTRAN a FAST, na podobných modelech je postavený také evropský výpočetní kód TRANSURANUS a finský FINIX. Druhým způsobem je pak využití počítačově náročnější metody často užívané k výpočtům pružnosti a pevnosti, a to metody konečných prvků. Tento přístup je implementován např. v americkém kódu BISON nebo japonském kódu FEMAXI.

Jak modelovat mechanické chování pokročilého jaderného paliva, konkrétně konceptu s ochrannou vrstvou, je stále otevřenou otázkou. Jedním z možných přístupů je považování celého pokrytí (základní slitiny a ochranné vrstvy) za jeden homogenní materiál a jednotlivé vlastnosti určit z experimentálních měřeních nebo je stanovit na základě přepočítávajícího (váhového) faktoru jako průměr mezi vlastnostmi zirkoniového pokrytí a chromu. Další možností je přístup přes aproximaci tlustostěnné válcové skořepiny, kde by bylo možné jednotlivé vrstvy uvažovat (vícevrstvá teorie). V každém případě je nutné výpočty srovnat s experimentálními daty, kterých je nutné mít k dispozici dostatek při různých parametrech.

V rámci této práci byly provedeny dva typy mechanického testování se slitinou Opt. ZIRLO<sup>™</sup> a se stejnou slitinou s chromovou ochrannou vrstvou. Prvním byly axiální tahové zkoušky v prostředí PWR a na vzduchu, prováděné v JRC v nizozemském Pettenu. Při srovnání obou typů materiálu nebyly pozorovány výrazné rozdíly v chování a meze kluzu a pevnosti byly podobné. Meze kluzu a pevnosti byly při testech na vzduchu sledovány v závislosti na teplotě, byl pozorován pokles mezí s rostoucí teplotou, který byl velmi výrazný především mezi teplotami 400 °C a 500 °C. Dále byl sledován rozdíl v pevnostním chováním v jednotlivých prostředích, v prostředí PWR byly pozorovány výrazně nižší meze než při testech na vzduchu. Toto pozorování bylo velmi překvapující a měla by být ještě ověřena kalibrace testovacího zařízení při vyšších tlacích, při kterých byly prováděny zkoušky v PWR prostředí. Většina testů byla zastavena před selháním vzorků, aby bylo možné sledovat popraskání chromové vrstvy, které bylo následně pozorováno optickým i elektronovým mikroskopem. Byl sledován trend vývoje prasklin v chromové vrstvě, jejich hustota i rozměry rostly směrem od oblastí nejmenších deformací k oblasti maximální deformace vzorků. Tento jev byla snaha sledovat už při samotných testech v PWR prostředí pomocí měření korozního potenciálu, jehož změna měla odpovídat prasknutí chromové vrstvy. Takovýto jev nakonec při testech nebyl sledován, pravděpodobně použitá metodika měření nebyla dostatečně citlivá na odezvy potenciálu způsobené změnami v chromové vrstvě a je nutné ji dále zlepšovat.

Druhým typem mechanického testování byly tangenciální creepové testy v CVŘ v Plzni. Jednalo se o vysokoteplotní testy na vzduchu a probíhaly při teplotách 700 °C, 775 °C a 850 °C při zatíženích 30 N a 60 N. Při těchto testech byl sledován výrazně delší čas do selhání u vzorků s chromovou ochrannou vrstvou. U materiálu s ochrannou vrstvou byla také sledována menší rychlost deformace a celkově menší velikost deformace. Výsledky testů byly zčásti ovlivněny prostředím, kdy zirkoniová slitina při takto vysokých teplotách podléhala vysokoteplotním oxidaci, u vzorků bez ochranné vrstvy se jednalo o oboustrannou oxidaci, zatímco u vzorků s chromovou ochrannou vrstvou o jednostrannou oxidaci. V další interpretaci výsledků byl vliv oxidace zohledněn ve výpočtu napětí, kde byla uvažována menší šířka kovu, jejíž úbytek byl počítán pomocí Cathcart-Pawelovi korelace. I po těchto testech bylo sledováno popraskání chromové vrstvy a zoxidované části kovu pozorováno v elektronovém mikroskopu.

Ze získaných výsledků byly odvozeny koeficienty do klasické stavové rovnice a do Nortonovy rovnice popisující vysokoteplotní creep pro Opt. ZIRLO<sup>™</sup> a pro Opt. ZIRLO<sup>™</sup> s chromovou ochrannou vrstvou. Odvozené koeficienty klasické stavové rovnice byly implementovány do výpočetního kódu FRAPTRAN-2.0 a do stejného již modifikovaného kódu pro pokrytí s chromovou ochrannou vrstvou FRAPTRAN-2.0-CTU. S takto modifikovaným kódem byl následně proveden výpočet scénáře LOCA havárie, podle experimentu v haldenském výzkumném reaktoru označenému jako IFA-650.9. Zároveň byl LOCA scénář přepočítán i s původně použitím typem pokrytí v experimentu (Zry-4) a jednotlivé výsledky byly porovnány. Creepové koeficienty vykazovaly relativně velký rozptyl mezi získanými hodnotami a k jejich upřesnění by bylo třeba více testů při stejných parametrech a testování ve větším rozsahu daných parametrů. Navíc ve FRAPTRAN není přímo počítán vysokoteplotní creep pomocí Nortonovy rovnice, takže creepové koeficienty do modifikovaného kódu implementovány nebyly.

Ze srovnání výpočtů LOCA scénáře IFA-650.9 lze vidět, že selhání proutku bylo předpovězeno ve všech případech, tj. při výpočtu s pokrytím ze slitiny Zry-4, Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> a Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou. Zatímco v případě slitiny Zry-4 odpovídala doba selhání přibližně experimentu. Pro slitinu Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> byla kratší, naopak pro Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou delší, v porovnání posledních dvou zmíněných příkladů byl vidět výrazný vliv chromové vrstvy na pro-

dloužení doby do selhání proutku. Rozdíl ve výpočtu mezi Zry-4 a Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> je nutné brát s ohledem na to, že většina vlastnosti těchto slitin je v kódu počítána stejně, i přestože se obě slitiny chovají jinak a rozdílné jsou jen vlastnosti, které byly implementovány nyní a napětové kritérium, především tedy pevnostní charakteristiky, které jsou u slitiny ZIRLO horší než u Zry-4. Pro přesnější výpočet se slitinou Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> by bylo nutné do kódu implementovat i další vlastnosti s touto slitinou, které by ukázaly její výhody (např. oxidační).

Ačkoli to nemusí být z experimentálních i výpočetních výsledků zřejmé, benefity v použití chromové ochranné vrstvy a základní zirkoniové slitiny jako pokročilého jaderného paliva jsou nepopiratelné. Konkrétně v této práci byly obrovské rozdíly v chování vidět při creepových zkouškách a i výpočetně byla ukázána delší doba do selhání, aniž by v kódu byly implementovány modely všech jevů. Zároveň je ale stále dál nutné vyvíjet modely pro výpočty s pokročilým jaderným palivem a dále provádět výzkum a měření dalších jevů v dalších podmínkách a při dalších parametrech. Pro vývoj mechanického modelu pokrytí s chromovou ochrannou vrstvou by bylo dále třeba výsledků z creepových testů při nižších teplotách (300-700 °C) a při vyšších teplotách odpovídajících  $\beta$  fázi zirkoniové slitiny, z tahových zkoušek při vyšších teplotách odpovídajících havarijním stavům a z tahových zkoušek v tangenciálním směru. Dále by bylo nutné sledovat chování ochranné vrstvy při cyklickém namáhání, ověřit další termomechanické konstanty jako jsou modul pružnosti, Poissonovo číslo, koeficient teplotní roztažnosti atd. Ve výpočetních modulech používaných ve vysokoteplotních transientech by bylo dále třeba upravit model pro výpočet vyboulení pokrytí na základě experimentálních pozorování, zda k němu vůbec dochází na pokrytí s chromovou vrstvou, popř. určit kritérium jeho začátku.

Dalším jevem, s kterým je nutné při mechanickém modelování počítat a který je oproti modelování mechanického chování tradičních slitin zcela nový, je modelování praskání chromové vrstvy. Po provedených experimentech bylo popraskání chromové vrstvy charakterizováno z hlediska rozměrů a koncentrace, pro vývoj modelu je důležité také sledovat vývoj jejího praskání živě a poté umět určit počátek praskání ochranné vrstvy, ovlivnění mechanického chování celého proutku po popraskání vrstvy, závislost popraskání na teplotě atd.

### Literatura

- BELOUS, V.; VOYEVODIN, V. N.; GOZHENKO, S. V.; aj.: Effect of chromium coatings on the mechanical properties of Zr1Nb fuel claddings in longitudinal and transverse directions. *Problems of Atomic Science and Technology*, ročník 2019, č. 5, 2019: s. 142–146, ISSN 16829344, doi:10.46813/2019-123-142.
- [2] BOLE DU CHOMONT, F.: LOCA Testing at Halden, the Eighth Experiment IFA-650.9. OECD Halden Reactor Project Report HWR-916, 2009.
- [3] BOURDON, G.: High-temperature steam and air oxidation of Accident Tolerant Fuels and modelling of their behaviour at steady-state. Internship technical report, FJFI ČVUT v Praze, Grenoble INP - Phelma, 2019.
- [4] BRACHET, J. C.; IDARRAGA-TRUJILLO, I.; FLEM, M. L.; aj.: Early studies on Cr-Coated Zircaloy-4 as enhanced accident tolerant nuclear fuel claddings for light water reactors. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 517, 2019: s. 268–285, ISSN 00223115, doi:10.1016/j.jnucmat.2019.02.018.
- [5] BRACHET, J. C.; LE SAUX, M.; LEZAUD-CHAILLIOUX, V.; aj.: Behavior under LOCA conditions of enhanced accident tolerant chromium coated zircaloy-4 claddings. *Top Fuel 2016: LWR Fuels with Enhanced Safety and Performance*, , č. September, 2016: s. 1173–1178.
- [6] BYUN, T.; HASHIMOTO, N.: Strain Localization in Irradiated Materials. Nuclear Engineering and Technology, ročník 38, č. 7, 2006.
- [7] CATHCART, J. V.; PAWEL, R.; McKEE, R.; aj.: Zirconium Metal-Water Oxidation kinetics IV. Reaction Rate Studies, 1977.
- [8] CAZALIS, B.; BERNAUDAT, C.; YVON, P.: The PROMETRA program : A Reliable Material Database for Highly Irradiated Zircaloy-4, ZIRLO and M5 Fuel Claddings. In 18th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, SMiRT 18, Beijing, China, 2005, s. 383–393.
- [9] CHOI, G. H.; SHIN, C. H.; KIM, J. Y.; aj.: Circumferential steady-state creep test and analysis of Zircaloy-4 fuel cladding. *Nuclear Engineering and Technology*,

ročník 53, č. 7, 2021: s. 2312–2322, ISSN 2234358X, doi:10.1016/j.net.2021.01.010. URL https://doi.org/10.1016/j.net.2021.01.010

- [10] DAUM, R. S.; MAJUMDAR, S.; TSAI, H.; aj.: Mechanical Property Testing of Irradiated Zircaloy Cladding Under Reactor Transient Conditions. In *Small Specimen Test Techniques: Fourth Volume, ASTM 1418*, editace M. A. Sokolov; J. D. Landes; G. E. Lucas, American Society for Testing and Materials, 2002.
- [11] DI MARCELLO, V.; SCHUBERT, A.; VAN DE LAAR, J.; aj.: The TRANSURA-NUS mechanical model for large strain analysis. *Nuclear Engineering and Design*, ročník 276, 2014: s. 19–29, ISSN 00295493, doi:10.1016/j.nucengdes.2014.04.041. URL http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2014.04.041
- [12] European Commission: TRANSURANUS Handbook. Technická Zpráva leden, 2019.
- [13] GEELHOOD, K. J.; LUSCHER, W. G.; CUTA, J. M.; aj.: FRAPTRAN-2.0: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods. Technická zpráva, 2016, doi:10.1016/0029-5493(85)90169-4.
- [14] GEELHOOD, K. J.; LUSCHER, W. G.; RAYNAUD, P. A.; aj.: Frapcon-4.0: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup. ročník 1, č. September, 2015.
- [15] GRUBER, J. A.; BROWN, S. A.; LUCADAMO, G. A.: Generalized Kearns texture factors and orientation texture measurement. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 408, č. 2, 2011: s. 176–182, ISSN 00223115, doi:10.1016/j.jnucmat.2010.11.031.
  URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.11.031
- [16] HALÁK, M.: Napěťově deformační analýza dvou (více) vrstvého materiálu. Bakalářská práce, VŠB - Technická univerzita Ostrava, Fakulta strojní, 2013.
- [17] HALES, J. D.; WILLIAMSON, R. L.; NOVASCONE, S. R.; aj.: BISON Theory Manual: The Equation Behind Nuclear fuel Analysis. Technická Zpráva September, Idaho National Laboratory, Idaho Falls, 2016. URL http://www.inl.gov/
- [18] HAZAN, J.; GAUTHIER, A.; POULLIER, E.; aj.: Semi-integral LOCA test of cold-spray chromium coated zircaloy-4 accident tolerant fuel cladding. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 550, 2021: str. 152940, ISSN 00223115, doi: 10.1016/j.jnucmat.2021.152940.
   URL https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.152940

- [19] HOLZWARTH, U.; STAMM, H.: Mechanical and thermomechanical properties of commercially pure chromium and chromium alloys. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 300, č. 2-3, 2002: s. 161–177, ISSN 00223115, doi:10.1016/S0022-3115(01) 00745-0.
- JIANG, J.; ZHAN, D.; LV, J.; aj.: Comparative study on the tensile cracking behavior of CrN and Cr coatings for accident-tolerant fuel claddings. Surface and Coatings Technology, ročník 409, č. December 2020, 2021: str. 126812, ISSN 02578972, doi:10.1016/j.surfcoat.2020.126812.
   URL https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.126812
- [21] KIM, D. H.; KIM, H.; SHIN, C.; aj.: Development of FRACAS-CT module with FRAPCON4.0P01 for simulation of mechanical behaviors for accident-tolerant fuel cladding in a reactor. *Journal of Nuclear Science and Technology*, ročník 56, č. 8, 2019: s. 671–683, ISSN 00223131, doi:10.1080/00223131.2019.1624653. URL https://doi.org/10.1080/00223131.2019.1624653
- [22] KIM, M.; GU, B.; HONG, S.: Determination of post-necking stress-strain relationship for zirconium low-oxidation based on actual cross-section measurements by DIC. Journal of Mechanical Science and Technology, ročník 34, č. 10, 2020: s. 4211–4217, doi:10.1007/s12206-020-0913-x.
- [23] KIM, S. K.; BANG, J. G.; KIM, D. H.; aj.: Hoop strength and ductility evaluation of irradiated fuel cladding. *Nuclear Engineering and Design*, ročník 239, č. 2, 2009: s. 254–260, ISSN 00295493, doi:10.1016/j.nucengdes.2008.10.024.
- [24] KINKOROVÁ, T.: Ověření LOCA a RIA kritérií pro vybrané havarijní scénáře s pokročilým jaderným palivem. Bakalářská práce, České vysoké učení technické v Praze, 2020.
- [25] KINKOROVÁ, T.: Hodnocení porušení palivového proutku při havarijních stavech. Výzkumný úkol, České vysoké učení technické v Praze, 2021.
- [26] KIRÁLY, M.; ANTÓK, D. M.; HORVÁTH, L.; aj.: Evaluation of axial and tangential ultimate tensile strength of zirconium cladding tubes. *Nuclear Engineering and Technology*, ročník 50, č. 3, 2018: s. 425–431, ISSN 2234358X, doi: 10.1016/j.net.2018.01.002.
- [27] LI, Y.; LIU, Y.; LI, G.; aj.: Iodine-induced stress corrosion cracking behavior of alloy ZIRLO with Zr coatings by electrodepositing with different pulse current densities. *Corrosion Science*, ročník 193, č. May, 2021: str. 109890, ISSN 0010-938X, doi:10.1016/j.corsci.2021.109890.
   URL https://doi.org/10.1016/j.corsci.2021.109890

- [28] LIMBÄCK, M.; ANDERSSON, T.: A Model for Analysis of the Effect of Final Annealing on the In- and Out-of-Reactor Creep Behavior of Zircaloy Cladding. *Zirconium in the nuclear Industry: Eleventh International Symposium*, 1996: s. 448–469.
- [29] LOUKUSA, H.; PELTONEN, J.; VALTAVIRTA, V.: FINIX Fuel behavior model and interface for multiphysics applications - Code documentation for version 1.19.12. Technická zpráva, VTT Technical Research Centre of Finland, 2019.
- [30] LUSCHER, W. G.; GEELHOOD, K. J.; PORTER, I.: Material Property Correlations : Comparisons between FRAPCON-4.0, FRAPTRAN-2.0 and MATPRO. *Report*, , č. September 2015, 2015: str. 154.
- [31] MACHEK, V.; SODOMKA, J.: Nauka o materiálu. Kovy a kovové materiály. Praha, 2001.
- [32] McDONALD, N. R.: Prospects for High Strength Zirconium Alloys. In Preprint for Australian Intitute of Metals, Annual Conference, Sydney, 1971.
- [33] MICHALEC, J.: *Pružnost a pevnost II.* České vysoké učení technické v Praze, Fakulta strojní.
- [34] NAGASE, F.; SUGIYAMA, T.; FUKETA, T.: Optimized ring tensile test method and hydrogen effect on mechanical properties of zircaloy cladding in hoop direction. *Journal of Nuclear Science and Technology*, ročník 46, č. 6, 2009: s. 545–552, ISSN 00223131, doi:10.1080/18811248.2007.9711560.
- [35] NAMBURI, H. K.; OTTAZZI, L.; CHOCHOLOUSEK, M.; aj.: Study hydrogen embrittlement and determination of E110 fuel cladding mechanical properties by ring compression testing. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, ročník 461, č. 1, 2018, ISSN 1757899X, doi:10.1088/1757-899X/461/1/ 012059.
- [36] NEITZEL, H. J.; ROSINGER, H. E.; RECHERCHES, E. D.; aj.: The Development of a Burst Criterion for Zircaloy Fuel Cladding under LOCA Conditions. AECL-6420 (KfK-2893), ročník 6420, č. February, 1980.
- [37] NGUYEN, D. V.; LE SAUX, M.; GÉLÉBART, L.; aj.: Mechanical behavior of a chromium coating on a zirconium alloy substrate at room temperature. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 558, 2022: str. 153332, ISSN 00223115, doi: 10.1016/j.jnucmat.2021.153332.
  URL https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153332
- [38] Nuclear Energy Agency: Specification of the Halden LOCA Test IFA-650.9 and IFA-650.10. Technická zpráva, International Atomic Energy Agency, 2009.

- [39] Nuclear Energy Agency: Benchmark Calculations on Halden IFA-650 LOCA Test Results. NEA/CSNI/R(2010)6, 2010.
   URL www.oecd.org/publishing/corrigenda.
- [40] Oliva, V.: Plasticita. 2021.
- [41] PICKMAN, D. O.: Properties of Zircaloy Cladding. Nuclear Engineering and Design, ročník 21, č. 2, 1972: s. 212–236, ISSN 00295493, doi:10.1016/0029-5493(72) 90074-X.
- [42] PORTER, I.; GEELHOOD, K.; COLAMECO, D.; aj.: FAST-1.0: A computer code for thermal-mechanical nuclear fuel analysis under steady-state and transients. 2020.
- [43] SABOL, M.: Určování normálové anizotropie a součinitele deformačního zpevnění hlubokotažných plechu. Diplomová práce, Vysoká škola strojní atextilní v Liberci, 1988.
- [44] SARMA, D. S.; AL-OTAIBI, K. M.; MURTY, K. L.: Tensile Properties and Deformation Mechanisms in Zirconium. *Materials Transactions*, ročník 33, č. 6, 1992: s. 596–603.
- [45] ŠEVEČEK, M.: Radiační poškození a mikrostruktura Zr slitin. Praha: FJFI, ČVUT v Praze, 2021.
- [46] ŠEVEČEK, M.; ČECH, J.; SIEGL, J.; aj.: Smluvní výzkum optimalizace nanášení ochranných vrstev, jejich experimentální ověření a modelování chování pokrytí na povlakovém materiálu. Technická zpráva, Praha, 2020.
- [47] ŠEVEČEK, M.; KREJČÍ, J.; SHAHIN, M. H.; aj.: Fatigue Behavior of Cold Spray-Coated Accident Tolerant Cladding. *TopFuel 2018*, , č. October, 2018: str. A0126.
- [48] ŠEVEČEK, M.; SHIRVAN, K.; BALLINGER, R. G.: Study of Thermal Creep of Coated Cladding Materials. Acta Polytechnica CTU Proceedings, ročník 19, 2018: str. 22, doi:10.14311/app.2018.19.0022.
- [49] SHRIWASTAW, R. S.; SAWARN, T. K.; BANERJEE, S.; aj.: Estimation of ring tensile properties of steam oxidized Zircaloy-4 fuel cladding under simulated LOCA condition. *Journal of Nuclear Materials*, ročník 493, 2017: s. 460–470, ISSN 0022-3115, doi:10.1016/j.jnucmat.2017.06.032.
   URL http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.06.032
- [50] STOEV, P. I.; BELOUS, V. A.; VOYEVODIN, V. N.; aj.: Mechanical properties and acoustic parameters tubes of zirconium alloy Zr1%Nb with a protective coatings. *Problems of Atomic Science and Technology*, ročník 99, č. 5, 2015: s. 87–97, ISSN 16829344.

- [51] SÚJB: Koncepce posuzování nových typĹŻ jaderného paliva v České republice: Licenční požadavky na projekt paliva a aktivní zóny. *Bezpečnostní návod*, 2005.
- [52] SUZUKI, M.; SAITOU, H.; UDAGAWA, Y.; aj.: Light Water Reactor Fuel Analysis Code FEMAXI-7; Model and Structure., č. July, 2013.
- [53] THORPE, W. R.; SMITH, I. O.: Tensile properties of Zr-1 wt.% Nb alloy. Journal of Nuclear Materials, ročník 78, č. 1, 1978: s. 49–57, ISSN 00223115, doi:10.1016/ 0022-3115(78)90503-2.
- [54] YANG, H.; SHEN, J.; MATSUKAWA, Y.; aj.: Effects of alloying elements (Sn, Nb, Cr, and Mo) on the microstructure and mechanical properties of zirconium alloys. *Journal of Nuclear Science and Technology*, ročník 52, č. 9, 2015: s. 1162–1173, ISSN 00223131, doi:10.1080/00223131.2014.996622.
  URL http://dx.doi.org/10.1080/00223131.2014.996622
- [55] YEGOROVA, L.; ASMOLOW, V.; ABYSHOV, G.; aj.: Data Base on the Behavior of High Burnup Fuel Rods with Zr1%Nb Cladding und UO2 fuel (VVER Type) under Reactivity Accident, ročník 2. U. S. Nuclear Regulatory Commission, internatio vydání, 1999.
- [56] YOON, J.; KIM, J.; KIM, H.; aj.: Calibration of hoop stress in ring tensile test with Zircaloy-4 tube. *Journal of Mechanical Science and Technology*, ročník 31, č. 9, 2017: s. 4183–4188, ISSN 1738494X, doi:10.1007/s12206-017-0815-8.

# Příloha A

## Přehled používaných korelací

V celé příloze označuje T teplotu v kelvinech.

#### A.1 Youngův modul pružnosti

Youngův modul pružnosti je počítán v závislosti na teplotě, toku rychlých neutronů, koncentraci kyslíku a způsobu výroby. Ve většině kódů je používána korelace z *celmod* (FRAP kódy, FINIX, BISON). Youngův modul je určován odděleně pro  $\alpha$  a  $\beta$  fázi zirkoniových slitiny a pro Zircaloy jsou v CELMOD používané následující korelace:

$$E^{\alpha} = (1,088 \cdot 10^{11} - 5,475 \cdot 10^7 \cdot T + K_1 + K_2)/K_3 \tag{A.1}$$

$$E^{\beta} = 9,21 \cdot 10^{10} - 4,05 \cdot 10^7 \cdot T \tag{A.2}$$

kde koeficienty  $K_1$ ,  $K_2$  a  $K_3$  jsou dány jako:

$$K_1 = (6, 61 \cdot 10^{11} + 5, 921 \cdot 10^8 \cdot T)\Delta \tag{A.3}$$

$$K_2 = -2, 6 \cdot 10^{10} C \tag{A.4}$$

$$K_3 = 0,88 + 0,12e^{-\phi/10^{25}} \tag{A.5}$$

kde E je Youngův modul pružnosti,  $\Delta$  průměrná koncentrace kyslíku, C koeficient daný způsobem výroby a  $\Phi$  je tok neutronů. Pro slitinu E110 je používána jiná korelace závislá jen nta teplotě:

$$E_{\rm E110} = 1,121 \cdot 10^{11} - 6,438 \cdot 10^7 \cdot T \tag{A.6}$$

Další modely pro výpočet modulu pružnosti jsou implementovány v TRANSU-RANU, kde jsou modely závislé jen na teplotě a pro slitinu E110 je využíván stejný model jako ve FRAP kódech:

$$E_{\rm Zry} = 10^5 - 59 \cdot T$$
 (A.7)

$$E_{\rm M5} = 1,088 \cdot 10^5 - 54,75 \cdot T. \tag{A.8}$$

Jiný model pro Zircalov využívá FEMAXI:

$$E_{\rm Zry} = (9, 9 \cdot 10^5 - 566, 9 \cdot (T - 273.15)) \cdot 9,8067 \cdot 10^4 \tag{A.9}$$

#### A.2 Poissonovo číslo

Ve většině výpočetních kódů je Poissonovo číslo považováno za stejné pro všechny zirkoniové slitiny a v některých případech nezávislé na teplotě.

TRANSURANUS používá pro odlišné slitiny odlišné korelace, konkrétně jsou implementovány korelace pro Zircaloy, M5 a E110:

$$\nu_{\rm Zry} = 0,325$$
 (A.10)

$$\nu_{\rm M5} = 0,37\tag{A.11}$$

$$\nu_{\rm E110} = 0,42628 - 5,556 \cdot 10^{-5} \cdot T \tag{A.12}$$

FINIX používá stejnou korelaci jako TRANSURANUS pro E110 a FEMAXI povoluje volbu mezi dvěma korelacimi:

$$\nu_1 = 0,3$$
 (A.13)

$$\nu_2 = 0,3303 + 8,376 \cdot 10^{-5} \cdot (T - 273, 15). \tag{A.14}$$

#### A.3 Mez kluzu a mez pevnosti

Mez kluzu i mez pevnosti je ve FRAP kódech počítána v subroutině *cmlimt* a jsou uvažovány jejich závyslosti na teplotě, neutronové dávce, způsobu výroby, průměrné koncentraci kyslíku a rychlosti deformace. Obě meze se při se při uvažování zmíněných závislostí spočítají následovně:

$$YS = \left[\frac{K}{E^n} \left(\frac{\dot{\epsilon}}{10^{-3}}\right)\right]^{\frac{1}{1-n}} \tag{A.15}$$

$$\text{UTS} = K \cdot \left(\frac{\dot{\epsilon}}{10^{-3}}\right)^m \cdot \left(\frac{n}{1+m}\right)^n \tag{A.16}$$

kde K je pevnostní konstanta, n napěťový exponent a m deformační exponent a všechny závislosti jsou uvažovány právě v těchto konstantách, které jsou počítány subroutinou

 $\mathit{ckmn},$ u koeficientum je uvažována jen závislost na teplotě:

$$m = 0,015 \text{ pro } T < 750 \text{ K}$$
 (A.17)

$$m = 7,458 \cdot 10^{-4}T - 0,544338 \text{ pro } 750 \text{ K} < T < 800 \text{ K}$$
 (A.18)

$$m = 3,24124 \cdot 10^{-4}T - 0,20701 \text{ pro } T > 800 \text{ K}$$
 (A.19)

Koeficienty K a n jsou dále závislé i na typu slitiny, neutronové dávce a způsobu výroby:

$$K = K(T) \cdot (1 + K(CW) + K(\Phi))/K(\operatorname{Zry})$$
(A.20)

$$n = n(T) \cdot n(\Phi) / n(\text{Zry}) \tag{A.21}$$

kde pro jednotlivé členy platí:

$$K(T) = 1,176 \cdot 10^9 + T \cdot (454859 + T \cdot (-3281 + T \cdot 1,72752))$$
(A.22)  
$$T: T < 750 \text{ K}$$

 $\operatorname{pro}$ 

$$K(T) = 2522488 \cdot \exp(\frac{2850002,7}{T^2})$$
 pro  $T: 750 \text{ K} < T \ 1090 \text{ K}$  (A.23)

$$K(T) = 184137603, 9 - 143454, 48 \cdot T$$
 pro $T:~1090~{\rm K}~<~T~<~1255$  K(A.24)

$$K(CW) = 0,546 \cdot CW \tag{A.25}$$

$$K(\Phi) = (-0, 1464 + 1, 464 \cdot 10^{-25} \Phi) f(CW, T)$$
(A.26)

pro 
$$\Phi: \Phi < 0, 1 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$$

$$K(\Phi) = 2,928 \cdot 10^{-26}\Phi \tag{A.27}$$

pro 
$$\Phi$$
: 0, 1 · 10<sup>25</sup> n/m<sup>2</sup> <  $\Phi$  < 2 · 10<sup>25</sup> n/m<sup>2</sup>  
 $K(\Phi) = 0,53236 + 2,6618 \cdot 10^{-27}\Phi$  (A.28)

pro 
$$\Phi$$
:  $2 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2 < \Phi < 12 \cdot 10^{25} \text{n/m}^2$ 

$$K(\operatorname{Zry}) = 1 \text{ pro } \operatorname{Zry} - 4 \tag{A.29}$$

$$K(\text{Zry}) = 1,305 \text{ pro } \text{Zry} - 2$$
 (A.30)

$$n(T) = 0,11405 \text{ pro } T : T < 419 \text{ K}$$
 (A.31)

$$n(T) = -0,0949 + T \cdot (0,001165 + T \cdot (-0,000001992 + T \cdot 9,558 \cdot 10^{-10}) A.32)$$
pro T : 419 K < T < 1099 K

$$n(T) = -0,22655119 + 0,00025 \cdot T \text{ pro } T : 1099 \text{ K} < T < 1600 \text{ K} (A.33)$$
  
 $n(T) = 0,17344880 \text{ pro } T : T > 1600 \text{ K}$  (A.34)

$$n(\Phi) = 1,321 + 0,48 \cdot 10^{-25} \Phi \text{ pro } \Phi : \Phi < 0,1 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$$
 (A.35)

$$n(\Phi) = 1,369 + 0,096 \cdot 10^{-25}\Phi \tag{A.36}$$

pro 
$$\Phi$$
:  $0, 1 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2 \Phi < 2 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$   
 $n(\Phi) = 1,5435 + 0,008727 \cdot 10^{-25} \Phi$  (A.37)

pro 
$$\Phi$$
:  $2 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2 \Phi < 7, 5 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$   
 $n(\Phi) = 1,608953 \text{ pro } \Phi : \Phi > 7, 5 \cdot 10^{25} \text{ n/m}^2$  (A.38)

$$n(\text{Zry}) = 1 \text{ pro } \text{Zry} - 4 \tag{A.39}$$

$$n(\text{Zry}) = 1,6 \text{ pro } \text{Zry} - 2$$
 (A.40)

kdeCW je koeficient udávající způsob výroby a  $\Phi$  je neutronová dávka.

V kódu TRANSURANUS jsou jednodušší korelace pro mez kluzu, závislé pouze na teplotě. Pro slitiny Zr1%Nb platí:

$$YS_{M5} = 341, 33 \cdot \exp(-0, 003 \cdot T) \tag{A.41}$$

$$YS_{E110} = 24,64 \cdot \exp(-0,001308 \cdot T) \cdot 9,81$$
 (A.42)

#### A.4 Primární creep

Primární creep je řešen v kódu FINIX a jeho výpočet je závislý na rychlosti sekundárního creepu a na saturovaném primární creepu ( $\epsilon_p^{sat} = 0,0216\dot{\epsilon}_s(2-\tanh(35500\dot{\epsilon}_s))^{-2.05}$ ), primární creep se poté počítá jako:

$$\epsilon_p = \epsilon_p^{sat} (1 - \exp(-52\sqrt{\dot{\epsilon_s t}})) \tag{A.43}$$

#### A.5 Sekundární creep

Výpočet sekundárního creepu je často (např. FRAPTRAN, FINIX) rozdělen na výpočet tepelného a radiačního creepu. Tepelný creep je dán Arheniovým vztahem ve tvaru:

$$\dot{\epsilon_{\rm th}} = \frac{AE}{T} (\sinh \frac{a_i \sigma_{\rm eff}}{E})^n \exp(\frac{-Q}{RT}) \tag{A.44}$$

kde  $A, E, a_i, n$  a Q jsou parametry creepové rovnice odlišné pro různé slitiny uvedené v Tab. A.1.

Celkový creep je následně počítán jako součet primární a sekundární deformace.

Tab. A.1: Parametry creepové rovnice používané ve FRAPCON a FINIX pro SRA a RXA slitiny [30]

Parametr	Jednotka	SRA slitina	RXA slitina	
A	K/MPa/hod	$1,08 \cdot 10^9$	$5,47 \cdot 10^{8}$	
E	MPa	$1,149 \cdot 10^5 - 59,9T$	$1,\!149\cdot10^{5}$ - $59,\!9T$	
$a_i$ <sup>a</sup>	$MPa^{-1}$	650	650	
n	-	2,0	$3,\!5$	
Q	$\rm kJ/mol$	201	201	
<sup>a</sup> pro neozářené				

Stejný model je implementován i v kódu BISON [17], zároveň je tam implementován i Hayesův model popisující sekundární creep, který je popsán tradiční creepovou rovnicí:

$$\dot{\epsilon} = A(\frac{\sigma_{eff}}{G})^n \cdot \exp(-\frac{Q}{RT}) \tag{A.45}$$

kde A a n jsou materiálové koeficienty, pro Zry-4 dané jako n = 5 a  $A = 3, 14 \cdot 10^{24} \text{ s}^{-1}$  a G je modul pružnosti ve smyku, který má pro Zry-4 následující teplotně závislý tvar:

$$G = 4,2519 \cdot 10^{10} - 2,2185 \cdot 10^7 T.$$
 (A.46)

V kódu TRANSURANUS je používána celá řada korelací pro creep. Pro Zircalov se používá pro výpočet rychlosti efektivní deformace klasický Nortonův zákon (Correlation 18):

$$\dot{\epsilon_{eff}} = A\sigma_{eff}^n \exp(-\frac{Q}{RT}) \tag{A.47}$$

A,  $n \neq Q$  jsou Nortonovy parametry, které jsou dány odlišně pro jednotlivé fázi zirkoniové slitiny (viz Tab. A.2).

Tab. A.2: Parametry creepové rovnice používané v kódu TRANSURANUS pro slitinu Zry-4 - Correlation 18 [12]

Parametr	Jednotka	$\alpha$ fáze	$\beta$ fáze
A	1/MPa/hod	$3,9316 \cdot 10^{7}$	$2,844 \cdot 10^4$
n	-	5,89	3,78
Q	kJ/mol	$3,21 \cdot 10^5 + 24,69(T-923,15)$	$1,41919 \cdot 10^5$

Přechodová oblast je počítána následujícím způsobem:

$$A = A_{\alpha}^{1-y} \cdot A_{\beta}^{y}$$

$$Q = (1-y)Q_{\alpha} + yQ_{\beta}$$

$$n = (1-y)n_{\alpha} + yn_{\beta}.$$
(A.48)

Další možností pro výpočet creepu slitiny Zircaloy (Correlation 20) v kódu TRAN-SURANUS je Lassmann-Morenův model, který pod sekundárním creepem uvažuje dva jevy přispívající ke creepovým deformacím: tepelný a dislokační creep:

$$\dot{\epsilon_{\text{th}}} = 1,083 \cdot 10^5 \cdot \exp(\frac{-17000}{T}) \cdot \sinh(\frac{\sigma_{\text{eff}}}{60})$$
 (A.49)

$$\dot{\epsilon}_{\text{climb}} = 1,0885 \cdot 10^{-28} \cdot \sigma_{\text{eff}}^4 \Phi + 4,2466 \cdot \sigma_{\text{eff}} \cdot \Phi$$
 (A.50)

Celková rychlost creepové deformace je rovna součtu obou příspěvků.

Pro slitinu Zr1%Nb jsou v kódu TRANSURANUS zavedeny 4 korelace. První, označovaná jako Correlation 25, udává creepovou rychlost následovně:

$$\dot{\epsilon_{\text{eff}}} = 1791, 36 \cdot \sigma_{\text{eff}}^{3,2} \exp(-\frac{18000}{T})$$
 (A.51)

stejně formulované korelace je i Correlation 25, jen s koeficientem A = 576.

Další korelce pro Zr1%Nb (Correlation 26) jsou rozděleny na jednotlivé vztahy podle efektivního napětí a teploty:

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon} &= 2, 3 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{\sigma_{\text{eff}}}{5} C, \ \sigma_{\text{eff}} &\leq 50 \text{ MPa} \\ \dot{\epsilon} &= 7, 242 \cdot 10^{-12} \cdot \sigma_{\text{eff}}^{2,65} C, \ 50 &< \sigma_{\text{eff}} &\leq 100 \text{ MPa} \\ \dot{\epsilon} &= 1, 467 \cdot 10^{-17} \cdot \sigma_{\text{eff}}^{5,5} C, \ 100 &< \sigma_{\text{eff}} &\leq 120 \text{ MPa} \\ \dot{\epsilon} &= 9, 3 \cdot 10^{-23} \cdot \sigma_{\text{eff}}^{8} C, \ 120 &< \sigma_{\text{eff}} &\leq 200 \text{ MPa} \end{aligned}$$
(A.52)

$$C = 3,66 \cdot 10^{12} \exp(-\frac{18000}{T}), T \leq 623 \text{ K}$$
  

$$C = 3,3507 \cdot 10^{17} \exp(-\frac{25140}{T}), T > 623 \text{ K}$$
(A.53)

Poslední korelací implementovanou v kódu TRANSURANUS je vysokoteplotní (650-800 °C) korelace pro slitinu Zr1%Nb:

$$\dot{\epsilon_{\alpha}} = 6,0596 \cdot 10^{6} \cdot \sigma_{\text{eff}}^{5,18} \exp(-\frac{43037}{T} + b(\mathbf{x}))$$
  
$$\dot{\epsilon_{\beta}} = 1,439 \cdot \sigma_{\text{eff}}^{5,82} \exp(-\frac{21834}{T} + b(\mathbf{x}))$$
(A.54)

kde b(x) je funkce popisující efekt způsobený kyslíkem.

Posledními korelacemi, které jsou zde zmíněny, jsou creepové teplotní corelace používané kódem FEMAXI [52]. Jedná se o korelace odvozené pro slitinu Zry-4. Korelace (Nenansenova) používaná při nominálním provozu má následující tvar:

$$\dot{\epsilon} = mK^{\frac{1}{m}}\epsilon_H^{1-\frac{1}{m}} \tag{A.55}$$

kde  $\epsilon_H$  je creepová deformace v předchozím kroku a K a m jsou creepové koeficienty:

$$K = \exp(-1, 33 + (-0, 416 + 8, 22 \cdot 10^{-4}T)\sigma_{\text{eff}} + 6, 59 \cdot 10^{-3}T)$$
  

$$m = -1,07 + (-0,00343 + 7,27 \cdot 10^{-5}T)\sigma_{\text{eff}} + 1,95 \cdot 10^{-3}T$$
(A.56)

Další dvě korelace jsou vysokoteplotí a jedná se o Rosingerův model:

$$\dot{\epsilon}_{\alpha} = 2000\sigma^{5,32} \exp(-\frac{284600}{kT})$$
  

$$\dot{\epsilon}_{\beta} = 8, 1\sigma^{3,79} \exp(-\frac{142300}{kT})$$
  

$$\dot{\epsilon}_{\alpha+\beta} = [1 - (\frac{T - 1073}{200})^4] \cdot \dot{\epsilon}_{\alpha} + (\frac{T - 1073}{200})^4 \cdot \dot{\epsilon}_{\beta}$$
(A.57)

a Donaldsonův model:

$$\dot{\epsilon} = A \frac{G}{T} (\frac{\sigma}{G})^n \exp(-\frac{Q}{RT})$$
  

$$G = 3,326 \cdot 10^{10} - 2,244 \cdot 10^7 (T - 273) + 2,161 \cdot 10^3 (T - 273)^2 \quad (A.58)$$

# Příloha B

### IFA-650.9

Vybraný scénář LOCA havárie byl jedním z experimentů série IFA na haldenském výzkumném těžkovodním reaktoru. Celá sada experimentů měla sledovat chování paliva (fragmentaci, relokaci) a pokrytí (deformaci, selhání, oxidaci) v průběhu typického scénáře LOCA havárie s vysoce vyhořeným palivem pro reaktory PWR, BWR a VVER.

Experimenty probíhaly v experimentální smyčce, jejíž část je součástí reaktoru, v experimentálním zařízení válcového tvaru. Celé zařízení se skládalo z testovacího proutku a elektrického topného tělesa. Na pokrytí i na topné těleso byly upevněny tři termočlánky, dalšími používanými měřícími zařízeními a senzory byly: detektor prodloužení proutku, senzor vnitřního tlaku, termočlánky umístěné v několika místech smyčky a měřící teplotu chladiva, samonapájecí vanadové detektory neutronů zaznamenávající axiální profil výkonu. Data byly zaznamenávány jednou za sekundu. V reaktoru byly standardní podmínky, chladivem byla těžká voda o teplotě cca 235 °C a tlaku 3,4 MPa.

K testu IFA-650.9 byl vybrán proutek s vysokým vyhořením (89,9 MWd/kgU) ze švýcarské elektrárny Gösgen, jednalo se klasické 15x15 PWR palivo francouzské firmy Framatome. Vybraný proutek byl z reaktoru vyvezen v roce 1998 po sedmi kampaních v reaktoru, výkonová historie je zobrazena v grafu na Obr. 4.4. Podmínky v reaktoru byly následující: teplota vstupujícího chladiva 292 °C, tlak chladiva 15,4 MPa a vstupní hmotnostní tok byl 3540 kgs<sup>-1</sup>m<sup>2</sup>. Z takového proutku byl pro účely experimentálního testování vyříznut segment, jehož původní pozice odpovídala výšce mezi druhou a třetí distanční mřížkou. Parametry palivového segmentu připraveného na testování byly zapsány do Tab. 4.5.

Samotný test probíhal v dubnu 2009, počáteční tlak ve smyčce byl 7 MPa a test byl spuštěn otevřením ventilu do vedlejší nádrže. Cílová teplota testu byla stanovena na 1100 °C, ale v průběhu testu byla na spodním termočlánku naměřena teplota 1200 °C. Selhání bylo z poklesu vnitřního tlaku pozorováno 133 sekund po inicializaci LOCA při teplotě 810 °C. Samotné vyboulení proutku začalo v čase 106 sekund při teplotě přibližně 750 °C a tlaku 7,7 MPa, což byl i maximální vnitřní tlak v průběhu testu. 16 sekund po selhání proutku bylo spuštěno sprchování a 315 sekund po inicializaci LOCA byl reaktor odstaven, po testu bylo experimentální zařízení natlakováno heliem pro suché skladování. [2]

Při post experimentálních měřeních bylo sledováno vyboulení a selhání proutku v jeho spodní části. Otvor vzniklý selháním proutku byl cca 40 mm dlouhý a maximální šířka byla 7 mm (Obr. B.1). Přibližně v polovině testovaného segmentu bylo pozorováno sekundární vyboulení, v kterém nedošlo k selhání. Celý palivový sloupec byl sesunut o několik centimetrů níže a do vyboulené oblasti bylo relokováno fragmentované palivo, jehož kousky byly po testu detekovány i na dně experimentální tlakové nádoby a v části potrubí. [38] Lokalizace paliva po testu byla pozorována detekcí gama záření cesia (<sup>137</sup>Cs) a ruthenia (<sup>103</sup>Ru), jehož odezva je zobrazena na Obr. B.2. Relokaci je možné sledovat také v průběhu teplot, kdy po vyboulení a selhání pokrytí klesla teplota horních dvou termočlánků, zatímco dolního termočlánku dále rostla (graf na Obr. B.3), což indikuje relokaci paliva do regionu největší deformace, kde byl v blízkosti upevněn dolní termočlánek. Relokaci bylo možné sledovat také na odezvě tří vanadiových detektorů umístěných v různých výškách v grafu na Obr. B.4, ihned po selhání proutku začala růst odezva horního detektoru, zatímco odezva dolního detektoru klesala. V grafu na Obr. B.5 je zobrazeno měření odezvy gama v potrubí za testovacím zařízení, která výrazně stoupla cca 200 s po selhání pokrytí. Dále je v grafu zobrazen průběh vnitřního tlaku v proutku a tlaku ve vstupním pokrytí.



Obr. B.1: Selhání pokrytí po vyboulení - IFA-650.9 [38]



Obr. B.2: Gama skenování aktivity  $^{137}\mathrm{Cs}$  a  $^{103}\mathrm{Ru}$  šest týdnů po testu [2]



Obr. B.3: Naměřené teploty v průběhu experimentu (TCC1 - dolní termočlánek, TCC2 - termočlánek uprostřed, TCC3 - horní termočlánek, TIA - průměrná vstupní teplota chladiva, TOA - průměrná výstupní teplota chladiva) a lineární výkon topného zařízení v okolí proutku (LHR)



Obr. B.4: Relativní odezvy vanadiových detektorů (ND1 - dolní detektor, ND2 - detektor uprostřed, ND3 - horní detektor)



Obr. B.5: Průběh vnitřního tlaku v proutku při experimentu (RP), tlak ve vstupním potrubí (PI), odezva gama záření ve výstupním potrubí (MON)

# Příloha C

### Vstupní soubory

Jednotlivé vstupní soubory pro různý druhy pokrytí se lišily jen typem pokrytí (viz Tab. C.1). V případě chromové ochranné vrstvy přidáním parametru, který ur-

Tab. C.1: Označení používaných typů pokrytí při výpočtech

	1. výpočet	2. výpočet	3. výpočet
Pokrytí	Zry-4	Opt. ZIRLO	Cr-Opt. ZIRLO
FRAPCON <i>icm</i>	4	7	8
FRAPTRAN CladType	4	3	12

čoval tloušťku ochranné vrstvy *thkcoat*, a přepnutím používané korelace pro oxidaci, kde vysokoteplotní korelace pro chrom byla implementována pod stejný parametr jako Baker-Justova korelace, takže je počítána po zapnutí této korelace (*baker* = 1), u ostatních výpočtu byla použita Cathcart-Pawelova korelace (ve vstupu zadáno jako *cathca*= 1). V této příloze je ukázán jeden vstupní soubor pro výpočet základního ozáření a jeden pro výpočet LOCA, parametry, v kterých se mezi sebou jednotlivé výpočty (Zry, Opt. ZIRLO a Opt. ZIRLO<sup>TM</sup> s chromovou ochrannou vrstvou) lišily jsou zvýrazněny rámečkem.

### C.1 Vstupní soubor - FRAPCON

****	***************************************	******
*	FRAPCON-3, steady-state fuel rod analysis code	*
*		*
*		×
*	CASE DESCRIPTION: IFA-650.9-atf Base Irradiation	
*		×
*UN	NT FILE DESCRIPTION	×
*	Output:	k
*	Output :	:
*	6 STANDARD PRINTER OUTPUT	*
*		×
*	Scratch:	*
*	5 SCRATCH INPUT FILE FROM ECH01	*
*		×

\* \* Input: FRAPCON-3 INPUT FILE (UNIT 55) \* \* GOESINS: FILE05='nullfile', STATUS='UNKNOWN', FORM='FORMATTED', CARRIAGE CONTROL='NONE' \* GOESOUTS: FILE06='650-9-base-atf.out'. STATUS='UNKNOWN', CARRIAGE CONTROL='LIST' FILE22='restart.650-9atf', STATUS='UNKNOWN', CARRIAGE CONTROL='LIST'  $\label{eq:FILE66} FILE66{='650-9-} base-atf.plot',$ STATUS='UNKNOWN', FORM='FORMATTED', CARRIAGE CONTROL='LIST' /\* IFA-650.9 ATF Base Irradiation \$frpcn im=60, nr=17, ngasr=45, na=10 \$end \$frpcon nunits=0dco=0.01075, thkcld=0.000725, thkgap=0.000085, totl=0.48, cpl=0.0699 thkcoat = 18e-6dspg=0.009, dspgw=0.001, vs=20hplt=0.008, hdish=0.00025, dishsd=0.0006chmfrw=0, chmfrh=0 rc=0enrch=3.5, imox=0, comp=0, ifba=0, b10=0, zrb2thick=0, zrb2den=90 fotmtl=2, gadoln=0, ppmh2o=0, ppmn2=0 den=95.2, deng=0, roughf=0.000002, tsint=1872.59, rsntr=98.64 icm=8 , cldwks=0.5, roughc=0.000001, catexf=0.05, chorg=10 fgpav=4000000, idxgas=1, zr2vintage=1 iplant=-2, pitch=0.0126, icor=0 crephr=10, gapf=31, slim=0.05, qend=0.3, ngasmod=2jdlpr=0, nopt=0, nplot=1, ntape=1, nread=0, nrestr=0 ProblemTime=  $0.01,\,50,\,100,\,150,\,200$ 250, 300, 330, 331, 350 400, 450, 500, 550, 600 650, 659, 660, 700, 750 800, 850, 900, 950, 988 989, 1000, 1050, 1100, 1150 1200, 1250, 1300, 1317, 1318 1350, 1400, 1450, 1500, 1550 $1600,\,1646,\,1647,\,1650,\,1700,\,1750$ 1800, 1850, 1900, 1950, 1976 1977, 2000, 2050, 2100, 2150 2200, 2250, 2300, 2305 DecayModel=1, fpdcay=1 qmpy= 32.5, 32.5, 32.5, 32.5, 32.5 32.5, 32.5, 32.5, 26.5, 26.5 26.5, 26.5, 26.5, 26.5, 26.5 26.5, 26.5, 29, 29, 29 29, 29, 29, 29, 29 18.5, 18.5, 18.5, 18.5, 18.5, 18.518.5, 18.5, 18.5, 18.5, 17.5 17.5, 17.5, 17.5, 17.5, 17.5 17.5, 17.5, 16.5, 16.5, 16.5, 16.516.5, 16.5, 16.5, 16.5, 16.5, 16.5

```
15.5, 15.5, 15.5, 15.5, 15.5
15.5, \, 15.5, \, 15.5, \, 15.5
nsp=0
p2=15400000, tw=565.15, go=3540
iq=0, fa=1
x(1) =
0, 0.48
qf(1) =
1, 1
jn=2
jst =
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
1, 1, 1, 1, 1
$end
```

\*\*\*\*\*\*

### C.2 Vstupní soubor - FRAPTRAN

```
*
  FrapTran, Transient fuel rod analysis code
                                                                            *
*
   CASE DESCRIPTION: 650.9 ATF loca test
FILE05='nullfile', STATUS='scratch', FORM='FORMATTED',
    CARRIAGE CONTROL='LIST'
{\rm FILE06}{='650}{\text{-}9}{\text{-}loca}{\text{-}}{\rm ATF.out'},
    STATUS='UNKNOWN', CARRIAGE CONTROL='LIST'
FILE66='650-9-loca-ATF.plot',
    STATUS='UNKNOWN', FORM='FORMATTED', CARRIAGE CONTROL='LIST'
FILE22='restart.650-9atf',
    STATUS='old', FORM='FORMATTED'
650.9 - ATF loca test
$begin
ProblemStartTime=0, ProblemEndTime=1000
ncards=1
$end
$iodata
unitin=1, inp=1, trest=199152000
unitout=1, res=0, pow=0
dtpoa(1) =
1, 0, 1, 1000
dtplta(1) =
1, 0, 1, 1000
$end
$solution
dtmaxa(1) =
0.001, 0, 0.001, 300, 0.001, 900, 0.01, 1000
dtss=100000, prsacc=0.005, tmpac1=0.005
soltyp=0, maxit=200, noiter=200, epsht1=0.001
```

nfmesh=17ncmesh=10\$end \$design RodDiameter=0.01075, FuelPelDiam=0.00913, gapthk=0.000085001 thkcoat = 18e-6RodLength=0.48, vplen=0.000019, volbp=0 scd=0.009, swd=0.001, spl=0.100001, ncs=20 pelh=0.008, dishv0=0.00000012364, rshd=0.00396505, dishd=0.00025 frpo2=0, fotmtl=2, gadoln=0 frden=0.952, OpenPorosityFraction=0, roughf=2, tsntrk=2911, fgrns=10 CladType=12, coldw=0.5, roughc=1, cldwdc=0.04 tgas0=295.15, gappr0=4000000 gfrac(1)=0.05, gfrac(2)=0.95, gfrac(3)=0, gfrac(4)=0, gfrac(5)=0gfrac(6)=0, gfrac(7)=0pitch=0.0126, pdrato=1.17209302325581, rnbnt=1, totnb=225 \$end \$power RodAvePower(1) = $2.441,\,0,\,2.441,200,\,2.441,\,613.5,\,0,\,915.5$ CladPower=0, fpowr=1 NumAxProfiles=1ProfileStartTime=0AxPowProfile(1,1) =0.89, 0, 1, 0.1, 1.05, 0.21.025, 0.3, 9.05, 0.4, 0.895, 0.48 \$end \$model nthermex=0, tref=298.15 internal='off' metal='on' idoxid=0, odoxid=0, cathca=0, baker=1, ProtectiveOxide=1 deformation='off' heat='off' \$end \$boundary heat='on' press=41, zone=2, htco=2, tem=198 htclev(1)=0.15, 0.48 pbh2(1) =7080840, 0, 7105840, 20, 7092560, 40 7085520, 60, 7114430, 80, 7093340, 100 7091770, 120, 7007400, 140, 6962860, 160 6959740, 180, 6976930, 200, 6979270, 220 $6948020,\ 240,\ 6980830,\ 260,\ 6982400,\ 280,\ 6930830,\ 299.5$ 5012810, 300, 3564320, 300.5, 3436190, 301 3233060, 303, 2923680, 304, 2672890, 305 2479130, 306, 2190840, 308.5, 2055680, 310.5 1893960, 313, 1812710, 317, 1711920, 319.5 1557230, 322, 1359570, 324.5, 1193940, 327 1043930, 329, 881429, 331.5, 778301, 336 664235, 341, 476730, 345, 440010, 358.5 445479, 389, 465010, 530.5, 462667, 889 452510, 1000 htca(1,1) =2000011, 0, 2000011, 1tblka(1,1) =511.303, 0, 511.062, 20, 511.968, 40 512.042, 60, 512.704, 80, 512.942, 100 512.707, 120, 536.403, 140, 538.83, 160

naxn=10

539.372, 180, 539.558, 200, 540.206, 220540.272, 240, 540.004, 260, 540.099, 280 520.776, 300, 475.628, 320, 472.011, 321.5  $468.096,\, 323,\, 466.694,\, 323.5,\, 465.286,\, 324$  $463.647,\,324.5,\,462.188,\,325,\,460.664,\,325.5$ 459.199, 326, 457.542, 326.5, 456.079, 327 452.952, 328, 449.843, 329, 447.278, 330 445.937, 330.5, 444.84, 331, 443.495, 331.5 442.331, 332.5, 445.205, 333, 448.136, 334 480.563, 335, 504.193, 336, 513.792, 336.5 522.159, 337, 538.011, 338, 553.296, 339 559.16, 339.5, 565.715, 340, 572.023, 340.5 577.968, 341, 589.525, 342.5, 599.711, 343 604.62, 343.5, 610.344, 344, 615.598, 344.5 620.961, 345, 632.546, 346, 637.662, 346.5 653.803, 348, 658.963, 348.5, 664.235, 349 679.798, 350.5, 695.211, 352, 705.24, 353 709.848, 353.5, 715.309, 354, 729.824, 355.5 734.76, 356, 744.28, 357.5, 753.94, 358 767.883, 359.5, 782.119, 361, 791.518, 362.5 800.793, 363, 805.09, 363.5, 809.85, 364 823.146, 365.5, 827.848, 366, 831.858, 366.5  $844.859,\, 368,\, 849.153,\, 368.5,\, 861.593,\, 370$ 873.691, 371.5, 885.107, 373, 896.154, 374.5906.989, 376, 921.009, 378, 933.735, 380937.035, 380.5, 939.876, 381, 951.406, 383 961.569, 385, 964.246, 385.5, 966.578, 386 975.714, 388, 984.719, 390, 994.183, 392.5 998.381, 393, 1000.715, 393.5, 1009.179, 395.5 1011.124, 396, 1018.893, 398, 1020.423, 398.5 1022.19, 399, 1024.074, 399.5, 1030.33, 401.5 1035.886, 403.5, 1041.083, 405.5, 1042.141, 406 1043.318, 406.5, 1050.19, 410, 1053.365, 414  $1053.785,\,414.5,\,1055.933,\,417,\,1055.933,\,417.5$ 1057.415, 418, 1058.011, 418.5, 1063.351, 4211071.553, 425, 1077.393, 428.5, 1078.287, 429 1079.719, 429.5, 1094.659, 432, 1094.659, 432.5  $1135.569,\,433,\,1147.743,\,434.5,\,1157.807,\,436$ 1169.423, 438, 1182.33, 440.5, 1184.777, 441 1194.571, 443, 1206.242, 445.5, 1237.362, 453 1264.748, 460.5, 1299.66, 471, 1317.57, 481 1331.11, 490, 1354.57, 509.5, 1384.72, 525 1385.56, 525.5, 1398.25, 533, 1407.3, 539 1415.99, 544.5, 1423.47, 550.5, 1430.03, 558 1436.23, 564, 1443.69, 571, 1449.72, 577.5 $1456.62,\,584,\,1465.61,\,594.5,\,1470.15,\,603$  $1473.37,\,610,\,1475.57,\,614,\,1475.44,\,614.5$ 1473.97, 615, 1471.7, 615.5, 1469.22, 616 1446.81, 620, 1444.03, 620.5, 1441.25, 621 1438.41, 621.5, 1427.81, 623.5, 1425.32, 624 1406.64, 628, 1398.05, 630, 1396.04, 630.5 1393.96, 631, 1381.83, 634, 1379.88, 634.5 1377.88, 635, 1357.53, 640, 1355.41, 640.5 1353.47, 641, 1351.23, 641.5, 1349.3, 642 1326.14, 648, 1303.98, 654, 1279.66, 661  $1247.83,\ 671,\ 1230.939,\ 676.5,\ 1215.565,\ 682$  $1198.015,\,688,\,1184.472,\,693,\,1166.391,\,700$ 1140.658, 710.5, 1115.36, 721.5, 1095.997, 730.5 1078.534, 739, 1063.649, 746.5, 1042.565, 758 1012.998, 775, 993.786, 787.5, 973.278, 801  $953.564,\,815.5,\,924.648,\,839,\,909.07,\,853$ 

 $883.46,\,878.5,\,868.187,\,895.5,\,853.461,\,913$ 832.714, 940.5, 815.263, 967.5, 795.762, 1000 htca(1,2) =2000011, 0, 2000011, 1 tblka(1,2) =524.24, 0, 524.42, 20, 524.721, 40 524.735, 60, 524.614, 80, 523.951, 100 524.556, 120, 540.518, 140, 543.655, 160 544.435, 180, 544.738, 200, 544.196, 220 543.726, 240, 544.887, 260, 543.91, 280 520.716, 300, 475.323, 320, 471.401, 321.5 501.024, 323, 513.295, 323.5, 522.318, 324 528.924, 324.5, 531.146, 325, 535.274, 325.5 542.55, 326, 548.964, 326.5, 553.476, 327 565.708, 328, 577.024, 329, 588.356, 330 593.924, 330.5, 599.018, 331, 603.634, 331.5 608.245, 332.5, 618.986, 333, 628.599, 334 637.912, 335, 646.802, 336, 651.443, 336.5 655.796, 337, 663.783, 338, 668.474, 339 672.063, 339.5, 676.049, 340, 679.745, 340.5 683.327, 341, 690.935, 342.5, 698.077, 343 701.99, 343.5, 705.903, 344, 709.816, 344.5  $713.495,\,345,\,722.169,\,346,\,725.613,\,346.5$  $737.439, \, 348, \, 741.228, \, 348.5, \, 745.533, \, 349$ 756.73, 350.5, 768.031, 352, 775.505, 353779.189, 353.5, 783.322, 354, 793.803, 355.5 797.356, 356, 804.396, 357.5, 811.46, 358 821.384, 359.5, 831.403, 361, 838.037, 362.5 844.268, 363, 847.361, 363.5, 850.575, 364 859.411, 365.5, 862.686, 366, 865.612, 366.5 874.506, 368, 877.258, 368.5, 885.647, 370 893.459, 371.5, 901.388, 373, 908.882, 374.5 916.332, 376, 925.689, 378, 934.545, 380  $936.456,\, 380.5,\, 938.428,\, 381,\, 945.604,\, 383$ 951.633, 385, 953.028, 385.5, 954.31, 386 959.586, 388, 964.953, 390, 970.359, 392.5 973.079, 393, 974.644, 393.5, 980.843, 395.5  $982.368,\, 396,\, 988.628,\, 398,\, 990.091,\, 398.5$ 991.612, 399, 993.133, 399.5, 998.878, 401.5 1004.162, 403.5, 1009.323, 405.5, 1010.55, 406 1011.661, 406.5, 1019.779, 410, 1027.292, 414 1028.182, 414.5, 1032.442, 417, 1032.442, 417.5 1034.093, 418, 1034.863, 418.5, 1038.462, 421 1043.539, 425, 1056.338, 428.5, 1058.89, 429  $1061.206,\,429.5,\,1074.533,\,432,\,1074.533,\,432.5$  $1066.502,\,433,\,1059.317,\,434.5,\,1053.55,\,436$ 1045.957, 438, 1038.293, 440.5, 1037.052, 441 1032.853, 443, 1028.959, 445.5, 1023.939, 453 1021.698, 460.5, 1020.059, 471, 1013.89, 481 1012.07, 490, 1011.131, 509.5, 1013.116, 525 1013.234, 525.5, 1014.723, 533, 1015.831, 539 1016.945, 544.5, 1018.183, 550.5, 1020.294, 558 1021.892, 564, 1023.774, 571, 1025.191, 577.5 1026.539, 584, 1026.484, 594.5, 1019.949, 603 1013.309, 610, 1009.368, 614, 1008.609, 614.5 1007.201, 615, 1005.673, 615.5, 1003.972, 616  $988.802,\, 620,\, 986.812,\, 620.5,\, 984.881,\, 621$ 982.902, 621.5, 975.144, 623.5, 973.284, 624958.656, 628, 951.757, 630, 950.135, 630.5 948.452, 631, 938.71, 634, 937.145, 634.5  $935.64,\, 635,\, 920.843,\, 640,\, 919.454,\, 640.5$ 

918.061, 641, 916.555, 641.5, 915.284, 642 899.555, 648, 885.246, 654, 870.015, 661 850.079, 671, 839.869, 676.5, 830.086, 682 819.994, 688, 812.033, 693, 801.48, 700 786.58, 710.5, 772.253, 721.5, 761.344, 730.5 751.579, 739, 743.772, 746.5, 732.256, 758 716.433, 775, 706.395, 787.5, 695.509, 801 685.081, 815.5, 669.989, 839, 661.948, 853 648.611, 878.5, 640.713, 895.5, 633.166, 913 622.62, 940.5, 613.775, 967.5, 604.005, 1000 \$end