



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

*Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en
operación*

por *Alejandro Soba*

Directora de Tesis: Dra. Alicia Denis

Lugar de Trabajo: Sector códigos y Modelos, Departamento Combustibles Nucleares,
Comisión Nacional de Energía Atómica

Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área de Ciencias Físicas

Febrero de 2007

Aunque leo, nada encuentro
Que calme mi ansiedad
Un sórdido materialismo
Es lo que el mundo persigue
En vano busco en las escrituras
Una respuesta del cielo.

Liu Tsung-Yuan (773-819)
En el templo del monte Ch'ao (fragmento)

Cada vez que leo este poema pienso en aquellas cosas inescribibles. Aquellas que son imposibles de encontrar en materiales sumamente tangibles como el papel, la tinta y el símbolo. Entonces intento imaginar lo imposible: describir con palabras un producto tan etéreo como el sentir. Y si bien cualquier científico moderno sabe que el sentir no es más que una reacción química, resulta igualmente difícil explicarlo.

Por otro lado ¿Cómo escapar durante estos menesteres de la banalidad de la palabra de agradecimiento, o los lugares comunes que expresan la eterna amistad, el cursi amor incondicional o la deuda impagable? Es por eso que en opúsculos similares, en ocasiones muy parecidas a ésta que me convoca, suelo omitir las páginas de agradecimiento y dedicatorias para pasar directamente al cuerpo principal del texto justificando o no, según sea mi estado de ánimo, los motivos que me llevan a hacerlo de ese modo.

No obstante la costumbre está para ser corrompida como la virtud de las niñas o la honra de los políticos nóveles.

Y puesto que esta página es el inicio del final de un ciclo, no estaría mal que agradeciera a quien así lo merece y se lo ha ganado a través de contables pero infinitos días de trabajo. No sólo por la paciencia sostenida al trabajar junto a mi, soportando mis huraños silencios y mis toscas respuestas de acuerdo al clima imperante; o por su esfuerzo en convertirme en un profesional a pesar de mi mismo, de mi renegada posición ante la existencia en general, cuanto más al orden establecido y los comportamientos correctos, sino también por el consejo acertado, el aliento medido, la tolerancia cierta, la palabra necesitada.

Podría continuar rememorando situaciones en las que Alicia ha tenido que demostrar sus cualidades (no tan elásticas para con otros congéneres por cierto) conmigo, eventos que la llevaron a convertirse en mucho más que una jefa o directora de tesis, eventos que obviamente la mantendrán entre el reducido número de personas con las cuales ya no hará falta interponer papel, tinta y símbolos para establecer una comunicación.

Simulation of the thermo mechanical behavior of a fuel rod in operation

Abstract

This work summarizes the development of the computer code DIONISIO, that describes some of the main phenomena occurring in a nuclear fuel rod throughout its life. Temperature distribution, thermal expansion, elastic and plastic strains, creep, irradiation growth, mechanical interaction between pellet and cladding, fission gas release, gas mixing, swelling, densification and restructuring are modeled. The code allows to include the presence and evolution of a crack in the cladding.

The code is bidimensional, assumes cylindrical symmetry for the rod and uses the finite element method to integrate the differential equations. The stress-strain and heat conduction problems are non-linear due to plasticity and to the temperature dependence of the thermal conductivity. The fission gas inventory is calculated with a diffusion model, assuming spherical grains and using a one-dimensional finite element scheme. The fracture problem is resolved using quadratic eight nodes elements.

The evolution of a set of physical phenomena and their mutual interactions are simulated during an averaged power history. In each power step the instantaneous distribution of temperature and the elasto plastic variables are calculated in the domain. Then, the time dependent phenomena are evaluated.

Good results were obtained for the simulation of the irradiation tests of the first argentine prototypes of MOX fuels, of the FUMEX I and II series and different experiments for pressurized water reactor (PWR) and pressurized heavy water reactors (PWHR). The code also participated in an international blind exercise organized by the International Atomic Energy Agency (IAEA) devoted to PHWR's.

In a different field, a code was built to simulate the irradiation behavior of research reactors plate type fuels. It was developed in two versions: PLACA, dedicated to monolithic fuels and DPLACA, for dispersed fuels.

The comparison of the results of these codes with experimental determinations and with predictions of other similar codes was highly satisfactory.

Key words: Nuclear physics, nuclear fuel, Numeric simulation, Finite element method.

Resumen

Se presenta el desarrollo del código de cálculo DIONISIO que simula los fenómenos fundamentales que ocurren en un elemento combustible dentro de un reactor de potencia en operación: distribución de temperatura, dilatación térmica, deformaciones elástica y plástica, fluencia, crecimiento por irradiación, interacción mecánica entre la pastilla y la vaina, liberación de gases de fisión, hinchado, densificación, reestructuración del combustible entre otros. El código posee un módulo que permite considerar la presencia y evolución de una fisura en la vaina.

El cálculo supone simetría axial y se emplean elementos finitos cuadráticos para discretizar el problema. Para calcular el inventario de gases de fisión se emplea un modelo de difusión unidimensional sobre los granos supuestos esféricos. El problema de fractura utiliza elementos cuadráticos de ocho nodos.

A lo largo de una historia de potencia promediada se considera la evolución de los fenómenos físicos intervinientes y sus mutuas interacciones. En cada paso de potencia se obtiene la distribución de temperatura en el dominio de interés y el comportamiento elastoplástico instantáneo, para posteriormente considerar las situaciones dependientes del tiempo.

El código se empleó para simular experimentos, en particular las irradiaciones de combustibles de óxidos mixtos (MOX) fabricados por Argentina en 1986, los de la serie FUMEX I y II para reactores de agua liviana presurizada (PWR) así como para reactores de agua pesada presurizada (PHWR). El código participó en un experimento ciego organizado por la Internacional Atomic Energy Agency (IAEA) a partir de datos obtenidos sobre reactores PHWR.

Dentro de un campo diferente se construyó un código para simular el comportamiento bajo irradiación de combustibles de reactores de investigación. Posee dos versiones: PLACA para combustibles monolítico, y DPLACA para disperso. La comparación de los resultados de esos códigos con datos experimentales y con predicciones de códigos similares fue altamente satisfactoria.

Palabras clave: Física nuclear, Combustibles nucleares, Simulación numérica, Método de elementos finitos.

INDICE

Introducción General	1
I. INTRODUCCION	3
II. DESCRIPCION GENERAL DE LOS MODELOS	23
III. TRATAMIENTO DEL GAP Y DEL PROBLEMA DE CONTACTO VAINA-PASTILLA.	55
IV. FRACTOMECANICA EN VAINAS DE ZIRCALOY DE ELEMENTOS COMBUSTIBLES EN OPERACION	75
V. VALIDACION	88
VI. PLACA/DPLACA: CODIGO PARA LA SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO DE UN COMBUSTIBLE TIPO PLACA MONOLITICO/DISPERSO	110
A modo de conclusión	133
Apéndice I: Códigos Asociados	135

Introducción General

Existen diversas y variadas razones que justifican e impulsan el desarrollo continuo de programas que se abocan a la simulación de los complejos fenómenos involucrados en la vida de un elemento combustible nuclear. En primer lugar, el estudio termomecánico de un proceso de quemado de combustible responde a numerosos factores interconectados, tanto físicos como químicos, los que aún en forma matemáticamente simplificada en ecuaciones diferenciales ordinarias, deben resolverse numéricamente. Las predicciones de dichas simulaciones son fuente de ajustes y mejoras en el diseño del combustible y su vaina, reduciendo significativamente la cantidad de ensayos experimentales necesarios para optimizar un producto.

Por otro lado, los numerosos fenómenos mencionados responden a la historia de potencia a la que es sometido el elemento combustible y al tiempo en que éste permanece en actividad. Esto trae aparejado que no todos los parámetros involucrados en el proceso puedan ser medidos con exactitud debido a la inaccesibilidad del mismo, que el costo necesario para obtener un resultado sea prohibitivo, etc. Por estas razones un código de simulación probado, si bien no otorga una respuesta concluyente, permite obtener una base sobre la que comenzar a calcular o proyectar ciertos emprendimientos en forma económica y segura. Del mismo modo una mejora de diseño puede ser analizada mediante dichos códigos y ser corregida o modificada sin necesidad de comenzar una costosa implementación en planta.

En tercer lugar los tiempos involucrados en cualquier tipo de experimento son extensos. Los materiales irradiados requieren de un tratamiento particularmente cuidadoso que sólo puede realizarse en celdas calientes. Aún acelerando el envejecimiento de un dado elemento combustible, los experimentos pueden requerir meses y años para arrojar alguna conclusión valedera. Un código recrea sin riesgo alguno varios años de historia en unos minutos ahorrando un valioso tiempo de reactor y permite optimizar la preparación de mejores y más estudiados experimentos.

Por último, Argentina es a través de la CNEA y de las empresas del área un país productor y generador de tecnología nuclear y, al igual que otros países de similares aspiraciones, necesita contar con herramientas modernas de simulación numérica de desarrollo propio, además de los paquetes adquiridos en el extranjero.

Uno de los aspectos más críticos en el funcionamiento de un combustible nuclear de potencia, limitante de su vida útil y condicionante de la seguridad de la vaina, es el problema de la interacción vaina-pastilla PCI (Pellet Cladding Interaction). El PCI es en general el resultado de una combinación de fenómenos térmicos, de irradiación, químicos y mecánicos, entre el combustible y el material de la vaina. DIONISIO fue en sus orígenes un intento por simular este complejo problema. El agregado de nuevos fenómenos y la generalización de muchos de sus resultados a una barra combustible completa se convirtieron en la segunda tarea del desarrollo que demostró sus aceptables resultados a lo largo de diferentes simulaciones comparadas con experimentos e impulsó la idea de que se tenía entre manos un programa al que se podría convertir progresivamente en una herramienta de simulación del comportamiento del combustible bajo irradiación. Este propósito se vio facilitado por la forma modular que tomó el código desde su comienzo y el deseo siempre presente durante el

desarrollo de construir un programa accesible para cualquier interesado para poder maximizar el aprovechamiento de los diversos resultados que produce.

Se ha dividido el siguiente trabajo en seis capítulos y una discusión final. El primer capítulo consiste en una descripción de los diferentes tipos de reactores nucleares existentes y de las variables involucradas que hacen a los fenómenos que se desea simular. Es una suerte de posicionamiento tecnológico del código. El segundo capítulo contiene la descripción de los modelos que hemos utilizado para cada fenómeno analizado. Se presentan resultados y validaciones particulares de algunos de esos modelos cuando es pertinente. El tercer capítulo se aboca al problema de contacto entre la pastilla y la vaina, tanto en lo que hace a sus particularidades térmicas como mecánicas. El cuarto describe el fenómeno de fractura de la vaina y su tratamiento en DIONISIO. El quinto capítulo presenta algunas de las múltiples validaciones a las que se sometió el código. Por último, en el capítulo seis se presentan y describen los códigos PLACA/DPLACA, “hermanos menores” de DIONISIO dedicados a los combustibles para reactores experimentales. El lector casual encontrará los capítulos segundo, tercero y cuarto extremadamente técnicos por lo que se le permite saltarlos.

Se agrega un apéndice en donde se presenta una descripción de programas derivados útiles en el pre-procesamiento de la entrada de DIONISIO. En este mismo apartado se describen algunas de las funcionalidades computacionales de los códigos y sus diferentes versiones de acuerdo al compilador que se utilice.

I. INTRODUCCION

1. Reactores Nucleares de potencia

Un reactor nuclear de potencia es un sistema de producción de energía que utiliza reacciones nucleares involucradas en la fisión controlada de átomos de uranio para obtener energía nuclear. Los componentes esenciales de un reactor térmico son: un núcleo en donde se encuentran los elementos combustibles que contienen el material fisil, un material moderador cuya función es frenar los neutrones hasta alcanzar velocidades adecuadas como para reproducir la reacción, un refrigerante, líquido o gaseoso, que remueve el calor generado por el combustible y un reflector que rodea al núcleo y evita que los neutrones escapen del sistema. Dependiendo del tipo de reactor, el moderador y el refrigerante pueden estar combinados, como en reactores de agua liviana, en donde el agua cumple ambas funciones, o separados, como los reactores con moderadores compuestos por un material sólido (en general grafito), que utilizan un refrigerante líquido o gaseoso.

Otro componente fundamental de un reactor es el sistema de control de las reacciones, en general constituido por barras de un material absorbente de neutrones (barras de control) cuya función en condiciones normales de operación es mantener la reacción estable y si es necesario, apagar el reactor.

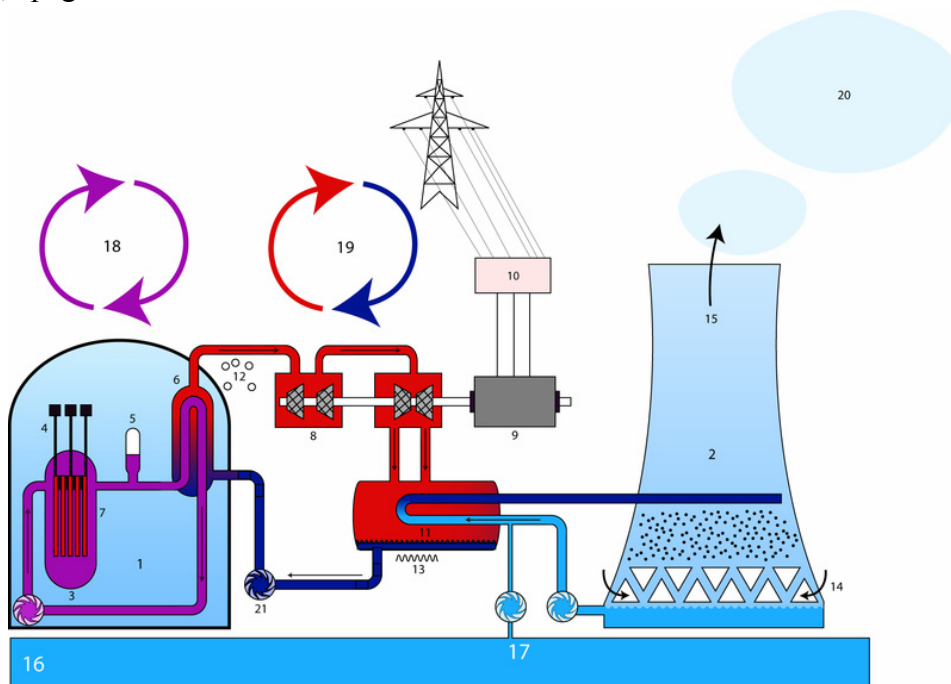


Figura I.1: Esquema general de un reactor de potencia de agua presurizada (PWR)

- 1) Recinto de contención.
- 2) Torre de enfriamiento.
- 3) Núcleo.
- 4) Barras de control.
- 5) Presurizador.
- 6) Generador de vapor.
- 7) Elementos combustibles.
- 8) Turbina.
- 9) Generador.
- 10) Transformador.
- 11) Condensador.
- 12) Productos gaseosos.
- 13) Productos líquidos.
- 14) Aire.
- 15) Aire húmedo.
- 16) Río.
- 17) Circulación del agua refrigerada.
- 18) Circuito primario.
- 19) Circuito secundario.
- 20) Vapor de agua.
- 21) Bomba.

Las reacciones nucleares dentro del núcleo del reactor generan calor que es removido por el refrigerante que circula por el circuito primario (figura I.1). En el generador de vapor se produce la transferencia de este calor al agua que circula por el circuito secundario, el que al

llegar a las turbinas, da lugar a la producción de electricidad. En general, como en el reactor esquematizado en la figura, la transferencia de calor es indirecta. En ciclos directos, como en reactores de agua hirviendo (boiling reactors), el refrigerante se evapora en contacto con el combustible y es conducido directamente hacia las turbinas.

Como subproducto de cada fisión nuclear se produce un número n de neutrones¹. Cuando $n > 2$ es posible obtener un sistema que reproduzca la reacción, es decir que uno de los neutrones generados en cada fisión va a sobrevivir a los procesos de escape del sistema o de captura parasitaria y vuelva a producir fisión en otro átomo fisil, alcanzándose una reacción en cadena autosostenida (donde el número de fisiones que ocurren por unidad de tiempo en el sistema es constante), principio del funcionamiento de un reactor. El factor de multiplicación se define como el cociente entre el número de fisiones que ocurre en una generación y el número de fisiones en la generación precedente. La reacción autosostenida corresponde a un factor de multiplicación unitario y el sistema se denomina **crítico**. Cuando el factor de multiplicación es mayor que la unidad, el número de fisiones crece en cada generación: el sistema es **supercrítico**. Cuando el factor de multiplicación es menor que uno el número de fisiones decrece en el tiempo y el sistema es **subcrítico**^[1,2].

Para que un sistema esté crítico, se requiere un balance entre el número de neutrones que se produce y el que desaparece. Este balance está gobernado por los parámetros geométricos del reactor así como por la composición química del sistema. Las mencionadas barras de control se construyen con materiales absorbentes de neutrones (en general cadmio o boro), capaces de capturar los neutrones que se encuentran en el medio circundante y así evitar que se produzcan nuevas fisiones de núcleos atómicos del uranio. En caso de accidente las barras caen abruptamente dentro del núcleo para reducir el factor de multiplicidad a valores menores a la unidad y apagar el reactor.

La energía de un neutrón inmediatamente después de producirse la fisión es de aproximadamente 2 MeV . Sin embargo la mayor probabilidad de colisión entre los neutrones generados y otro átomo fisil se encuentra en el rango energético de unos pocos eV (“neutrones térmicos”, así denominados por corresponder a la energía de agitación térmica) de modo que dichos neutrones deben ser desacelerados por medio de interacciones inelásticas con átomos del moderador para disminuir su energía hasta el rango de energía térmica para tener alta probabilidad de reproducir la fisión. El moderador al mismo tiempo debe poseer una baja sección eficaz de captura para no absorber neutrones. Con lo cual la elección de esos moderadores se reduce a un pequeño grupo de materiales: agua, agua pesada o grafito son los que cumplen con esas características bivalentes. Por este motivo los reactores con moderador se denominan reactores térmicos (thermal nuclear reactor) mientras que reactores sin moderador, denominados reactores rápidos (fast reactor), utilizan neutrones sin moderar (de 2 MeV de energía), pero requieren para alcanzar criticidad de un incremento de átomos fisiles pesados (U^{235} , Pu^{239}) en el combustible para elevar la probabilidad de colisión.

El uranio se encuentra en la naturaleza en su isótopo mayoritario U^{238} , con sólo el 0,71% de U^{235} , que es el isótopo fisil mayormente utilizado para las reacciones. Se denomina enriquecimiento al porcentaje de isótopo de U^{235} que el material posee.

¹ 2,418 neutrones por cada fisión de U^{235} y uranio natural, 2,871 por cada una de Pu^{239} .

De acuerdo al tipo de moderador, del refrigerante o del rango de energía de los neutrones utilizados para la fisión, se pueden clasificar a los diferentes tipos de reactores nucleares para producción de energía. La tabla I.1 muestra una lista de esos tipos de reactores en donde se reseñan brevemente las características de cada uno.

TABLA I.1 Clasificación de reactores^[19]

Reactor	PWR (VVER)	BWR	PHWR	UNGG MAGNOX	AGR	RHT	RBMK	FR LMFBR
Energía neutrón	Térmica	Térmica	Térmica	Térmica	Térmica	Térmica	Térmica	Rápida
Moderador	H ₂ O	H ₂ O	D ₂ O	Grafito	Grafito	Grafito	Grafito	--
Refrigerante								
Tipo	H ₂ O presur.	H ₂ O hirviendo	D ₂ O presur.	CO ₂	CO ₂	He	H ₂ O hirv.	Na
Presión (bar)	155	70	110	25	41	49	70	5
Temp. de salida(C)	320	286	310	400	630	770	284	550
Combustible								
Tipo	UO ₂ (U,Pu)O ₂	UO ₂ (U,Pu)O ₂	UO ₂	Aleaciones bajas U	UO ₂	UO ₂ UC ₂	UO ₂	(U,Pu)O ₂ UPUZr
Enriq.(*)	Bajo	Bajo	U nat.	U nat.	Bajo	Alto	Bajo	Intermedio
Forma del elemento	Barra	Barra	Barra	Anillos o barras sólidas	Barra	Partículas	Barra	Barra
Material Vaina(+)	Zry-4	Zry-2	Zry-4	Mg0.6%Zr	Acero inox.	C, SiC	Zr - 1 %Nb	Acero Aleac. FeNi
Posición combustible	Vertical	Vertical	Horizontal	Vertical	Vertical	Vertical	Vertical	Vertical

(*) Enriquecimiento bajo <8%, intermedio 8-30%, alto >30%.

(+) Zircaloy-2 y Zircaloy-4 son dos aleaciones de zirconio que contienen estaño.

Los reactores de agua liviana (light water reactor (LWR)) utilizan agua como refrigerante y moderador. En la tabla I.1 son los denominados PWR (presurized), BWR (boiling), VVER (iniciales en ruso, hacen referencia a los tipo de reactores PWR en Europa del este). Los de agua pesada (heavy water reactor (HWR)) en cambio, utilizan D₂O como moderador, en la tabla I.1 aparecen como PHWR por que utilizan el refrigerante a presión. Luego están los reactores que utilizan grafito como moderador y gas como refrigerante, en la tabla I.1 se listan tres tipos: UNGG-Magnox sigla en el Reino Unido que significa Natural Uranium Gas-Grafithe, este tipo de reactor posee CO₂ como refrigerante; AGR (Advance Gas Cooled) que también utilizan CO₂ y el HTR (high temperature reactors) que utilizan He. Existen también reactores de moderador de grafito y agua liviana hirviendo como refrigerante, RBMK (iniciales en ruso) tristemente celebres por ser el tipo de reactores del accidente de Chernobyl. Por último podemos mencionar a los reactores rápidos, (fast reactors (FR) o liquid metal fast reactors (LMFR)), que utilizan neutrones rápidos y sodio como refrigerante. Estos

últimos también son además reproductores, pues los átomos de U^{238} sufren al colisionar con neutrones rápidos reacciones que dan lugar a la formación de Pu^{239} , otro isótopo físil.

Existen en la actualidad 440 plantas nucleares en operación con un total de capacidad instalada de 360 GW, además de 27 nuevas plantas en construcción. La electricidad generada por energía nuclear en todo el mundo es de aproximadamente un 17% del suministro del total de energía eléctrica utilizada^[1].

Los reactores LWR representan el 86% del total de la capacidad energética mundial generada con energía nuclear. De ese porcentaje 55% son PWRs, 8,5% PWRs rusos y 22,7 son BWR. En la Argentina se utilizan reactores PHWR, uno de ellos de fabricación canadiense desde donde deriva el nombre CANDU (CANadian Deuterium Uranium). Los sistemas UNGG/MAGNOX han sido abandonados y no hay actualmente ninguno en construcción.

Tabla I.2 Reactores en operación y en construcción por tipo^[6]

Tipo	En operación		En construcción	
	Cantidad	Total MW(e)	Cantidad	Total MW(e)
ABWR	3	3955	3	3904
AGR	14	8380	0	0
BWR	90	78025	1	1067
FBR	3	1039	0	0
GCR	10	2384	0	0
LWGR	17	12589	1	925
PHWR	39	19972	8	3135
PWR	214	204335	6	6111
WWER	50	33040	8	7534
Total:	440	363719	27	22676

Centrales argentinas de potencia

Central Nuclear Atucha I (CNA I): pertenece al tipo de centrales nucleares conocidas como PHWR, su núcleo se encuentra en un “recipiente de presión” donde el agua pesada a presión actúa como moderador y refrigerante. Emplea como combustible en sus 252 canales pastillas de dióxido de uranio natural (0,7% de U^{235}) o levemente enriquecido (ULE, 0,85% de U^{235}) envainadas en Zircaloy y genera 357 MW(e) de potencia. Cada elemento combustible está formado por 37 barras y contiene 152 Kg de uranio natural. Como moderador y como refrigerante se emplea agua pesada (D_2O) que circula por el recipiente de presión del reactor, y posee además conductos de refrigeración axiales que conforman circuitos separados. Esta distribución permite conseguir independientemente de la temperatura del medio refrigerante, que la temperatura del moderador sea baja (130°C a 220°C), a fin de mejorar el balance de neutrones.

Para regular la reactividad existen dos grupos de barras de control. El primero lo forman tres barras de acero que bajo condiciones normales de operación están introducidas en sus tres cuartas partes dentro del núcleo. El segundo grupo se compone de tres barras de

hafnio y se encuentra situado en el cuarto superior del núcleo del reactor. La configuración de las barras de control y sus diferentes profundidades de inmersión no solamente permiten influir sobre la reactividad del reactor, sino también sobre la distribución de las densidades de potencia.

El reactor se desconecta normalmente por la caída rápida de las barras de control y las barras adicionales de hafnio que atraviesan el núcleo del reactor con una inclinación de 20 grados aproximadamente.

Central Nuclear Embalse (CNE): pertenece al tipo de centrales nucleares conocidas como PHWR, subgrupo “tubos de presión”, esto es, sus canales de combustible se encuentran presurizados con agua pesada, y emplea como combustible en sus 380 canales, uranio natural (0,7% de U^{235}), y genera 648 MWe de potencia bruta. Utiliza agua pesada como moderador y como refrigerante.

Central Nuclear Atucha II (CNA II): será la tercera central del país, similar a Atucha I en sus características principales, pero con una potencia bruta mayor: 745 MWe. La ubicación es contigua a la de la Central Atucha I, aprovechando gran parte de su infraestructura^[1,4,7].

Combustibles nucleares de reactores de potencia

En la mayoría de los reactores (LWR y PHWR) se utiliza un combustible compuesto por óxido de uranio u óxidos mixtos (UO_2 , $(U,Pu)O_2$). La elección de un combustible depende básicamente del tipo de reactor en el que va a utilizarse: para reactores PHWR, con agua pesada como moderador y refrigerante, el uranio se utiliza en su forma natural (0.7% de enriquecimiento) o levemente enriquecido ($< \sim 1\%$). En el caso de LWR, el enriquecimiento puede alcanzar hasta el 5% de U^{235} . Además de esto, el combustible debe satisfacer ciertas condiciones geométricas relativas a la estabilidad mecánica y química bajo irradiación, poseer una compatibilidad fisicoquímica con el material de la vaina (para evitar reacciones de ataque químico) y con el refrigerante o el moderador en caso de posible contacto ante falla. Por último y no menos importante, poseer un costo de fabricación económicamente aceptable tanto en lo referente a su fabricación como a su reprocesamiento.

El óxido combustible es el más utilizado y el que acumula la mayor cantidad de experiencia en todo su ciclo de procesamiento; se compacta en forma de pastillas cilíndricas a partir de polvo de UO_2 . Las pastillas se envainan en tubos de Zircaloy constituyendo una barra combustible. Para una dada potencia lineal (por unidad de longitud), la temperatura en el centro de la pastilla se incrementa con el radio por lo que barras de radio pequeño son recomendables. Por otro lado, esto último se contrapone con la necesidad de que la carga total de uranio del núcleo sea suficiente para mantener criticidad. Otro límite está impuesto por el flujo de calor máximo superficial que el refrigerante es capaz de extraer. Para una dada potencia lineal, el flujo calórico superficial decrece cuando aumenta el diámetro de la barra.

Un cierto número de barras ensambladas en configuraciones predeterminadas por el tamaño y forma del núcleo del reactor, constituyen un elemento combustible o ensamble de combustible (fuel assembly). En reactores LWR los elementos combustibles son de aproximadamente 4 metros de longitud (figura I.2) con una estructura de soportes denominadas boquillas inferiores o superiores según la posición en el ensamblaje. Los

reactores CANDU (PHWR), están constituidos por 36 barras distribuidas en forma de anillos concéntricos soldadas a dos grillas que hacen las veces de soportes. La longitud de estos elementos es de 60 cm aproximadamente (figura I.3) y se ubican uno a continuación de otro en los tubos de presión. Esta disposición facilita el recambio de elementos combustibles sin tener que detener el reactor. El ensamble contiene también tubos guías de instrumentación o tubos vacíos para estabilizar el flujo neutrónico. También puede haber barras con venenos quemables, que en el comienzo de la vida nivelan el flujo de neutrones extra del combustible².

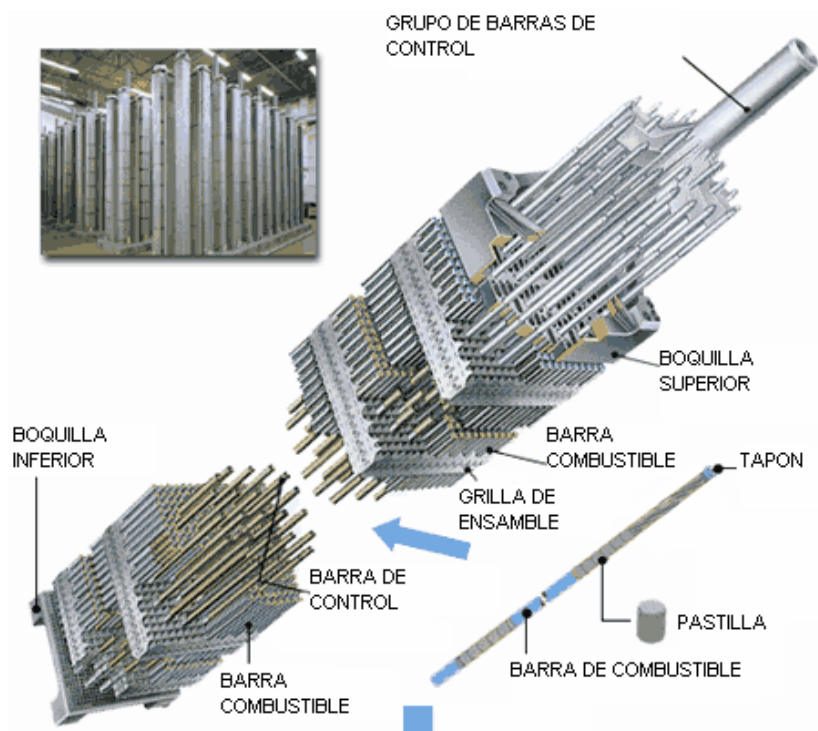


Figura I.2: Elemento combustible de FRAMATOME, LWR.

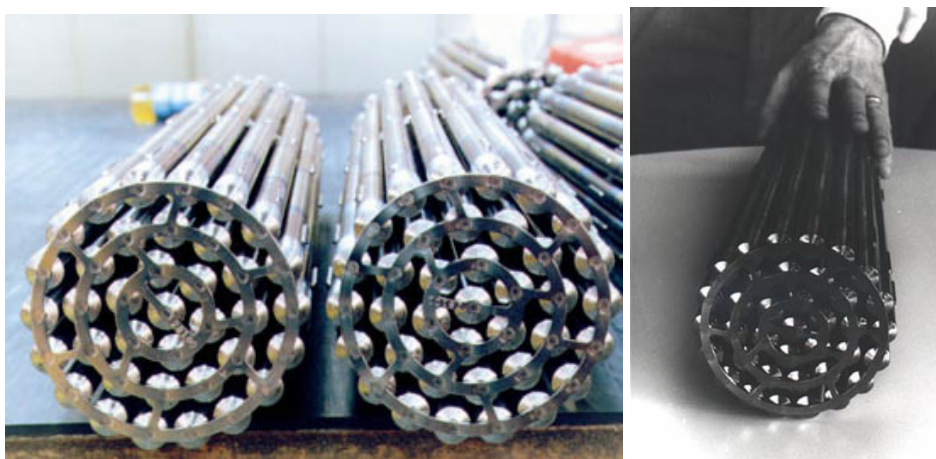


Figura I.3: Elemento combustible tipo CANDU^[34]

² Un veneno quemable, como el gadolinio, es una sustancia que absorbe neutrones. Cuando un combustible fresco se introduce en el reactor, el exceso de neutrones se limita utilizando este tipo de venenos artificiales para mantener la reactividad controlada. El veneno se denomina quemable porque se consume después de un cierto tiempo, el necesario como para que la cantidad de neutrones se estabilice en el valor requerido^[3,4].

En la figura I.4 se muestra un esquema de una barra combustible, los elementos básicos constitutivos del elemento combustible. El tamaño de una barra, y por ende la cantidad de pastillas que contiene, depende del diseño del reactor.

Los componentes principales de una barra son:

A) La vaina: construida de Zircaloy, con un espesor entre 0,6-1,0 mm. El Zircaloy es una aleación basada en zirconio con aleantes de Sn entre 1,2-1,7%, Fe 0,18-0,24%, Cr 0,07-0,13%, Fe+Cr 0,28-0,37% y O 0,1-0,15% (todos en porcentaje en peso). Los aleantes mejoran las propiedades mecánicas y la resistencia a la corrosión de la vaina. La elección de este material para construir vainas de combustibles se debe a una combinación de propiedades que lo convierten en óptimo. En primer lugar una sección eficaz de absorción neutrónica baja, además de que los isótopos de zirconio que se activan por captura neutrónica poseen una vida media corta.

Tabla I.3 Isótopos activados por captura en el Zry^[19]

	Abundancia relativa	Reacción	Producto	Período
⁹⁰ Zr	51.46	n,p	⁹⁰ Y	64 hs
⁹¹ Zr	11.23	n,p	⁹¹ Y	58 d
⁹⁴ Zr	17.4	n,γ	⁹⁵ Zr	64 d

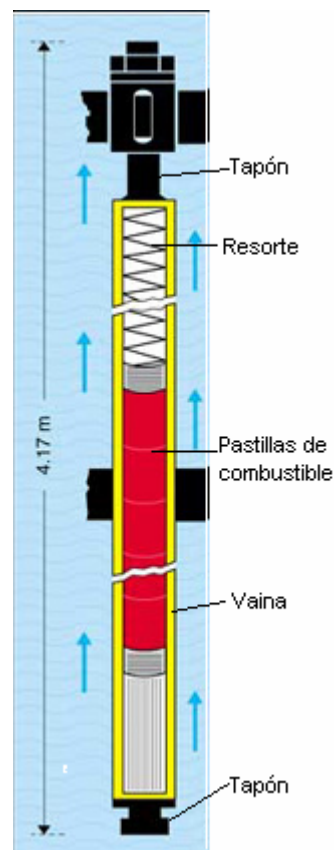


Figura I.4: Esquema de una barra combustible.

En segundo lugar su resistencia mecánica es excelente. Por último el Zry se corroe moderadamente en condiciones normales. Principalmente se utilizan dos aleaciones de zirconio denominadas Zircaloy-2 y Zircaloy-4. La tabla I.4 enumera las deferencias en sus aleantes.

Tabla I.4: diferentes aleantes en Zry-2 y Zry-4^[19]

	Cr	Ni	Fe
Zircaloy -2	0,05/0,15	0,03/0,08	0,07/0,2
Zircaloy -4	0,07/0,23	<0,007	0,18/0,24

La resistencia a la corrosión por agua se incrementa acrecentando la cantidad de Cr y Fe y quitando el níquel en el Zry-4. Por eso se utilizan en reactores PWR para evitar el ingreso de hidrógeno en la vaina, situación no requerida en reactores BWR en donde la absorción de ese elemento es menos probable. El material de la vaina es sometido además a diversos tratamientos térmicos, básicamente para relajar las tensiones acumuladas en el trabajado mecánico.

B) La pila de combustible: conformada por pastillas de UO₂. El dióxido de uranio es un cerámico de densidad 10,96g/cm³. La pastilla se obtiene por sinterización del material en

polvo con una porosidad de fabricación de entre 3-6%. Las dimensiones características varían por el tipo de elemento del que forman parte, pero aproximadamente los radios oscilan entre 0,5-0,6 cm y 1,0-2,0 cm de altura, algunos diseños de pastilla presentan dishing es decir un espacio cóncavo en las tapas que posee una profundidad de 0,01-0,03 cm destinado a evitar el contacto extremo entre pastillas cuando se encuentran dilatadas en operación o a muy alta temperatura. El hombro y el chanfle oscilan entre 0,01-0,02 cm (no todas las pastillas los poseen). En la figura I.5 se observa un esquema de una pastilla tipo CANDU fuera de escala.

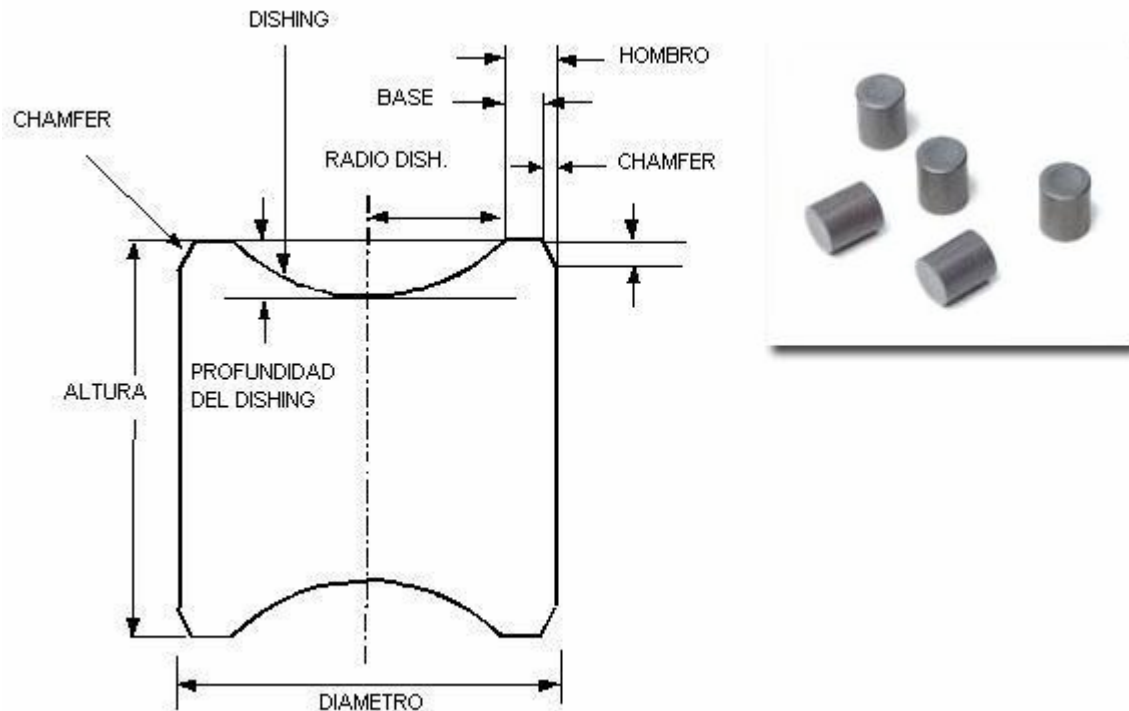


Figura I.5: Esquema de una pastilla tipo CANDU

C) El resorte: para mantener la pila ajustada y permitir el espacio para el plenum. La barra se cierra con dos tapas en cada extremo. El resorte se construye de acero trabajado en frío y se ubica en la parte superior de la barra. Mantiene la columna de combustible en posición y evita el colapso de la vaina en esa zona por la presión del refrigerante. Las tapas de la barra se sueldan con un proceso TIG (tungstem inert-gas).

Las barras se sellan durante su fabricación con una presión interna no menor a 25 bars de helio, para compensar la tensión de compresión que el refrigerante impone a la vaina durante su operación (unos 100 bars). El helio se elige por poseer un coeficiente de conducción térmica alto para permitir así una buena transferencia de calor entre la pastilla y la vaina.

2. Reactores de investigación

Existen actualmente en el mundo alrededor de 250 reactores de investigación, muchos en etapa de diseño y construcción, mientras que otros están llegando al final de su vida útil. Esos reactores de baja potencia son utilizados como fuentes neutrónicas para producción de radioisótopos, estudio de comportamiento de materiales bajo irradiación e investigación en física básica y constituyen piezas fundamentales del aparato productivo, médico o científico

de todo país avanzado. Se diferencian de las centrales nucleoelectricas en su diseño y en su finalidad: están hechos para producir neutrones, no electricidad, por lo que el combustible se diseña, en general en forma de placas de pequeño espesor, para favorecer la extracción del calor generado por las reacciones nucleares.

Un reactor experimental requiere de una instalación modesta en comparación a las centrales de potencia y todas las variables implicadas se ven reducidas en magnitud y exigencia (figura I.6). El núcleo del reactor, formado por placas que contienen un alto porcentaje de U^{235} (alto en comparación al utilizado en reactores de potencia), alimenta la reacción nuclear que origina el producto principal de este tipo de instalación: los neutrones. El calor generado en la reacción es evacuado del núcleo por el refrigerante (agua) que circula por el circuito primario. Esta masa de agua cede su calor, a través de intercambiadores parecidos a radiadores estancos, al circuito secundario. Para enfriarse parte del agua del circuito secundario se evapora fuera del edificio, en torres de refrigeración; de este modo se logra que el calor fluya desde núcleo del reactor hacia la atmósfera en forma eficiente y segura.

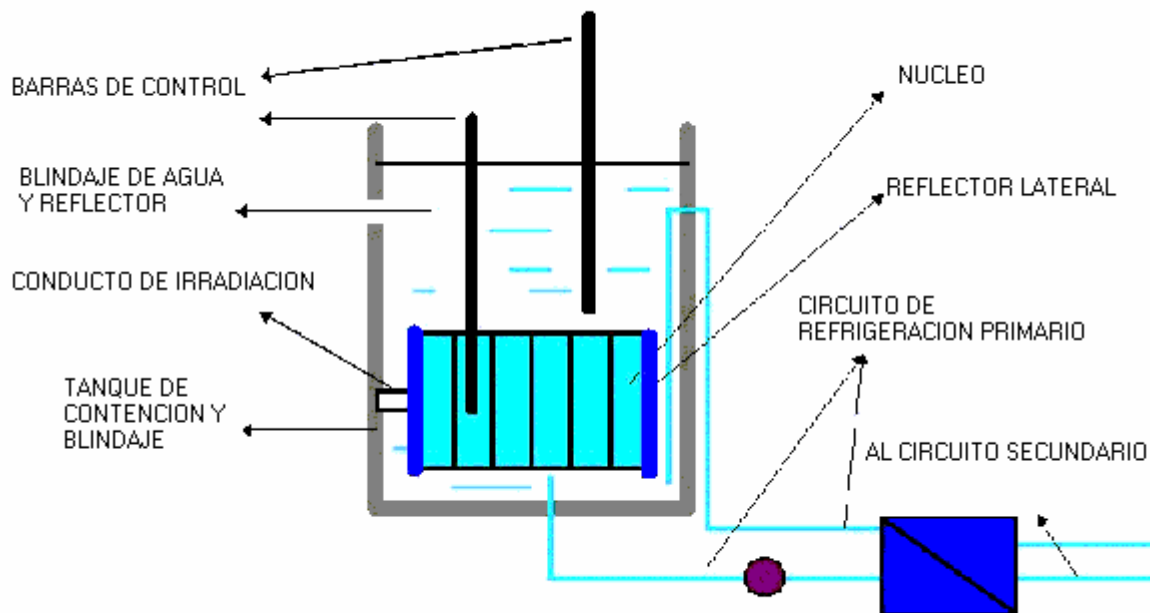


Figura I.6: Esquema de un reactor experimental.

La necesidad de gran cantidad de neutrones requiere de altos enriquecimientos de combustibles. Los reactores de investigación operan con flujos neutrónicos de entre 10^{13} - 10^{15} neutrones/cm² seg y potencias térmicas de entre 10 MW y 20 MW. Mediante un sistema de bombas el agua circula a través del núcleo de elementos combustibles. Ingresa a una temperatura de aproximadamente 40 °C y debido al flujo calórico emerge a unos 65 °C, dependiendo del diseño del reactor.

Cuando el reactor se especializa en la irradiación de blancos o generación de radioisótopos se recurre a la parte del núcleo donde hay mayor densidad de neutrones en donde existen cavidades destinadas a albergar transitoriamente contenedores con las

sustancias a irradiar. Algunos reactores de investigación tienen como función principal, o incluso exclusiva, la fabricación de radioisótopos para uso farmacológico o industrial

Argentina cuenta con 6 reactores de investigación actualmente. El Reactor RA-1, primer reactor nuclear argentino y primero en operar en Latinoamérica, marcó un hito fundamental en la historia de la energía nuclear en nuestro país. Es un reactor de piletas de muy baja potencia instalado en el Centro Atómico Constituyentes en CNEA. El RA-2 instalado en el mismo centro, dejó de operar en 1983. Los reactores RA-0, ubicado en la Universidad Nacional de Córdoba y RA-4, ubicado en la Universidad Nacional de Rosario, son dos instalaciones que fueron cedidas en calidad de préstamo por la CNEA mediante convenios para que esas instituciones los operen con la finalidad de formar profesionales en el campo nuclear. El RA-3 instalado en Ezeiza es utilizado para la producción industrial de radioisótopos. El RA-6, ubicado en Bariloche, es utilizado para investigación y recientemente también para irradiación experimental en terapia de captura de boro (BNCT). Por último el RA-8, ubicado en Río Negro, es un reactor experimental denominado facilidad crítica, diseñado exclusivamente para ensayar el núcleo de la futura central de potencia CAREM³. Este tipo de reactores, “critical facilities”, suelen tener bajas potencias y vidas operativas muy cortas, ya que salen de servicio una vez cumplida su función. Aunque formalmente se asemejan a los reactores de investigación de piletas abiertas, las “critical facilities” tienen un propósito enteramente distinto: comprobar en un modelo físico a escala real la calidad del diseño de los elementos combustibles, así como del diseño del núcleo formado por dichos elementos combustibles.

Además de ello Argentina ha vendido reactores de investigación a Perú (RP-0 y RP-10), a Argelia (NUR), a Egipto (ETRR-2) y a Australia (RRR de LUCAS HEIGHTS)^[1].

Combustibles para reactores de investigación

Los combustibles utilizados por la gran mayoría de los reactores de investigación actualmente en operación son los denominados combustibles dispersos, los cuales consisten en partículas de un compuesto de uranio dispersas en una matriz de un metal (en general aluminio), que asegura una buena extracción de calor de la partícula combustible. Este material así conformado se envaina por colaminación entre dos placas de metal (también en general aluminio) para ser introducido en el reactor. Este tipo de combustible se construye uniendo cierto número de placas en cavidades prismáticas que van a ocupar posiciones determinadas dentro del núcleo. Otras configuraciones de placas pueden curvarse o formar anillos, siempre buscando una distribución de flujo neutrónico óptima, una mejor dispersión del calor generado, más una estabilidad mecánica del sistema adecuada. (Figura I.7)

³ El CAREM es una central nuclear de baja potencia de diseño argentino que por sus innovaciones pertenece al grupo llamado “de cuarta generación”. Es un concepto dos generaciones más evolucionado que la mayor parte de las centrales operativas a fecha de hoy, las PWR, y una generación más avanzada que las PWR “avanzadas”, o APWR (Advanced Pressured Water Reactors) hoy en construcción o iniciando operaciones. Las diferencias del CAREM con estos sistemas son claras: en el CAREM el circuito primario carece de caños. Está integrado al recipiente de presión y solo posee pequeñas conexiones hacia el exterior. Esto restringe a un mínimo la ocurrencia del evento más serio en las centrales convencionales, el LOCA (Loss of Coolant Accident, accidente por pérdida de refrigerante)^[1].

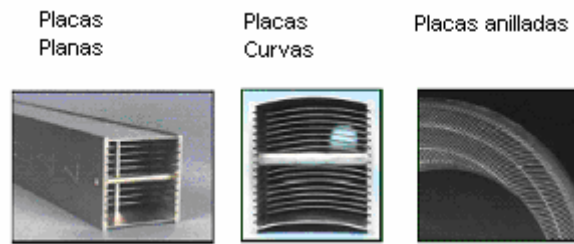


Figura I.7: Distintos tipos de elementos combustible para reactores de investigación: Placas rectas, curvas o formando anillos.

La primera generación de reactores de investigación del tipo MTR (material testing reactors) comenzó a operar en 1952. Empleó combustibles-placa constituidos por aleaciones de uranio-aluminio que consistían básicamente en intermetálicos de UAl_2 y UAl_3 dispersos en matriz de aluminio. Estos combustibles requerían un alto enriquecimiento (90% en el isótopo U^{235}) debido a que la cantidad de masa de uranio que el reactor soporta es reducida y se necesita una cantidad elevada de núcleos fisiles para mantener la reactividad positiva. En busca de combustibles que permitiesen una mayor cantidad de uranio, en los años '60 comienzan a utilizarse óxidos de uranio dispersos en aluminio, el más común de ellos U_3O_8-Al , que aumenta hasta un 50 % más la densidad de uranio. A partir de 1978 en todo el mundo y a instancias el gobierno de USA, se propuso la conversión de todos los reactores de investigación en uso para que funcionen con combustibles de bajo enriquecimiento (Low Enrichment Uranium <20% de U^{235}). Las razones de esta reconversión se fundan en el peligro de proliferación de material radiactivo de posible uso bélico, en el marco del programa denominado Reduced Enrichment for Research and Test Reactors (RERTR)^[9]. De los variados combustibles utilizados, los candidatos para reemplazar a los de alto enriquecimiento fueron los sistemas UAl_x-Al , U_3O_8-Al y $UZrH_x$, que para 1978 poseían densidades de uranio de 1,3, 1,7 y 0,5 g-U/cm³ respectivamente. Inicialmente se buscó llevar esas densidades a los valores más altos posibles alcanzando hasta 2,3 g-U/cm³ para UAl_x-Al , 3,2 g-U/cm³ para U_3O_8-Al y 3,7 g-U/cm³ para $UZrH_x$. Posteriormente los combustibles de siliciuros LEU, que utilizan partículas de U_3Si_2 dispersas en Aluminio, permitieron alcanzar densidades de uranio de 4,8g/cm³. Como resultado de este esfuerzo cerca de 40 reactores fueron convertidos o construidos utilizando combustibles LEU. Sin embargo, esas densidades continúan siendo bajas para reactores de muy alto flujo.

De este modo da comienzo la búsqueda de un combustible nuevo, más denso, que contenga al menos 8-9 g U/cm³, empleando una aleación diferente. La tabla I.5 muestra, a modo de ejemplo, algunas aleaciones posibles y sus respectivas densidades.

Tabla I.5: Aleaciones con alto contenido de uranio

Aleación (wt.%)	Densidad (g/cm ³)	Contenido de U (g/cm ³)
U-10Mo	17,0	15,3
U-4Mo	18,1	17,4
U-9Nb-3Zr	16,2	14,3
U-4Zr-2Nb	17,3	16,3

En 1997 comenzaron los experimentos RERTR-1 & 2 en el Advanced Test Reactor (ATR) en Idaho, diseñados para explorar una serie de aleaciones de muy alta densidad^[10]. Se construyeron placas en matriz de aluminio 6061 y diez de los doce combustibles ensayados fueron aleaciones de uranio: U-10Mo, U-8Mo, U-6Mo, U-4Mo, U-9Nb-3Zr, U-6Nb-4Zr, U-5Nb-3Zr, U-6Mo-1Pt, U-6Mo-0,6Ru y U-10Mo-0,05Sn. Los demás fueron compuestos intermetálicos de uranio: U₂Mo y U₃Si₂. El U₃Si₂ se utilizó como referencia ya que su comportamiento bajo irradiación era muy conocido. Los combustibles se construyeron con polvo atomizado en matriz de aluminio, colaminado con vainas de aluminio, constituyendo “mini placas” de aproximadamente 76 mm x 22 mm x 1,3mm, que fueron sometidas a irradiación con una baja potencia y bajas temperaturas. La cantidad de combustible de las mini placas fue relativamente baja (<30% en volumen).

Básicamente, los resultados de los experimentos muestran que el comportamiento bajo irradiación fue óptimo para aleaciones de U con 6-10% en peso de Mo, con densidades de 15 g/cm³ y con un enriquecimiento del 20%. Sobre la base de este primer grupo de resultados, los programas RERTR-3,-4 y -5 buscaron aumentar la cantidad de combustible en la matriz (50-60%), extender el quemado y las condiciones de operación y probar diseños de placas con UMo monolítico^[11,12,13,14,15,16].

Desafortunadamente los experimentos con combustible disperso arrojan resultados algo desalentadores pues se registra un excesivo crecimiento de una fase de intermetálicos generada entre el compuesto físil y la matriz de aluminio, que produce un aumento significativo de la temperatura de operación de los combustibles, el hinchado no controlado y la consecuente falla de las placas. Al mismo tiempo el crecimiento de esta fase intermetálica, al ser un proceso controlado por difusión, depende de la relación superficie-volumen de las partículas combustibles, por lo que la forma de las mismas influye fuertemente sobre este crecimiento, hallándose diferencias entre las mini placas que utilizaron UMo obtenido por el proceso de atomización (esféricas) de las obtenidas por otros métodos^[11,13].

Existen en la actualidad varios programas de desarrollo de combustible UMo abocados al análisis de esta aleación y posibles soluciones al problema. Son llevados a cabo en USA, Argentina, Francia, Canadá, Corea y Rusia y apuntan a resolver el problema de los productos de reacción Al-UMo y el hinchado inestable que produce.

En forma alternativa se sugiere la construcción de combustibles del tipo monolítico, mediante una lamina de aleación uranio molibdeno envainada en Zircaloy o acero. A

diferencia del material disperso un combustible monolítico es uniforme y altamente denso en uranio, por lo que el número de fisiones por centímetro cúbico aumenta considerablemente y con ello la temperatura de trabajo. Combustibles monolíticos en reactores de investigación producen condiciones de trabajo exigentes que en muchos casos requerirían modificaciones a la ingeniería del reactor, por ejemplo la presurización del agua para evitar que el refrigerante alcance el punto de ebullición.

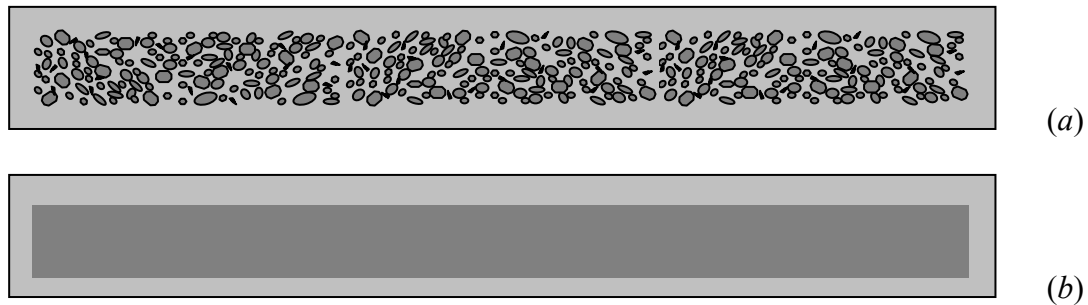
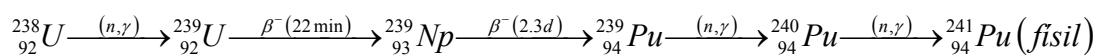


Figura I.8: Esquema de un combustibles (a) Placa disperso y (b) monolítico.

3. Comportamiento de los materiales bajo irradiación

UO_2

Además de las fisiones del U^{235} debido a los neutrones térmicos, ocurren dentro del material diversas reacciones de transmutación por captura neutrónica seguidas de decaimientos γ y β^- . Uno de estos procesos es el que da lugar, por captura de un neutrón rápido, a la formación a partir del U^{238} de $^{238}_{92}Pu$ que es también un isótopo físil (se denomina material físil a aquel que puede sufrir fisión a partir del impacto de un neutrón). Existen cuatro isótopos físiles ^{235}U , ^{239}Pu , ^{241}Pu y ^{243}Pu). La cadena de reacciones se lista a continuación:



La distribución del plutonio es mayor en la zona externa de la pastilla por la alta probabilidad de captura de neutrones epitérmicos por el ^{238}U y la mayoría de esas reacciones ocurren al ingresar al UO_2 . Más de 700 elementos transuránicos se producen por decaimientos β^- dentro de la pastilla como neptunio, americio, curio, berkelio, californio aunque la mayoría posee muy corta vida dentro del núcleo. Los más relevantes para la operación del reactor se listan en la tabla I.6.

De todos ellos, desde el punto de vista neutrónico, los que deben ser tenidos en cuenta en cualquier cálculo de reactividad son los que poseen mayor sección eficaz de captura neutrónica como el ^{135}Xe y el ^{149}Sm y se comportan como venenos naturales de la reacción.

El xenón y el kriptón son gaseosos e insolubles en el UO_2 , precipitan formando burbujas en el interior de un grano de óxido o en el borde de grano; estas burbujas contribuyen al hinchado de la pastilla (swelling) y degradan su conductividad térmica. Cuando se ha acumulado suficiente gas en borde de grano, las burbujas se interconectan y el gas en exceso, debido al fuerte gradiente térmico, migra hacia el gap y el plenum, disminuyendo la transferencia de calor de la interfase gaseosa, ya que la conductividad del xenón es veinte veces menor que la del helio, y deteriorando de este modo el intercambio de

calor a través del gap. El volumen de gases producido depende del enriquecimiento y aumenta con el quemado.

Tabla I.6: Productos de fisión generados durante la irradiación en un PWR^[19].

tipo	elemento	Productos de fisión generados por U ²³⁵ (% masa)	Productos de fisión generados por Pu ²³⁹ (% masa)
Gases raros	Xe	12,7	13,3
	Kr	1,1	0,6
Inclusiones metálicas	Ru	6,9	8,9
	Pd	3,6	7,3
	Rh	1,2	2,2
	Tc	2,3	2,4
	Ag	0,3	0,6
	Cd	0,2	0,5
	Sn	0,2	0,2
Metales	Mo	9,6	9,0
	Zr	10,4	7,4
Óxidos	Ba	4,4	4,2
	Sr	2,6	1,3
En solución en el combustible óxido	Y	1,4	0,7
	Ce	7,7	6,9
	Nd	11,1	9,8
	La	3,5	3,4
	Pr	3,2	3,0
	Pm	0,4	0,5
	Sm	2,0	2,4
	Eu	0,5	0,7
	Gd	0,2	0,3
Volátiles	Cs	11	11,4
	Rb	1,0	0,5
	Te	1,4	1,6
	I	0,6	0,8

Los productos de fisión sólidos o fragmentos de fisión, incluyen elementos metálicos u óxidos insolubles en la matriz de UO₂, y contribuyen al hinchado. El cesio y el yodo, que también son insolubles, migran hacia el gap e influyen en los mecanismos de corrosión de la vaina de Zircaloy.

El quemado de un combustible se mide en cantidad de isótopos fisiles fisionados. Se define como la energía total producida desde el comienzo de la irradiación por unidad de masa del combustible metálico. Para determinar el estado de quemado del combustible se utilizan diferentes métodos como dosimetría o espectrometría de rayos gamma. Ambos miden la cantidad de productos de fisión sólidos presentes en la pastilla.

Comportamiento térmico dentro del reactor: Cada fisión de U²³⁵ aporta un total de aproximadamente 200 Mev. Se requieren 10²⁰ fisiones/seg. para obtener una potencia térmica de 3.200 MW. Debido a la baja conductividad del UO₂, se produce un gradiente elevado de temperatura dentro del combustible que depende del flujo de neutrones al que está sometido el

combustible, es decir de la potencia a la que opera el reactor. Para un reactor PWR esa potencia (lineal) es del orden 160-420 W/cm generando una temperatura central de entre 900-1800 °C y una temperatura en el exterior de la pastilla de entre 500 y 620 °C. La temperatura media de la vaina es de aproximadamente 340 °C y la del refrigerante de 300 °C. El perfil de temperatura no es constante ya que durante la vida del combustible dentro del reactor, la potencia lineal varía.

Estas variaciones de temperatura inducen diferentes cambios geométricos en la pastilla a saber:

a) Expansión térmica y fisuración del cerámico por los grandes gradientes térmicos.

b) Densificación: es un fenómeno que se produce al inicio de la vida del reactor en donde la porosidad de fábrica del combustible se consume rápidamente. Esta busca contrarrestar el crecimiento por hinchado que sucede con el tiempo en el combustible.

c) Hinchado o Swelling: este fenómeno, resultado de la acumulación de productos sólidos y gaseosos de fisión, provoca cambios fundamentales y permanentes que afectan el comportamiento de la barra al reducir la distancia pastilla-vaina, además de reducir la conductividad del óxido. La cantidad generada de productos de fisión depende del quemado y aumenta con la temperatura. Experimentalmente se observa que el swelling gaseoso es mayor en la zona central de la pastilla.

d) Liberación de gases de fisión: parte de los gases producto de la fisiones (Xe-Kr) son liberados al espacio libre dentro de la barra. Como se explicó anteriormente, esos gases aumentan la presión interna de la barra y deterioran la conductividad térmica del gap. Es un fenómeno térmicamente activado y depende de la densidad de fisiones.

e) Cambios microestructurales: debido a las variaciones de temperatura que se producen dentro de la pastilla se observan diferencias de estructura cristalina en cada zona. En la zona central se observa acumulación de poros (que migran en sentido contrario al gradiente térmico) y crecimiento de granos columnares orientados en forma radial, mientras que en las zonas medias, se observa un crecimiento de grano equiaxial. En la zona exterior la estructura original permanece sin modificaciones

f) Creep: fenómeno de deformación lenta producto de la tensión continua sobre la pastilla.

g) Deformación plástica: a altas temperaturas (mayores a 1400 °C) se observa deformación plástica del UO₂.

Vaina

A lo largo del quemado la vaina es sometida a un conjunto de tensiones que generan deformaciones instantáneas y permanentes. Asimismo, el contacto con el refrigerante por su lado externo, y con la cambiante atmósfera interna producto de agentes liberados por el quemado desde el combustible como el cesio y el yodo, genera diferentes tipos de ataques corrosivos que pueden llevar a la falla y rotura del metal. Además de producirse el ingreso de hidrógeno, agente altamente fragilizante, proveniente de la humedad que contiene la pastilla de combustible desde su inicio de vida. En el exterior se produce el crecimiento de una capa de óxido, de baja conductividad térmica, que provoca un aumento en la temperatura exterior de la vaina y funciona también como una fuente de hidrógeno. (Una capa de óxido de aproximadamente ~80 micrones incrementa en 30 grados la temperatura de la vaina). Este

conjunto de fenómenos favorecidos por la distribución de tensiones sobre la barra provocan la denominada corrosión bajo tensiones (SSC Stress Corrosion Cracking) que puede llevar a la rotura de la vaina.

La hidruración del Zircaloy es un fenómeno ligado al de oxidación. El hidrógeno que ingresa en la vaina es soluble hasta 100 ppm a 340 °C, pero es prácticamente insoluble a temperatura ambiente (< 1ppm). Un enfriamiento de la vaina provoca la precipitación del hidrógeno en exceso formando hidruros, induciendo la fragilización del material. El control de este fenómeno es fundamental en el diseño y análisis histórico del comportamiento de la vaina. En forma genérica se puede calcular que la cantidad de hidrógeno contenida es proporcional al ancho de la capa de óxido (zirconia) sobre la misma.

El primer mecanismo de tensión-deformación de la vaina se produce por la dilatación térmica y las presiones externas e internas sobre la misma. La irradiación que experimenta el Zircaloy con el paso del tiempo modifica ese campo tensión-deformación al agregar otros factores como:

a) Creep: deformación progresiva y permanente bajo fuerzas constantes, que se suma a las instantáneas. Los aumentos de temperatura y la irradiación aceleran este fenómeno. Bajo irradiación el flujo neutrónico participa en la movilidad de los defectos e incrementa la velocidad de deformación. A bajas presiones (<100 MPa) la deformación por irradiación contribuye en un 80% a la deformación total por creep.

b) Crecimiento bajo irradiación: se observa experimentalmente que las vainas de Zircaloy sufren un crecimiento debido a la irradiación que se manifiesta en forma diferenciada debido a las asimetrías de las vainas. La cantidad de deformación aumenta con el quemado y el tiempo. Este fenómeno globalmente causa la reducción del espacio entre las barras y las boquillas superiores e inferiores del elemento, por lo que debe tenerse en cuenta en el diseño.

Interacción pastilla-vaina

Bajo condiciones normales de operación y durante la vida del combustible el gap entre la pastilla y la vaina se cierra. Debido a la evolución geométrica de la pastilla (hinchado, creep, reestructuración) y la vaina (creep, crecimiento por irradiación) ambos materiales llegan a tocarse, contacto que introduce tensión y deformaciones locales de consideración.

Esta situación de contacto combinada con el campo de tensiones además de la presencia de una atmósfera corrosiva, lleva a la formación de micro roturas sobre la pared de la vaina que son las primeras manifestaciones del SCC. Las zonas de mayor riesgo se producen cuando contacta un sector de la pastilla que presenta fisuras con la pared de la vaina, pues en dichas situaciones se generan tensiones de expansión y espacio para que la atmósfera corrosiva provoque un ataque severo (figura I.9).

Bajo esas condiciones, una rampa de potencia rápida que eleve la exigencia del material sin dar tiempo a relajar tensiones puede provocar la rotura de la vaina y la liberación de material físil al circuito primario. Es por eso que como medida precautoria se limita el incremento de potencia, sobre todo en las primeras rampas, hasta permitir la relajación de tensiones.

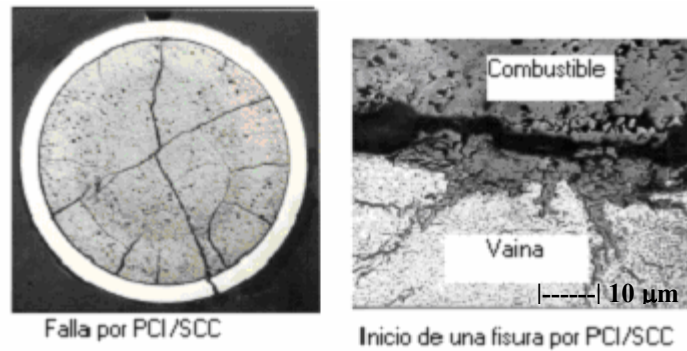


Figura I.9: Fisuración inducida por PCI y Corrosión bajo tensión^[29]

Por otro lado, sin llegar al extremo de producirse fractura, como consecuencia del contacto y debido a la deformación diferencial de la pastilla se genera una deformación en la vaina denominada “efecto bambú”. Bajo condiciones más extremas (alta potencia lineal ~ 450 W/cm) se producen deformaciones similares sobre la zona media de las pastillas (figura I.10).

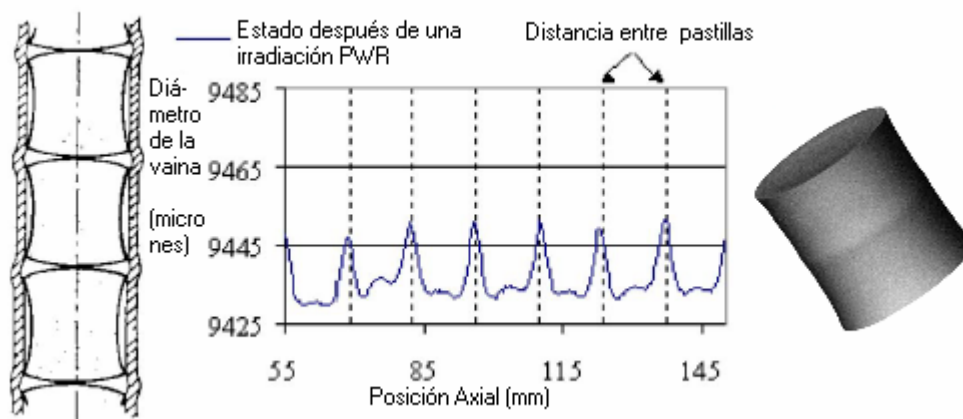


Figura I.10: “Efecto Bambú” sobre la vaina. En la pastilla se observa el fenómeno de deformación diferenciada en los extremos y en el centro^[30]

4. Discusión

La mayoría de los códigos desarrollados en el mundo poseen una amplia historia de trabajo. Se dedican a reactores LWR, PWR, PHWR y BWR por ser, como vimos, la gama de reactores mayoritaria. Simulan condiciones normales de irradiación, trabajan en una dimensión con simetría cilíndrica y axial o en dos dimensiones en simetría cilíndrica. Utilizan diferencias finitas o elementos finitos y condiciones casi-estacionarias en las rampas, dividiéndolas en escalones sobre los que suponen estacionariedad. Algunos de los códigos más conocidos son el TRANSURANUS^[24], de origen Alemán, (que posee dos versiones más en Francia: TRANSURANUS-Edf, METEOR-TRANSURANUS y una suiza TRANSURANUS-PSI), ENIGMA^[23] que posee una versión finlandesa y otra inglesa, ELESIM^[22], canadiense, PIN^[21] en dos versiones, una búlgara y otra checa, PROFES^[25], FAIR y FUDA^[26] son tres códigos indios, TRUST y EIMUS^[27] son japoneses, FRAPCON^[28] de origen chino y en Argentina, BACO^[20] desarrollado en la década del setenta.

Además de las razones generales mencionadas para construir, testear y mantener códigos computacionales de estas características, los requerimientos energéticos actuales

exigen la elevación del quemado del combustible para obtener más energía y disminuir los costos de su producción. Esta razón de peso ha impulsado el desarrollo de modelos nuevos para abarcar y predecir el comportamiento de los elementos combustible al extender su vida dentro del reactor en forma segura. En este mismo sentido diversas organizaciones como NRC (Nuclear Regulatory Comisión, USA) o la NEA, diseñaron escenarios experimentales controlados y medibles para probar códigos de quemado que permitan contrastar sus predicciones contra experimentos muy bien documentados y medidos.

Así, la OECD/NEA Nuclear Science Committee (NSC) ha compilado una base de datos pública International Fuel Performance Experiments Database (IFPED) con una serie de datos experimentales con el objeto de testear códigos. Por otro lado y en ese mismo sentido, se organizaron los experimentos FUMEX I y II (FUEL Modelling at EXtended Burnup) que tuvieron por objeto evaluar la calidad de las predicciones de los diversos códigos de simulación de comportamiento de elementos combustibles en condiciones de operación normal. Consistieron en el análisis de varios casos patrón irradiados en diferentes reactores que ceden sus instalaciones para el mismo. A partir de ellos se debe evaluar algunos aspectos del combustible como la temperatura central en diversas etapas de la historia de potencia, la presión interna y la fracción de gas liberado para diferentes quemados preestablecidos. Los resultados de los cálculos se compararon entre sí y con los datos experimentales, hasta entonces desconocidos por los participantes. En estos momentos se encuentra en etapa de organización el FUMEX III^[32,33]. Cabe destacar que tanto la preparación de estos experimentos como el análisis de los datos lleva años de trabajo.

De este modo, un código computacional aplicado a simular el comportamiento del combustible bajo irradiación, tanto para el caso de reactores de potencia como experimentales, posee el sustento internacional adecuado para testear sus predicciones y modelos, así como el marco institucional que le otorga posibilidades de desarrollo y futuras mejoras.

Bibliografía

[1] <http://www.invap.net/index.php>

[2] Física de reactores. Curso I: Cinética. Maestría en reactores nucleares. 2003. Angel Gómez. Unidad de Actividad Reactores y Centrales Nucleares

[3] Física de reactores. Curso I: Estática. Maestría en reactores nucleares. 2003. Carla Notari. Unidad de Actividad Reactores y Centrales Nucleares.

[4] Termohidráulica de Reactores Nucleares. Curso II: Hidráulica. Maestría en reactores nucleares. 2003. David Parkansky. Unidad de Actividad Reactores y Centrales Nucleares.

[5] Centrales Nucleares. Bases y aspectos generales de los reactores y centrales nucleares. Maestría en reactores nucleares. Roberto M. Corcuera. 2004 Unidad de Actividad Reactores y Centrales Nucleares.

[6] <http://www.iaea.org/cgi-bin/db.page.pl/pris.charts.htm>

[7] ATUCHA I NPP Natural Circulation in Water-Cooled Nuclear Power Plants, O. Mazzantini, J. C. Ferreri, F. D'Auria 2004, Trieste, Italy

[8] Centrales nucleares. CAREM: UN REACTOR AVANZADO ARGENTINO Ing. Lucía Beatriz Ramilo. UARCN – CAC – CNEA

- [9] J. E. Matos, J. L. Snelgrove, Properties of fuel meat materials, Appendix I-1, IAEA TECDOC 643, Research reactor core conversion guidebook, April 1992
- [10] M. K. Meyer, G. L. Hofman, Properties of U-Mo Alloy dispersion fuel, IAEA Technical Committee on the Development of High Density U-Mo Dispersion fuels., 2003, Vienna
- [11] S. L. Hayes, M. K. Meyer, G. L. Hofman, R.S. Strain. Postirradiation examination of high-density uranium alloy dispersion fuels.
- [12] N. Arkhanhelsky, Russian Program of Irradiation test and post-Irradiation Experiments of full-scale fuel assemblies on the base of U-Mo fuel, IM on RERTR, 2004, Vienna
- [13] T. H. Newton, M. S. Kazimi, E.E. Pilat, Z. Xu, Preliminary investigation of the use of monolithic U-Mo fuel in the MTR reactor, IM on RERTR, Oct 2003, Chicago
- [14] G. L. Hofman, S. L. Snelgrove, Materials Science and Technology, Chapter 2, Dispersion fuels. J. of Nuclear Materials, Vol 10, part 1. B.R.T. Frost, VCH
- [15] M. Ugajin, A. Itoh, M. Akabori, N. Ooka, Y. Nakakura, Irradiation behavior of high uranium-density alloys in plate fuels, J. of Nuclear Materials, 254 (1998), p. 78-83.
- [16] Development status of metallic, dispersion and non-oxide advanced and alternative fuels for power and research reactor, IAEA TECDOC 1374, chapter 6, Sept 2003
- [17] K. Kim, J. Park, Ch. Kim, G. L. Hofman, M. K. Meyer, Irradiation behavior of atomized U-10w% Mo alloys aluminium matrix dispersion fuel meat at low temperature. Nucl. Eng. and Des. 211 (2002), p. 229-235
- [18] G. L. Hofman, Crystal structure stability and fission gas swelling in intermetallic uranium compounds, J. of Nuclear Materials, 140 (1986), p. 256-263
- [19] H. Bailly, D. Menessier, C. Prunier. The nuclear fuel of pressurized water reactors and fast reactors. Design and behaviour. Diffusion Editions Tec&doc, (1999).
- [20] S. Harriague, G. Coroli, E. Sabino. BACO (BARra COmbustible), A computer code for simulating a reactor fuel rod performance, Nuc. Eng & Design. 56 (1980) 91-103
- [21] V. Strijov, Research of VVER-440 type fuel rods in MR-reactor. IAEA ISIWRFTU, Stockholm, Sweden, 15-18 sep (1986).
- [22] M.J.F. Notley, ELESIM: A computer code for predicting the performance of Nuclear Fuel Element, Nucl. Appl., 44,445 (1979).
- [23] W.J. Kilgour, Capabilities and Validation of the ENIGMA fuel performance code. International Topical Meeting on LWR fuel performance. Avignon France, April (1991).
- [24] K. Lassmann and H. Blank. Modeling of fuel rod behaviour and recent advances in the TRANSURANUS code. Nucl. Eng. Des, 106 (1988) p291.
- [25] N. Sach and D. Venkatesh. A Brief Description of PROFESS and Its Submodels, IAEA Meeting on Water Reactor Fuel Element Performance Computer Modeling, IWGFPT/19, Viena, (1984).
- [26] P.N. Prasad, K. Shyam Prasad, M. Das. Computer code for fuel design analysis FUDA-Mod O, NPC Internal report, (1991).
- [27] M. Kinoshita. Development of LWR fuel performance analysis codes, J. Nucl. Sci. and Tech. Vol 30, 1, pp1-17, January (1993).
- [28] G.A Berna. FRAPCON-2: A computer code for the calculation of steady state thermal-mechanical behavior of oxide fuel rods, NUREG/CR-1845, janaury (1980).
- [29] S. Banerjee. Better Materials for Nuclear Energy. IAEA Scientific Forum (2005).

- [30] A. C. Marino, ¿Qué hay de nuevo en el viejo BaCo?. Reunión de Otoño de 2006 del Programa de Ciclo de Combustible, Buenos Aires, Abril (2006), CNEA.
- [31] S. Glasstone, A. Sesonske. Nuclear reactor engineering. D. Van Nostrand Company, Princeton, New Jersey, (1963).
- [32] Water reactor fuel element modelling at high burnup and its experimental support. IAEA-TECDOC-957. Proceeding of a technical comite meeting held in Windermere, United Kingdon, 19-23 septembre 1994. IAEA. VIENA (1997).
- [33] Fuel modelling at extended burnup. IAEA tecdoc-998. Viena, (1998).

II. DESCRIPCIÓN GENERAL DE LOS MODELOS

1. Introducción

DIONISIO es un código construido para la simulación del comportamiento termomecánico y termoquímico de una barra combustible bajo irradiación, en un reactor de potencia en condiciones normales de funcionamiento. Los materiales involucrados en el cálculo son: el combustible (UO_2 o combustible mixto $(\text{U,Pu})_2$) y la vaina de Zircaloy. Los modelos y condiciones utilizados en el código se adecuan a reactores LWR y PHWR suponiendo una historia de potencia de exigencia normal (sin condiciones de accidente). El código trabaja sobre un dominio que representa a una pastilla, el gap y la vaina y posee simetrías de revolución sobre el eje z , y axial sobre un plano que corta en dos la pastilla.

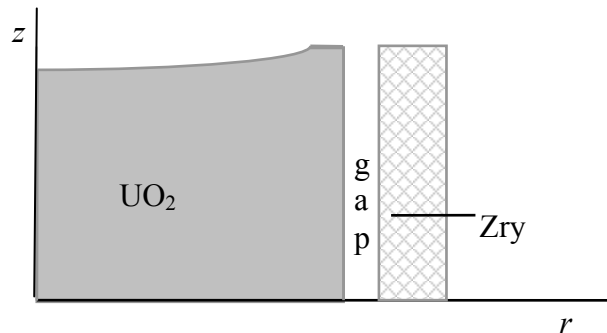
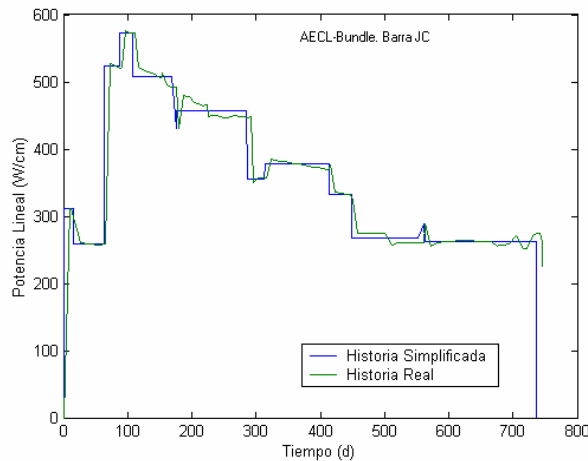


Figura II.1 Representación esquemática de media pastilla según un corte longitudinal.

En todos los cálculos se utiliza la técnica de elementos finitos para resolver las ecuaciones diferenciales involucradas tanto para la distribución de temperatura como para el problema mecánico. El código posee un generador de mallas embebido que discretiza el dominio a partir de los datos de entrada, utilizando elementos de la familia de Lagrange, de primer orden (4 nodos, polinomios lineales). Para el problema de gases (radial con simetría esférica) se resuelve un sistema unidimensional con elementos finitos lineales. Para el problema de fractomecánica de la vaina se utilizan elementos cuadráticos de la familia serendípica, de ocho nodos con polinomios cuadráticos. En una instancia previa la malla de elementos finitos puede ser visualizada antes de correr el programa.

La entrada de DIONISIO contiene además de parámetros relativos al reactor y condiciones de operación, la historia de potencia a la que será sometida la barra. Para ingresar la misma es posible elegir entre pasos de potencia lineal, potencia volumétrica o flujo de neutrones por cm^2 y por seg. Esta elección viene dada por la forma en que las historias de irradiación son provistas por los experimentos, si bien la forma más común de entrega es la de potencia lineal. Por otro lado, la historia cruda debe ser sometida primero a una simplificación y alisado, para convertirla en una sucesión acotada de pasos casi estacionarios y de ese modo obtener tiempos de cálculo aceptables. Para ello se ha diseñado una herramienta computacional denominada CAMBIOHP, que recibe la historia cruda y la convierte en el tipo de ingreso que DIONISIO puede leer (figura II.2).

Figura II.2:
Historia de potencia real y simplificada



Una vez construida la malla de elementos finitos sobre la que se resolverá la historia de potencia simplificada y el pre-procesamiento de los datos, da comienzo el ciclo de cálculo del programa. El bucle principal recorre los pasos de potencia cuasi estacionarios en los que se divide la historia, los cuales pueden ser de tres clases: *rampas*, con incremento o decremento de potencia entre ese paso y el siguiente, *estacionario*, un paso de tiempo a potencia constante, y *recálculo*, un estado dentro del ciclo estacionario en donde se recalculan las condiciones de contorno del problema de acuerdo a las variaciones de estado que se producen en el ciclo estacionario. En cada instancia de cálculo las magnitudes involucradas resultan termo-dependientes por lo que cada fenómeno presenta no linealidades que requieren resoluciones mediante iteraciones numéricas hasta alcanzar un estado final que no difiera del anterior significativamente.

Convergencia y estabilidad del código

Más allá de los resultados obtenidos y la respuesta de modelos particulares, es necesario destacar que el logro mayor de un código de esta naturaleza, es conseguir que todos los modelos que interaccionan entre si, lo hagan armónicamente.

Por sobre esta premisa, el programa se basa en la tecnología de elementos finitos, que, dada la naturaleza del mismo, reduce las ecuaciones diferenciales involucradas a la resolución de un sistema de ecuaciones algebraico, cuya dimension depedende del número de elmentos involucrados en la discretización. Debido a la amplitud y versatilidad del método, el mismo se aplica a problemas tan variados como la resolución del problema térmico, elastoplástico, difusión de materia y evolución de una fisura, además de resolver dominios uni-dimensionales como en el caso de la difusión de gas en el grano o bi-dimensionales, para el resto de los cálculos. También se aplica a diferentes geometrías como la esférica (para los granos de UO_2), axisimétrica (ecuaciones termomecánicas) o en deformación plana (problema de fractura). El método converge a la solución analítica con un aumento del número de elementos con los que se discretiza el dominio, pero que no deja de ser un método de cálculo y obviamente no es exacto. Como ejemplo de este hecho se ha resuelto la ecuación del calor para un rectángulo de 1.0 por 1.5 discretizado con un número creciente de elementos. Presentamos en la siguiente tabla los resultados con cada discretización comparados con la solución analítica en los cuatro extremos del dominio.

X	Y	NE = 8	NE=16	NE=32	NE=64	NE=128	NE=256	Sol. Analítica
0.0	0.0	6.432E-1	6.155E-1	6.295E-1	6.225E-1	6.260E-1	6.242E-1	6.248E-1
1.5	0.0	4.548E-1	4.352E-1	4.451E-1	4.401E-1	4.426E-1	4.414E-1	4.418E-1
0.0	1.0	7.269E-1	7.051E-1	7.162E-1	7.106E-1	7.134E-1	7.120E-1	7.125E-1
1.5	1.0	5.140E-1	4.985E-1	5.064E-1	5.025E-1	5.044E-1	5.034E-1	5.038E-1

Los errores de aproximación introducidos en las soluciones de elementos finitos de ecuaciones diferenciales provienen de tres fuentes básicas:

- 1) Aproximaciones del dominio: Se producen cuando aproximamos un dominio curvo con, por ejemplo, el lado recto de un elemento.
- 2) Errores de cuadratura: se producen al evaluar integrales en forma aproximada, o los que provienen del redondeo numérico en toda computadora.
- 3) Los que provienen y son inherentes al método, de la aproximación del continuo por elementos discretizados. Toda función u es reemplazada por un valor numérico u_h que resulta de asociar los valores nodales y las funciones de interpolación del elemento,

$$u \approx u_h = \sum_{n=1}^{Nodos} \phi_n N_n \quad \text{donde } \phi_n \text{ denotaba el valor de la función } u \text{ en el nodo } n \text{ y } N \text{ es la}$$

función de interpolación asociada al nodo.

Existen diversas formas de evaluar el error cometido con la discretización de un problema determinado. Todas involucran el cálculo de una norma que será función de la diferencia entre el valor real del campo a resolver y la aproximación numérica sobre cada nodo.

$$\|u - u_h\| \leq ch^p$$

donde c es una constante independiente de u y u_h , h es la longitud característica del elemento y p es una constante llamada velocidad de convergencia, que será función del grado de los polinomios de interpolación utilizados. Nótese que el error puede ser disminuido de dos maneras alternativas. Por un lado, se puede aumentar el grado de los polinomios interpolantes de cada elemento. Ello conlleva una complicación del cálculo de las integrales involucradas en cada elemento así también como en el armado de la matriz rigidez. Por otro lado, se puede disminuir el tamaño de los elementos, lo que disminuiría h . Este parece ser el medio más sencillo pero involucra mayor tamaño de la matriz de rigidez y un aumento considerable de la capacidad computacional requerida. De acuerdo a la complejidad del problema particular, se tomará uno u otro camino para reducir el error inherente al método. Resulta interesante analizar que un aumento de los elementos a utilizar puede disminuir el error de dominio y el de cuadratura. Por otro lado, grados de funciones de interpolación mayores seguramente traerán un aumento del error de cuadratura debido a que las integrales involucradas serán más y de mayor complejidad.

El tiempo utilizado para recorrer una historia de potencia promedio en DIONISIO es de aproximadamente 20 minutos, utilizando un procesador Pentium III de 700 MHz de frecuencia. Ese tiempo es consumido en su mayor parte por la resolución del sistema de ecuaciones algebraicas asociado.

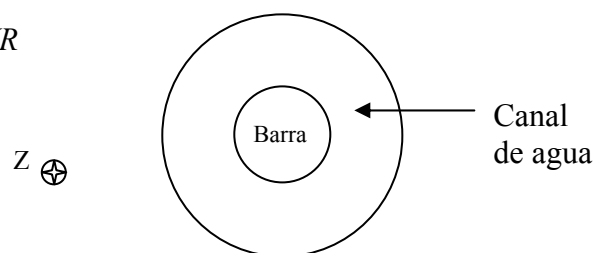
Un aumento de la cantidad de elementos, si bien mejoraría los resultados aparentemente, incrementaría cuadráticamente el tiempo de resolución del sistema. En este punto quisiera hacer una aclaración. Utilizo el condicional al hablar del mejoramiento de los resultados porque resulta difícil explicar qué es lo que se mejoraría en realidad. Los resultados se obtienen en un sistema tan complejo como este, después de cierta cantidad de aproximaciones y suposiciones, algunas veces compensatorias unas con otras, de modo que resulta ridículo hablar de “mejorarlos”. Estamos en presencia de un código que obligatoriamente proporciona resultados cualitativos y eso es lo que se espera obtener de él.

Como ya dijimos, resolver un sistema de ecuaciones reviste ciertas dificultades de orden computacional en donde la variable a minimizar es el tiempo de cómputo. En todos los casos se resolvieron las ecuaciones mediante métodos de almacenamiento ralo (sparse), que requieren de una redistribución nodal particular basada en la construcción de vectores que contienen sólo los elementos no nulos y las posiciones respectivamente, de cada elemento de una dada matriz. El costo computacional de trabajar con dichas matrices va como $O(N^{1.4})$ aproximadamente. Sin embargo esto es válido para matrices que poseen elementos no nulos en la diagonal. Cuando se produce contacto entre dos materiales, el método de los multiplicadores de Lagrange genera elementos nulos y rompe además con la simetría. En ese caso el sistema se resuelve mediante el método de los gradientes conjugados para matrices no simétricas.

2. Comportamiento térmico

La primera consideración que debe tomarse al comenzar a analizar la distribución térmica dentro de una barra combustible es su posición dentro del reactor. Como vimos en el capítulo I, los elementos combustibles se introducen en canales dentro del núcleo por los que circula el agua del refrigerante que extrae por convección el calor generado dentro de la barra.

Figura II.3: Canal básico para PWR



Para el estudio termohidráulico sobre cada barra combustible en el canal asociado se define un canal básico cuya geometría dependerá de la posición de dichas barras pero que en general puede simplificarse como en la figura II.3. Sobre dicho canal el balance de energía dada por el intercambio de calor toma la siguiente forma^[34]:

$$P_l(z)dz = Q_m C_p (T_R(z + dz) - T_R(z))$$

donde P_1 es la potencia lineal en $W m^{-1}$, Q_m es el flujo másico de refrigerante en $Kg seg^{-1}$, C_p es el calor específico (a T y P constantes) y T_R representa la temperatura del refrigerante en función de la altura z, para la cual puede calcularse:

$$T_R(z) - T_0 = \frac{1}{Q_m C_p} \int_{-L/2}^z P_1(z) dz$$

Se toma el comienzo de la columna en el punto $z=-L/2$, donde L es la longitud de la barra, con $z=0$ como el centro en el eje longitudinal de la columna. En el caso de PWR el comportamiento del flujo $P_1(z)$ puede seguir una ley del tipo cosenoidal con la altura z del tipo

$P_1(z) = P_M \cos\left(\frac{\pi z}{L_e}\right)$. De ese modo, a primera aproximación la distribución de

temperaturas en el canal será:

$$T_R(z) = T_0 + \frac{L_e P_M}{\pi Q_m C_p} \sin\left(\frac{\pi L}{2L_e}\right) \left(1 + \frac{\sin\left(\frac{\pi z}{L_e}\right)}{\sin\left(\frac{\pi L}{2L_e}\right)} \right)$$

donde L_e representa a la distancia extrapolada de la curva del coseno. Esta distancia señala el corte en el flujo fuera de la longitud L de la barra. Una distancia extrapolada muy grande redundará en un flujo prácticamente plano dentro de la columna^[32].

Temperatura externa de la barra

La temperatura externa de la barra es igual a la del refrigerante incrementada por el salto térmico sobre la superficie de la vaina:

$$T_V = T_R(z) + \frac{P_1(z)}{\pi Dh}$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor ($W m^{-2} K^{-1}$) y D el diámetro externo. Utilizando una ley similar a la anterior para la distribución de la potencia lineal se obtiene:

$$T_V(z) = T_0 + \frac{L_e P_M}{\pi Q_m C_p} \sin\left(\frac{\pi L}{2L_e}\right) \left(1 + \frac{\cos\left(\frac{\pi z}{L_e} - \beta\right)}{\sin\left(\frac{\pi L}{2L_e}\right) \sin \beta} \right)$$

$$\tan \beta = \frac{L_e Dh}{Q_m C_p}$$

h dependerá del tipo de flujo (laminar o turbulento) y del tipo de refrigerante (agua, vapor, etc).

Oxidación del Zircaloy

Si bien el crecimiento de una capa de óxido considerable (mayor a 50-60 micrones) sólo se observa en condiciones de accidente^[7,37] (temperaturas mayores a 1.000 K, evaporación de agua sobre la superficie de la vaina, tipo de flujo del refrigerante, entre otros)

es posible constatar el crecimiento de una capa de óxido de zirconio ZrO_2 sobre la vaina también en condiciones normales de funcionamiento del reactor, la cual actúa como aislante de la vaina al contacto con el refrigerante, pues posee menor conductividad térmica, dificultando la trasmisión del calor y aumentando la temperatura del sistema. Por otro lado es una fuente no deseada de hidrógeno para la vaina, factor que afecta las propiedades mecánicas del material. El incremento térmico varía con el tiempo de irradiación ya que depende del espesor de la capa y sigue una ley^[42]

$$T_M(z) = T_V(z) + \frac{P_I(z)\Delta_{Ox}}{\pi D k_{Ox}}$$

donde T_M es la temperatura exterior del metal de la vaina, Δ_{Ox} es el espesor cambiante de la capa de óxido y k_{Ox} su conductividad térmica^[32,33]. La figura II.4 presenta una gráfica de la distribución axial de temperaturas a lo largo de un canal de 300 cm de longitud para el refrigerante, la capa de óxido, la superficie de la vaina y el centro de la pastilla en donde se observa la dependencia funcional de dichas temperaturas con la velocidad del refrigerante (en dirección positiva del eje z) y con la potencia lineal que varía cosenoidalmente en función de z .

Distribución de temperatura en el dominio

Las ecuaciones que describen la generación y transferencia del calor en un sistema pastilla-gap-vaina son:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\kappa_r^h(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_z^h(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) = -Q^h(r)$$

donde κ^h es la conductividad térmica para $h =$ pastilla, gap o vaina (el subíndice indica la posibilidad de anisotropía de la conductividad) siendo el valor para el término independiente Q en $W m^{-3}$

$$Q^h = \begin{cases} Q^{UO_2} & \text{potencia generada por la pastilla} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Se emplearon para las conductividades térmicas κ^h las ecuaciones empíricas^[1,2,26]:

$$\kappa^{Pastilla}(T) = \frac{1}{0.034944 + 2.2430 \times 10^{-4} T} + \frac{6.157 \times 10^9}{T^2} \exp \left[-\frac{1.41 \times 1.6 \times 10^{-19}}{kT} \right]$$

$$\kappa^{Vaina}(T) = 7.51 + 2.09 \times 10^{-2} T - 1.45 \times 10^{-5} T^2 + 7.67 \times 10^{-9} T^3$$

$$\kappa^{Gap}(T) = \text{“Modelo de mezcla de gases”}$$

con T en K y κ en $W m^{-1} K^{-1}$.

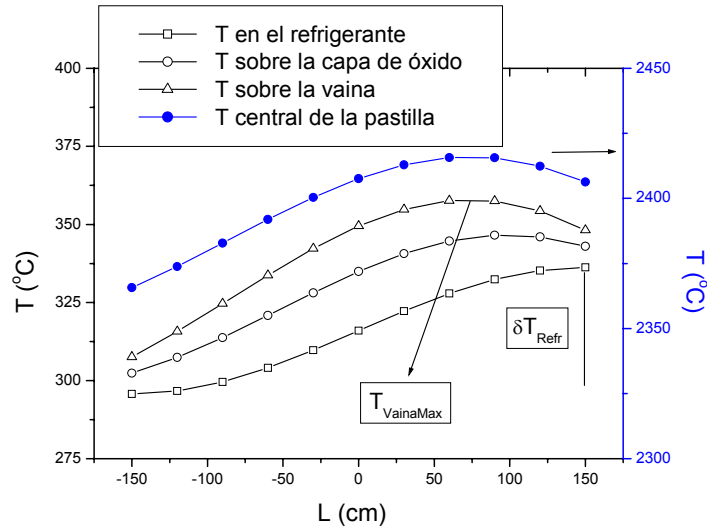


Figura II.4: Distribución de temperatura en el canal, sobre la capa de óxido, sobre la vaina y en el centro de las pastillas.

Al variar Q_{UO_2} , se producen las variaciones en la temperatura en cada elemento finito que se utilizarán en los cálculos subsiguientes del código. La figura II.5 presenta para una dada posición z , la distribución radial de temperaturas sobre un dominio pastilla-gap-vaina-refrigerante.

Las condiciones de contorno utilizadas en el sistema serán: en la dirección z , de Neumann nulas, mientras que en la dirección radial:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial r}\right)_{R=0} = 0$$

$$h_{F-V}(T(R_{EF}) - T(R_{IV})) = \frac{P_L}{2\pi R_{EF}}$$

$$\left(\kappa_V(T) \frac{\partial T}{\partial r}\right) = -\frac{P_L}{2\pi R_{IV}}$$

$$T(R_{EV}) = T_M$$

donde P_L es la potencia lineal generada, R_{EF} , R_{IV} y R_{EV} son los radios exterior del combustible e interior y exterior de la vaina y h_{F-V} es la conductancia entre la superficies del combustible y la vaina. T_M es la temperatura del metal de la barra que se elige constante para la porción de resolución. La conductancia total del gap corresponde a la suma de tres términos $h_{tot} = h_s + h_{rad} + h_{gasmix}$ uno de contacto (diferente de cero si el gap está parcial o totalmente cerrado), un término de radiación y uno de conductividad gaseoso que dependerá de la composición de la atmósfera. (El problema de la conductancia del gap se analiza en detalle en el capítulo siguiente).

DIONISIO permite seleccionar pastillas que contienen un agujero en el centro. De este modo, sobre el espacio central se resuelve la misma ecuación que sobre el combustible y la vaina con un coeficiente de conductividad dado por la mezcla de gases y con generación de calor nula.

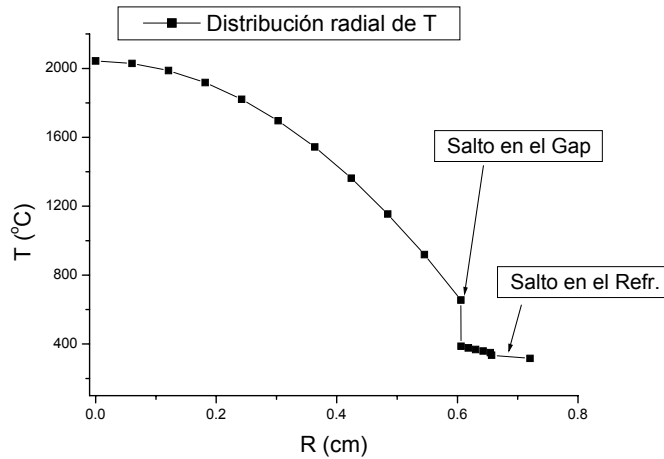


Figura II.5 Distribución radial de la temperatura

3. Comportamiento mecánico.

Caso Elastoplasticidad

El tratamiento de las deformaciones y tensiones en DIONISIO corresponde a la llamada condición cinemática de pequeños desplazamientos y pequeñas deformaciones en donde se suponen desplazamientos y rotaciones infinitesimales y se considera que la no linealidad ingresa en la condición del material. Si el material se encuentra dentro de la zona elástica, la respuesta es idéntica a la de un material lineal elástico^[44,45].

Con la relación entre las tensiones y los desplazamientos sobre el dominio, suponiendo pequeñas deformaciones, se aplica el principio de desplazamientos virtuales (o trabajos virtuales) para obtener las ecuaciones de equilibrio basadas en que para cualquier desplazamiento virtual impuesto al dominio en el equilibrio, el trabajo interno virtual debe igualarse al externo. La ecuación simplificada toma la forma:

$$\int_{\Omega} \bar{e}^T \bar{\sigma} d\Omega = \int_{\Omega} f_{\Omega}^{Ext} \bar{u} d\Omega + \int_{\Gamma} f_{\Gamma}^{Ext} \bar{u} d\Gamma + R$$

donde el primer miembro representa al trabajo interno y el segundo se divide entre fuerzas exteriores de volumen, fuerzas exteriores de superficies y residuos. Es a través del primer término en donde ingresa el cálculo de tensiones internas sobre el dominio, a las que contribuyen cada una de las deformaciones que actuarán sobre la vaina y la pastilla durante la historia de potencia. Además de las deformaciones elastoplásticas, los materiales sufren dilataciones y contracciones térmicas debido a las altas variaciones de temperatura, así como creep, hinchado en el caso del combustible y crecimiento por irradiación para la vaina.

En un sistema en coordenadas bidimensionales la distribución de tensiones σ_{ij} sobre un elemento de volumen en el que se supone simetría cilíndrica toma la forma^[1,23]

$$\{\sigma\}^T = \{\sigma_{rr} \ \sigma_{\theta\theta} \ \sigma_{zz} \ \sigma_{rz}\}$$

mientras que el término de deformaciones es

$$\{e\}^T = \{e_{rr} \ e_{\theta\theta} \ e_{zz} \ e_{rz}\}$$

La tensión se relaciona con la deformación mediante la ley de Hooke que toma la forma matricial para un material elastoplástico $d\sigma_{ij} = C_{ijkl}^E (de_{kl}^E)$ siendo C_{ijkl}^E las componentes

del tensor elástico. Por otro lado $de_{ij} = de_{kl}^E + de_{kl}^P$ es el tensor de deformaciones totales, suma de las deformaciones elásticas y plásticas.

Por otro lado, de la teoría de elasticidad sabemos que el vector deformación total del sistema se relaciona con las funciones de desplazamiento u y w según las direcciones r y z respectivamente a través del siguiente conjunto de ecuaciones ^[23,45] (debido a la simetría cilíndrica del sistema no se producen desplazamientos en la dirección tangencial por lo que u y w no dependen de θ):

$$\begin{aligned} e_{rr} &= \frac{\partial u}{\partial r} & e_{\theta\theta} &= \frac{u}{r} \\ e_{zz} &= \frac{\partial w}{\partial z} & e_{rz} &= \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r} & e_{r\theta} &= e_{\theta z} = 0 \end{aligned}$$

Puesto que las incógnitas del problema son justamente las funciones desplazamiento $u(r, z)$ y $w(r, z)$ estas ecuaciones pasan a ser relevantes y serán la forma de vincular los resultados con las variables tensión y deformación del sistema ^[19, 21].

Para caracterizar una deformación elástica, sólo se necesita conocer las componentes del tensor C_{ijkl}^E , dependiente de las constantes del material a considerar (módulo de Young, módulo de Poisson). En el caso del comportamiento plástico se deben utilizar tres propiedades que caractericen al material ^[44]:

a) Una función que nos da las condiciones de fluencia especificadas por el estado multiaxial de tensiones correspondiente al inicio del flujo plástico. La función de fluencia tiene la forma funcional $f_Y(\sigma_{ij}, e_{ij}^P, T, P, etc)$ y si es menor que cero, el material responde elásticamente. Si es mayor que cero, no es admisible y el material debe restituirse hacia la superficie de fluencia $\sigma_Y=0$.

b) Una regla de flujo que relaciona el incremento de deformación plástica con las tensiones y el incremento de tensión. Durante un incremento plástico, la función de fluencia en la regla de flujo predice el incremento plástico en la deformación $de_{ij}^P = d\lambda \frac{\partial f_Y}{\partial \sigma_{ij}}$ donde $d\lambda$ será un escalar a determinar.

c) Una regla de endurecimiento que especifica cómo la función de fluencia se modifica durante el flujo plástico.

Para la vaina metálica de la barra combustible es posible considerar una ley de plasticidad de Von Mises con endurecimiento isotrópico⁴ sobre la cual se aplica un algoritmo de los denominados de retorno radial.

Para el combustible, un cerámico, es posible utilizar leyes distintas como la ley de Drucker-Prager^[44]. Sin embargo, suponer que el combustible no presenta comportamientos plásticos es posible ya que a las temperaturas normales de funcionamiento de un reactor la superficie de fluencia es elevada ^[7,16].

⁴ El Zircaloy presenta de hecho anisotropía por la forma en que toman los granos en la laminación, anisotropía que afecta a la regla de flujo del material más influencias de segundo orden que no están incluidos en el código.

En un material de Von Mises la deformación volumétrica es cero, y las condiciones de tensión-deformación se expresan separando en contribuciones para la tensión media o

hidrostática $\sigma_m = \frac{\sum_i \sigma_{ii}}{3}$ y desviadoras $S_{ij} = \sigma_{ij} - \delta_{ij} \sigma_m$. La relación tensión deformación tomarán la forma:

$$S_{ij} = \frac{E}{1+\nu} (e^d - e^p)_{ij}$$

$$\sigma_m = \frac{E}{1-2\nu} (e_m)$$

Donde las deformaciones corresponden a las volumétricas $e_m = \frac{\sum_i e_{ii}}{3}$ y a las desviadoras $e_{ij} = e_{ij} - \delta_{ij} e_m$ análogamente al caso de las tensiones

Caso general

Para el caso general donde deben tenerse en cuenta a todas las contribuciones debidas a los diferentes mecanismos de deformación las expresiones anteriores se modifican. En las expresiones para S aparecen las deformaciones plásticas, las de creep y las de crecimiento por irradiación, por afectar a las direcciones anisotrópicamente, mientras que los términos de deformación térmica y de hinchado, por afectar volumétricamente al sistema, aparecen en la expresión para la tensión media. Entonces teniendo en cuenta todas las contribuciones al problema

$$S_{ij} = \frac{E}{1+\nu} (e^d - e^p - e^c - e^l)_{ij}$$

$$\sigma_m = \frac{E}{1-2\nu} (e_m - e^T - e^{Sw})$$

A partir de aquí el algoritmo se aplica como en Bathe et al^[20,44] suponiendo que en un dado instante se conoce el estado de tensiones del material, la cantidad de deformación de cada tipo acumulada y la deformación total del instante siguiente. De ese modo se tiene

$${}^{t+dt} S = \frac{E}{1+\nu} ({}^{t+dt} e'' - \Delta e^p - \Delta e^c - \Delta e^l)$$

$${}^{t+dt} e'' = {}^{t+dt} e^d - {}^t e^p - {}^t e^c - {}^t e^l$$

en donde se conoce la deformación total en el instante t+dt y la deformación acumulada en el instante t para la componente plástica, de creep y de crecimiento por irradiación. El problema ahora se reduce a determinar en base a la relación constitutiva del material, la tensión en el instante t+dt y los incrementos de deformación de cada tipo, sujeto el sistema a la condición de fluencia, la regla de flujo y la ley de endurecimiento^[31, 44,45].

Para la plasticidad de Von Mises, la condición de fluencia en el instante t+dt se calcula como

$$f_Y = \frac{1}{2} S \cdot S - \frac{1}{3} (\sigma_Y)^2 = 0$$

donde σ_Y es la tensión de fluencia del material que depende del tipo de endurecimiento.

Por último las contribuciones a la deformación total de cada tipo seguirán una ley de integración en el paso $t \rightarrow t+dt$ particular que se tratarán a continuación por separado.

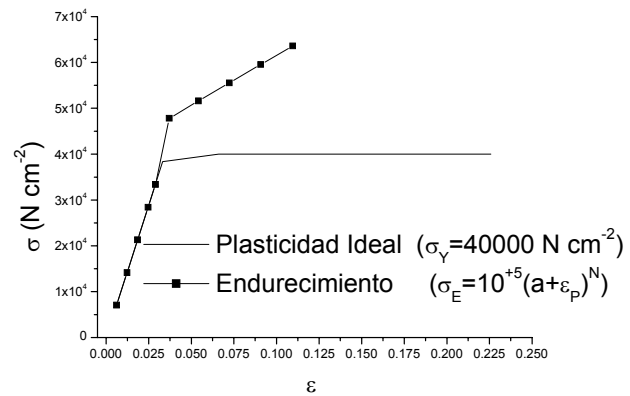
La estructura modular de DIONISIO permite seleccionar diferentes tipos de leyes para cada tipo de deformación así como determinar la presencia o no de un tipo de deformación en un dado problema.

4. Plasticidad del Zircaloy

La ley de plasticidad de la vaina corresponde a la de un material con endurecimiento isotrópico. Un material plásticamente ideal, al alcanzar la superficie de fluencia dada por la tensión de fluencia σ_Y , restituye la posición de tensión deformación a ese valor y la ley de deformación sigue una forma como la que se muestra en la figura II.6. Dicha tensión toma a su vez un valor dependiente de la temperatura y en el caso de material irradiado y con adquisición de hidrógeno (fragilizante) también dependerá de la fluencia y la cantidad de hidrógeno presente disuelto en la matriz^[41]. Por otro lado, un material que presente endurecimiento poseerá una curva de tensión deformación variable con la tensión aun después de transponer la superficie de fluencia (figura II.6). En este caso la ley de endurecimiento también depende de los parámetros mencionados y sigue una forma

$$E_T = K(\phi, H) \left(\frac{E_Y}{K(\phi, H)} + \varepsilon_P \right)^{N(\phi, H)}$$

Figura II.6: Ley de plasticidad ideal y con endurecimiento



donde E_Y es el módulo de Young, ε_P la deformación plástica equivalente, K y N dependen de la cantidad de hidrógeno disuelto en el Zircaloy y de la irradiación recibida. Se presenta a continuación una expresión completa para K y N ^[7,25,37]:

$$K = K(T) + K(\phi) + K(H)$$

$$K(T) = 1.1762 \times 10^5 + T(45.4859 + T(-0.328 + T1.72752))$$

$$K(\phi) = 5.54 \times 10^{-18} \phi$$

$$K(H) = H(1.288 \times 10^2 + H(0.754 - H17.84)) \quad H \leq 400 \text{ ppm}$$

$$N = N(T)N(\phi)N(H)$$

$$N(T) = 0.0949 + T(1.165 \times 10^{-3} + T(-1.992 \times 10^{-6} + T9.588 \times 10^{-10}))$$

$$N(\phi) = 1.369 + 0.0032 \times 10^{-25} \phi$$

$$N(H) = 1 + 2.298 \times 10^{-3} H + 4.138 \times 10^{-6} H^2 - 1.5 \times 10^{-8} H^3 \quad H \leq 400 \text{ ppm}$$

donde ϕ es la cantidad de fisiones por cm^2 por seg y H la cantidad de hidrógeno en ppm dentro de la vaina.

5. Dilatación térmica

Las variaciones de temperatura al cambiar la potencia lineal generan una deformación por dilatación (o contracción) térmica del material. Ese cambio instantáneo se expresa matemáticamente mediante un vector de deformación térmica

$$\{e^T\}_h^T = [e_{rr}^T \ e_{\theta\theta}^T \ e_{zz}^T \ e_{rz}^T]_h = \alpha_h \Delta T [1 \ 1 \ 1 \ 0]$$

donde α_h es el coeficiente de dilatación térmica del material $h =$ pastilla, vaina; y ΔT es la variación de temperatura en grados Kelvin^[3,8,34]

$$\alpha(K^{-1}) = \begin{cases} (-4.972 \times 10^{-4} + 7.107 \times 10^{-6} T + 2.583 \times 10^{-9} T^2) / \Delta T & \text{para el UO}_2 \\ (-2.07 \times 10^{-3} + 6.72 \times 10^{-6} T) / \Delta T & \text{para el Zircaloy} \\ 0 & \text{para el gap} \end{cases}$$

El modelo de expansión térmica para el Zircaloy debe considerar un modelo de anisotropía de estructura policristalina introducida por el modo de fabricación del tubo. Para modelar esa anisotropía se trabaja en el plano polar del material para estimar las orientaciones promedio de los cristales que conforman la estructura. Se debe distinguir esencialmente dos direcciones características, la axial y la circunferencial-diametral en donde se supone simetría de los ejes principales correspondientes. Para un cristal simple la correlación de las expansiones térmicas son

$$\begin{aligned} T < 1083 \text{ K} & \quad \begin{aligned} \varepsilon_{11} &= 4.95E^{-6} T - 1.485 \times 10^{-3} \\ \varepsilon_{33} &= 1.26E^{-5} T - 3.78 \times 10^{-3} \end{aligned} \\ 1083 \text{ K} < T < 1244 \text{ K} & \quad \begin{aligned} \varepsilon_{11} &= 2.7763 \times 10^{-3} + 1.0982 \times 10^{-3} \cos\left(\frac{T-1083}{161} \pi\right) \\ \varepsilon_{33} &= 8.76758 \times 10^{-3} + 1.0982 \times 10^{-3} \cos\left(\frac{T-1083}{161} \pi\right) \end{aligned} \\ 1244 \text{ K} < T & \quad \begin{aligned} \varepsilon_{11} &= 9.7 \times 10^{-6} T - 1.04 \times 10^{-2} \\ \varepsilon_{33} &= 9.7 \times 10^{-6} T - 4.4 \times 10^{-3} \end{aligned} \end{aligned}$$

A partir de estos coeficientes se obtiene la deformación térmica y los coeficientes de expansión de un policristal utilizando los pesos promedio en volumen de la cantidad de cristales orientados en cada dirección. Esos factores vienen determinados por la textura del material de fábrica que se obtienen de la literatura y se modela en consecuencia^[40].

Con ellos los valores medios de la deformación axial, la radial y la circunferencial alcanzan expresiones^[7]:

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'_{11} \rangle &= \langle \sin^2 \phi \rangle \varepsilon_{11} + \langle \cos^2 \theta \cos^2 \phi \rangle \varepsilon_{22} + \langle \sin^2 \theta \cos^2 \phi \rangle \varepsilon_{33} \\ \langle \varepsilon'_{22} \rangle &= \langle \cos^2 \phi \rangle \varepsilon_{11} + \langle \cos^2 \theta \sin^2 \phi \rangle \varepsilon_{22} + \langle \sin^2 \theta \sin^2 \phi \rangle \varepsilon_{33} \\ \langle \varepsilon'_{33} \rangle &= \langle \sin^2 \theta \rangle \varepsilon_{22} + \langle \cos^2 \theta \rangle \varepsilon_{33} \end{aligned}$$

donde las primadas son las de policristal y las no primadas de cristal simple. θ es el ángulo entre la dirección radial de la vaina y el eje c del cristal simple, ϕ es el ángulo entre la dirección circunferencial de la vaina y la proyección del eje c en el grano sobre el plano circunferencial-axial de la vaina, $\langle a \rangle$ significa promedio en volumen.

Para un reactor LWR en donde se utiliza Zircaloy-4 los parámetros serán ($T < 1.083 \text{ K}$)

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon'_{11} \rangle &= 7.09 \times 10^{-6} T - 2.13 \times 10^{-3} \\ \langle \varepsilon'_{22} \rangle &= 5.41 \times 10^{-6} T - 1.62 \times 10^{-3} \\ \langle \varepsilon'_{33} \rangle &= 1.0 \times 10^{-5} T - 3.00 \times 10^{-3}\end{aligned}$$

6. Crecimiento por irradiación de la vaina

Debido a la irradiación se induce un crecimiento en el tubo de la vaina. Sobre el mismo influye el flujo de neutrones, la textura del tubo, la temperatura y la historia del material. Si bien el cambio es pequeño en tubos comerciales de Zircaloy, debe tenerse en cuenta a la hora del diseño porque puede ser significativa la fracción de la distancia entre la vaina y el tope de ensamblaje del elemento. El contacto con los topos puede causar que las barras se doblen e incluso fallen entrando en contacto con otras vainas del elemento.

DIONISIO contempla dos modelos para crecimiento por irradiación. El modelo del MATPRO^[7,36], en donde la elongación axial toma la forma relativa

$$\frac{\Delta L}{L} = A \exp(240.8/T) \sqrt{t\Phi} (1 - 3f_z)(1 + 2.0CW)$$

donde $A = 1.40710^{16} (\text{neutrones}/\text{m}^3)^{-0.5}$, T = temperatura (K), Φ = flujo de neutrones rápidos ($\text{n}/\text{m}^2/\text{seg}$) ($E > 1.0\text{MeV}$) y t es el tiempo. f_z representa el factor de textura para el eje longitudinal del tubo (fracción efectiva de celdas alineadas con su eje $\langle 001 \rangle$ paralelo al eje del tubo determinada por análisis de difracción de rayos X. Valor típico $f_z = 0.05$). CW indica el factor de trabajado en frío que representa la fracción de la reducción del área por trabajado.

Un modelo más completo tomado de la referencia^[18] analiza la influencia en las tres direcciones en la forma

$$d\varepsilon'_{zz} / dt = 4.942 \times 10^{-20} \Phi, \quad d\varepsilon'_{rr} / dt = -0.941 d\varepsilon'_{zz} / dt, \quad d\varepsilon'_{\theta\theta} / dt = -0.059 d\varepsilon'_{zz} / dt$$

El efecto es distribuido en forma matricial dentro de nuestro sistema multiplicando por δt ,

$$\begin{aligned}\{\varepsilon^I\}_h^T &= [\varepsilon'_{rr} \quad \varepsilon'_{\theta\theta} \quad \varepsilon'_{zz} \quad \varepsilon'_{rz}]_h \\ \delta\varepsilon^I_{kk} &= \frac{d\varepsilon^I_{kk}}{dt} \delta t \\ \delta\varepsilon^I_{kj} &= 0\end{aligned}$$

donde $k, j = z, r, \theta$.

7. Modelo de fluencia para el UO₂

El modelo tomado del manual MATPRO^[7] incluye el cálculo de una velocidad de creep para el UO₂ dependiente del tiempo válido para un estado transitorio y un estado estacionario (referidos a estados del reactor). Este modelo es función del tiempo, temperatura, tamaño de grano, densidad de fisiones, tasa oxígeno/metal y tensión externa^[28].

A una dada tensión de transición σ_t la velocidad de creep cambia de una forma lineal a una proporcional a una potencia de la tensión. Dicha tensión de transición se define como

$$\sigma_t = \frac{1.6547 \times 10^7}{G^{0.5714}} \text{ en Pascales, en donde } G \text{ es el tamaño de grano. La velocidad de creep sigue}$$

una ley de activación del tipo Arrhenius para cada una de sus componentes y toma la forma:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{(a_1 + a_2 \dot{f})\sigma \exp(-Q1/RT)}{(a_3 + D)G^2} + \frac{(a_4 + a_8 \dot{f})\sigma^{4.5} \exp(-Q2/RT)}{a_6 + D} + a_7 \dot{f} \exp(-Q3/RT)$$

medida en seg^{-1} , a_1 - a_8 son constantes, \dot{f} es la tasa de fisiones, σ la tensión aplicada, G el tamaño de grano. $Q1$, $Q2$ y $Q3$ son las energías de activación medidas en Joules mol^{-1} . El primer término responde a la fluencia de baja tensión, basada en difusión de vacancias y lineal con la tensión aplicada. El segundo, que es función de una potencia de la tensión, es importante a altas tensiones y su mecanismo principal es el movimiento de dislocaciones. El último término representa a la fluencia inducida por irradiación.

Cuando la tensión aplicada es menor que la de transición, se la utiliza en el primer término de la ecuación; en caso contrario, se utiliza en el primer término la tensión de transición y la tensión aplicada en los demás ^[4,37].

8. Modelo de fluencia para el Zircaloy

Muchos son los modelos existentes para caracterizar la fluencia del Zircaloy ^[4,7,37]. DIONISIO contiene el modelo extraído del MATPRO ^[7] basado en funciones para la velocidad de fluencia en función de las condiciones de operación del reactor.

El modelo tomado de ref [37] toma la forma

$$\dot{\varepsilon} = f(\sigma, T, t, \dot{f}) = \frac{(2a_1 a_2 a_3)^2}{\varepsilon_{eq}}$$

$$a_1 = k\dot{f} \quad a_2 = \exp\left(-10000/RT\right) \quad a_3 = \sigma_{Hoop} + b \exp(c\sigma_{Hoop})$$

donde k , b y c son constantes y ε_{eq} es la deformación de fluencia generalizada.

9. Modelo de liberación de gases de fisión

El modelo de liberación de gases de fisión, que ya fuera presentado en trabajos previos ^[8, 9], se basa en las siguientes hipótesis:

1. El óxido combustible, UO_2 , se considera como una colección de granos esféricos en los que, debido a la continua irradiación, se producen átomos de Xe y Kr por fisión de los átomos de U^{235} .
2. Debido a la insolubilidad casi completa de estos gases en la matriz de UO_2 , ellos precipitan dentro de los granos formando burbujas intragranulares de unos pocos nanómetros o difunden a los bordes de grano formando burbujas intergranulares, con forma de lentejas, de algunos micrones.
3. La velocidad del proceso está controlada por la difusión de los gases.
4. Se considera que las burbujas intragranulares son inmóviles y que actúan como trampas para el gas que difunde.
5. La irradiación puede causar la destrucción de ambos tipos de burbujas.
6. Los átomos de gas contenidos en las burbujas intragranulares destruidas retornan al proceso de difusión. Debido a razones cinéticas, se establece una solubilidad dinámica, mucho mayor que la predicha por el diagrama de equilibrio.
7. La destrucción de las burbujas intergranulares actúa como una fuente adicional de átomos de gas, que afecta principalmente a la región del grano adyacente al borde.

8. La cantidad de gas almacenada en las burbujas del borde de grano crece hasta un valor de saturación. Luego, dichas burbujas se interconectan y el gas en exceso se libera al plenum y al gap entre el combustible y la vaina.
9. Los granos crecen debido a la alta temperatura del combustible, especialmente cerca de su centro. Al desplazarse, el borde de grano atrapa tanto al gas libre como al almacenado en burbujas, contenido en el volumen barrido.

La velocidad de liberación de gas se calcula por medio de la ecuación de difusión en coordenadas esféricas, con fuentes y sumideros:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) - gc + bm + \beta$$

junto con la ecuación de balance para los átomos atrapados:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = gc - bm$$

donde c y m son respectivamente las concentraciones de los átomos libres y atrapados ($\text{át}/\text{m}^3$), β es la tasa de generación de gas ($\text{át}/\text{m}^3\text{s}$), g y b son las probabilidades de captura y liberación de las trampas ($\text{át}/\text{s}$) y D es el coeficiente de difusión de los átomos aislados de gas en la matriz de UO_2 . Suponiendo condiciones estacionarias de atrape: $\partial m / \partial t = 0$ y definiendo la concentración total de gas en el grano $\psi = c + m$ y el coeficiente efectivo de difusión $D' = Db / (b + g)$, se obtiene la ecuación equivalente:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D' \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \beta$$

con las condiciones de contorno: $\psi(r=a)=0$, que indica que el borde de grano en $r=a$ actúa como sumidero perfecto, y $\partial \psi / \partial r = 0$ en $r=0$ debido a la simetría esférica.

El coeficiente de difusión D fue determinado por Turnbull et al^[10]; el tamaño y concentración de las burbujas y los parámetros de atrape, g y b , se deben a White et al^[11]; la velocidad de crecimiento de los granos equiaxiados es la usada por Ito et al^[12].

La concentración de saturación de los bordes de grano, N_s , se calcula suponiendo que el gas en las burbujas intergranulares obedece la ley de los gases ideales, que la presión del gas, la presión externa, P_{ext} , y la tensión superficial, γ , están en equilibrio y que la interconexión entre las burbujas ocurre cuando una fracción dada, f_s , del área del borde de grano está cubierta por burbujas^[11].

$$N_s = (2\gamma + r_f P_{\text{ext}}) \frac{4wF_s}{3kT}$$

donde r_f es el radio de curvatura de las burbujas, $k=1.38 \times 10^{-23} \text{J K}^{-1}$ y w es un parámetro geométrico. Habitualmente se asigna el valor $f_s=0.5$ ^[8,12,13]. Sin embargo, parece apropiado suponer que la interconexión de burbujas ocurre como un proceso de percolación. La percolación es un modelo numérico que estudia, dada una matriz de posiciones, como varía la distribución de huecos y no huecos con la cantidad de elementos involucrados en el llenado.

A medida que en forma aleatoria se comienzan a ocupar los lugares de esa matriz, parámetros como la formación y crecimiento de racimos, huecos aislados, o conectividad entre regiones dependen de la probabilidad p asociada a cada evento. Un parámetro de especial interés es el umbral de percolación, que representa la cantidad mínima de lugares ocupados que debemos tener para que exista al menos un camino por el que podamos recorrer la matriz de un extremo a otro sin saltos discontinuos. Son muchas las situaciones físicas que se estudian mediante esta aproximación como el crecimiento de películas delgadas, procesos de comunicación eléctrica, etc. En este caso, se considera al área del borde de grano dividida en triángulos equiláteros y coloquemos círculos, de radio igual a la mitad del lado del triángulo, en algunas de las intersecciones de las líneas que forman los triángulos. La teoría elemental predice que el umbral de percolación se produce cuando la mitad de los sitios están ocupados^[14]. Esto corresponde a una fracción de área cubierta $f_s = \pi\sqrt{3} / 12 = 0.453$ (Ver figura II.7).

La función que representa la tasa de producción de gas, $\beta(r)$ ^[8], contiene la tasa de generación uniforme de gas debido a irradiación (obtenida como el producto de la tasa de fisiones, F (fisiones/m³s) y el rendimiento para la producción de gas y) y la contribución debida a la redisolución de las burbujas intergranulares, que es proporcional a la ocupación del borde de grano, N . Su expresión es:

$$\beta = \begin{cases} yF & \text{for } 0 \leq r \leq a - 2\lambda \\ yF + h(r) & \text{for } a - 2\lambda < r \leq a \end{cases}$$

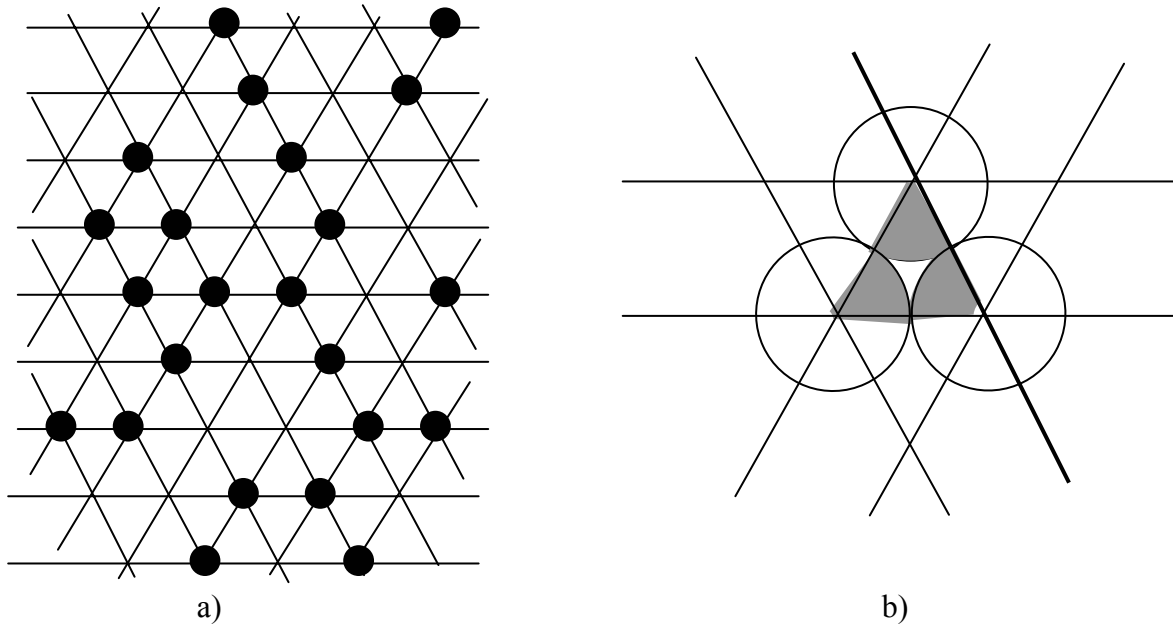


Figura II.7: a) Aspecto de la matriz en el umbral de percolación. b) Area de borde de grano ocupada por las burbujas si toda la matriz estuviese llena.

donde λ representa la profundidad de penetración de los productos de fisión de alta energía capaces de redissolver las burbujas de borde de grano, a es el radio del grano y la función $h(r)$ es tal que

$$\int_{a-2\lambda}^a h(r) 4\pi r^2 dr = 4\pi a^2 b' \frac{N}{2}$$

Se puede elegir $h(r)$ como una función Gaussiana, pero por simplicidad se tomó una aproximación triangular^[15]. La constante de proporcionalidad $b'(1/s)$ representa la probabilidad de redisolución de las burbujas intergranulares y es uno de los parámetros del modelo.

El contenido de gas por unidad de área del borde de grano, N_k , en el instante t_k se obtiene de una ecuación de balance que incluye al gas contenido en el volumen del grano en t_{k-1} :

$$C_{k-1} = 4\pi \int_0^{a_{k-1}} r^2 \psi_{k-1} dr$$

al gas contenido en el borde de grano en t_{k-1} :

$$4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2}$$

a la cantidad de gas generado por las fisiones durante Δt_k :

$$\frac{4}{3} \pi a_k^3 y F_k \Delta t_k$$

a la cantidad de gas incorporada al grano y su borde por barrido del borde de grano:

$$\left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2} \right) \left(\frac{a_k^3 - a_{k-1}^3}{a_{k-1}^3} \right)$$

y al gas contenido en el volumen del grano en t_k , C_k , que se obtiene mediante una expresión similar a la correspondiente a C_{k-1} . La ecuación de balance es:

$$\left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2} \right) \left(\frac{a_k^3}{a_{k-1}^3} \right) + \frac{4}{3} \pi a_k^3 y F_k \Delta t_k = C_k + 4\pi a_k^2 \frac{N_k}{2}$$

que, con las condiciones iniciales ($t=0, k=0$) $C_0=0$ y $N_0=0$ da N_k en cada instante t_k . Antes de la saturación N_k representa al contenido de gas del borde de grano. Después de la saturación este contenido queda fijado en N_S y la diferencia $N_k - N_S$ multiplicada por el área del borde de grano da el número de átomos de gas liberados al volumen libre en el intervalo Δt_k . Este número se determina por

$$R_k = \max \left(\frac{4\pi a_k^2}{2} (N_k - N_S), R_{k-1} \right)$$

que impide que R_k decrezca cuando la temperatura disminuye.

10. Hinchado o Swelling

Se considera la contribución al hinchado de las burbujas intra e intergranulares y de los productos de fisión disueltos en la red. En el primer caso, si se crea una concentración C_B de burbujas intragranulares y si se supone que ellas tienen el mismo radio R_B , el hinchado que producen es:

$$\frac{\Delta V}{V} \Big|_{bi} = \frac{(4/3)\pi R_B^3 C_B}{1 - (4/3)\pi R_B^3 C_B} \approx (4/3)\pi R_B^3 C_B$$

La concentración C_B es inicialmente cero y crece hasta un valor estacionario, siempre que las condiciones de irradiación se mantengan constantes. Esto implica que el hinchado debido a este tipo de burbujas alcanza un valor de saturación.

Para determinar el hinchado debido a las burbujas intergranulares, suponemos que el gas en una burbuja obedece la ley de los gases ideales y que la presión del gas equilibra a la presión externa, P_{ext} , y a la tensión superficial, $2\gamma/r_f$, donde r_f indica al radio de curvatura de las superficies de las burbujas. El hinchado producido cuando se establece una concentración superficial de átomos de gas, N , en el borde de un grano de radio a es

$$\left. \frac{\Delta V}{V} \right|_{\text{bbg}} = \frac{3kTN}{2a(2\gamma/r_f + P_{ext})}$$

Dado que la concentración N alcanza un valor de saturación, el hinchado debido a las burbujas intergranulares también se satura. Por el contrario, el aumento de volumen debido a los productos de fisión, tanto sólidos como gaseosos, disueltos en la red, ya sea en sitios intersticiales o sustitucionales, aunque menor que el debido a las burbujas, mantiene un crecimiento continuado. Como una estimación es posible suponer que el hinchado provocado por los productos de fisión en la red está descrito por la relación empírica^[16]:

$$\left. \frac{\Delta V}{V} \right|_{\text{pfr}} = 0.0032\text{Bup[at\%]}$$

11. Densificación.

En el modelo simple de densificación usado en este trabajo, el sólido poroso se representa por un conjunto de granos esféricos que contienen una densidad de poros esféricos de igual radio distribuidos uniformemente en el sólido. Se supone que los poros son pequeños comparados con el tamaño del grano y con el espaciado entre poros. Los fragmentos de fisión, al pasar cerca de un poro, provocan la emisión de vacancias a la red, que a su vez difunden al borde de grano. Este proceso es similar al de redisolución de las burbujas de gas pero, dado que el tamaño de los poros es considerablemente mayor que el de las burbujas, es improbable que un poro sea completamente convertido en vacancias por un único evento de redisolución. Se considera en cambio que la redisolución reduce el tamaño de los poros. Sin embargo, debido a la similitud de ambos procesos se puede suponer que la probabilidad de que una vacancia en un poro sea eyectada a la red tiene un valor similar a la tasa de redisolución de burbujas intragranulares, b . Con todas estas suposiciones se obtiene la dependencia temporal de la porosidad

$$P = P_0 e^{-bt}$$

donde P_0 representa la porosidad inicial. De aquí, la fracción de cambio de volumen debido a densificación resulta

$$\left. \frac{\Delta V}{V} \right|_d = -\frac{P_0(1-e^{-bt})}{1-P_0e^{-bt}} \approx -P_0(1-e^{-bt})$$

que es similar a la expresión usada en las Refs^[17, 18].

La fracción total de cambio de volumen debido a hinchado y densificación se obtiene como la suma de estas cuatro contribuciones, las que dan origen a un término extra de

deformación de la forma:

$$\varepsilon_{sd} = \frac{1}{3} \left[\left. \frac{\Delta V}{V} \right|_{bi} + \left. \frac{\Delta V}{V} \right|_{bbg} + \left. \frac{\Delta V}{V} \right|_{pfr} + \left. \frac{\Delta V}{V} \right|_d \right]$$

12. Fractura, reestructuración y cambios en las propiedades termomecánicas de la pastilla de combustible durante el quemado

Fractura del Combustible

Inmediatamente después del comienzo de la irradiación el combustible desarrolla una serie de fisuras orientadas en los planos r-z y r- θ llamadas generalmente z-cracks y θ -cracks respectivamente (figura II.8). Estas fisuras aparecen porque los fuertes gradientes térmicos inducen tensiones de tracción en las direcciones θ y z en la zona exterior del combustible que exceden la máxima tensión de estiramiento del cerámico. Por otro lado en la zona central de la pastilla las tensiones son de compresión, un orden de magnitud mayor que las de tracción, por lo que no aparecen en el inicio fisuras en dicha zona. Además de eso debido a las altas temperaturas, la región interna del combustible se encuentra por encima de la temperatura de transición dúctil-frágil del material. De acuerdo a la potencia generada dentro del combustible y parámetros del material se puede determinar la tensión máxima en la dirección tangencial (hoop stress) para la cual se producirán fisuras^[3,7]

El fenómeno de fisurado del combustible afecta estructuralmente en todas las direcciones al comportamiento mecánico del material. Como DIONISIO es un código bidimensional, la presencia de fisuras en ambas direcciones z y θ ingresa en forma promediada como una reducción del módulo de Young efectivo. Al mismo tiempo se produce una disminución del módulo de Poisson para las direcciones r θ y z θ . Dicha reducción empíricamente ingresa en el material de modo:

$$E' = \left(\frac{2}{3}\right)^N E \quad \nu' = \left(\frac{1}{2}\right)^N \nu$$

en donde N es el número de fisuras en la dirección particular en que se considera cada una de las constantes. Claramente el problema deja en este caso de ser homogéneo e isótropo poseyendo parámetros distintos para cada dirección^[16].

La figura II.9 presenta una salida del DIONISIO en donde se muestran los elementos que presentan fisuras frente a los coloreados que no lo hacen. Puede verse como para una temperatura central de 1.200, las fisuras se limitan a los elementos exteriores mientras que los centrales permanecen intactos. Esta situación variará con el paso del tiempo de irradiación a través del cual se sucederán fisuraciones también en la zona central.

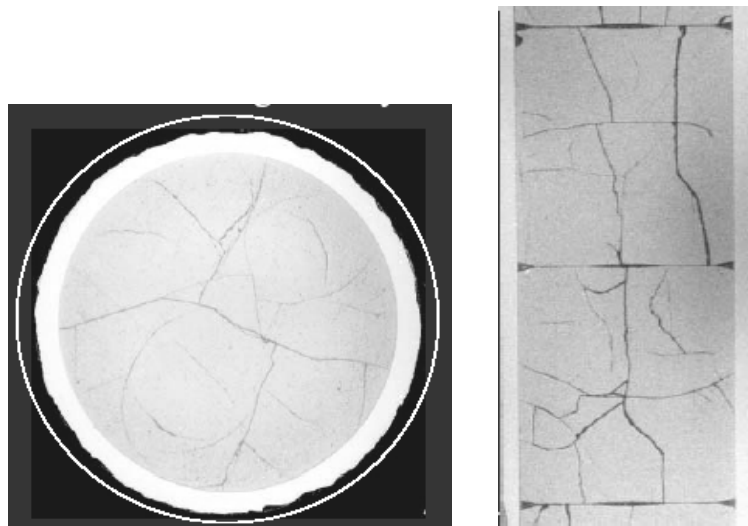


Figura II.8: En las figuras se observan las orientaciones de las fracturas en los planos mencionados. El diámetro de la pastilla es de aprox. un centímetro.

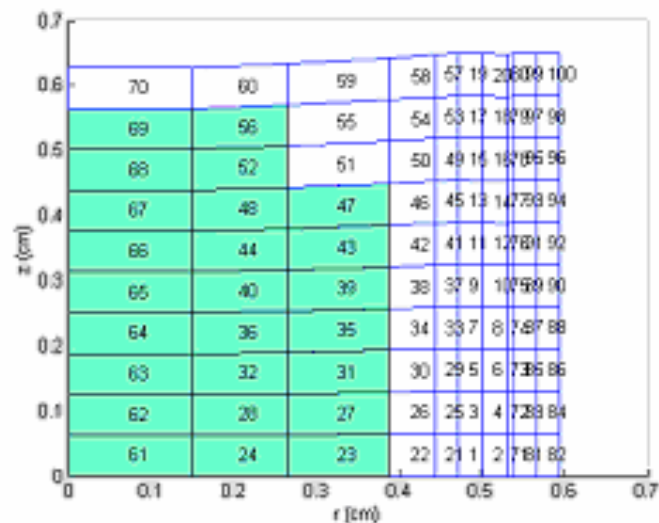


Figura II.9: En la figura observamos un esquema de pastilla tipo Atucha discretizada en elementos finitos (se presenta la numeración de los mismos) a una temperatura máxima de 1200 C donde puede observarse la zona “fisurada” numéricamente. (Los elementos coloreados no presentan fisuras).

Reestructuración

Paralelamente a la generación de fisuras se producen los fenómenos de reestructuración relacionada con la migración de poros en la matriz y crecimiento de grano. Mientras los gases de fisión producen burbujas pequeñas (diámetros menores a 1 micrón), en general llenas de productos de fisión gaseosos, los poros, en cambio, son otro tipo de cavidades presentes en el combustible que en general se encuentran llenos de Helio (gas de llenado del elemento combustible) y a medida que avanza la historia del quemado pueden contener también Xe y Kr. Mientras que la presión dentro de las burbujas es grande, suficiente como para mantener el equilibrio mecánico entre las burbujas y el sólido que lo rodea, un

poro de 20 micrones de diámetro requiere una presión de no más de tres atmósferas en exceso a la tensión hidrostática para mantenerse sin colapsar.

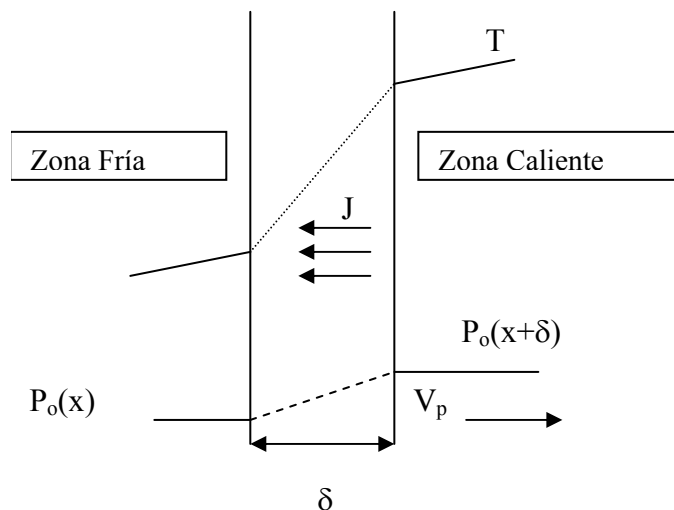
Para la temperatura de operación el poro tiende a encogerse para restablecer el equilibrio mecánico; parte de este encogimiento ocurre por emisión de vacancias hacia el cuerpo del sólido [35,39].

Durante la fabricación de compactos de UO_2 sinterizados a altas temperaturas se producen pastillas de aproximadamente 95% de la densidad teórica del cristalino. El 5% del volumen permanece vacío y se distribuye homogéneamente por el sólido. En las primeras horas del quemado esos poros se destruyen por migración de vacancias, pero tanto las fisuras como los productos sólidos del hinchado son permanente fuente de porosidades en la pastilla.

Debido a la diferencia de tamaño, las burbujas y los poros migran a través de la red con diferentes mecanismos. Las burbujas pequeñas lo hacen por difusión superficial, a través del UO_2 o por difusión de volumen en el cristal. La movilidad de los poros se produce por difusión de moléculas de la matriz desde el lado caliente del poro al frío a través del gas de llenado. La fuerza movilizadora de este mecanismo es la diferencia de presión de vapor del sólido a temperatura. El proceso se denomina transporte de vapor o evaporación-condensación. En este mecanismo el sólido que se deposita sobre la interfase matriz-vapor sobre el lado frío tiende a condensarse en una configuración de cristal simple y muestra preferencia por formar fases en planos de bajo índice cristalográfico. Entonces en la vecindad o contorno de la región cilíndrica determinada por la zona de migración y el sólido se presenta un salto en la orientación del cristal que se percibe como un borde de grano. Como esos granos son orientados y de forma columnar, se las llama “grano columnar”.

Un poro lenticular se orienta en forma perpendicular al gradiente de temperatura que tiene dirección radial. Por ese motivo podemos suponer que el ancho es mucho mayor que el espesor y considerar un modelo unidimensional entre dos paredes paralelas (figura II.10). En la figura se observa el modelo unidimensional en donde el poro se encuentra entre dos placas paralelas de combustibles a diferente temperatura. La velocidad de los poros, V_p , tiene la dirección del gradiente de temperatura mientras que el flujo J de moléculas de la matriz posee la dirección contraria.

Figura II.10: Flujo a través del poro. $P_o(x)$ representa la concentración de porosidad.



La velocidad de los poros cumple la ecuación $V_p = J\Omega$, donde $\Omega = 40 \text{ \AA}^3$ es el volumen de la molécula de UO_2 . Utilizando la ley de Fick para el flujo molecular a través del gas por difusión se obtiene $J = \frac{D_g}{k_B T \delta} (P_o(x + \delta) - P_o(x))$, donde $\frac{dP_o}{dx} \approx \frac{P_o(x + \delta) - P_o(x)}{\delta}$ y la velocidad de los poros quedará determinada al calcular la derivada de la presión de vapor

$$V_p = \frac{10^6 D_g \Omega}{(k_B T)^2} (\Delta H_{vap}) \exp\left(\frac{\Delta S_{vap}}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_{vap}}{k_B T}\right) \frac{1}{T} \left(\frac{dT}{dx}\right) \Big|_{\text{Promedio}}$$

donde D_g es el coeficiente de difusión en el gas, H_{vap} y S_{vap} son el calor y la entalpía de vaporización del sólido. La derivada de la temperatura en función de la coordenada radial es un promedio dentro del poro [16].

Se utiliza en general una expresión para el coeficiente de difusión referida a la temperatura y presión de equilibrio.

$$D_g = D_{g \text{ equilibrio}} \left(\frac{T}{2000}\right)^{3/2} \left(\frac{T_{Sinterizado}}{T}\right)$$

donde $T_{Sinterizado}$ corresponde a la temperatura de sinterización ($\approx 1.800 \text{ }^\circ\text{K}$).

Utilizando valores característicos del UO_2

$$\Delta H_{vap} = 567 \frac{\text{kJ}}{\text{mol}}, \quad \Delta S_{vap} = 150 \frac{\text{J}}{\text{mol}^\circ\text{K}}, \quad D_g(Eq) = 11 \frac{\text{cm}^2}{\text{seg}}, \quad \Omega = 41 \text{ \AA}$$

se obtienen velocidades de poros del orden de $0.15 \text{ \AA seg}^{-1}$.

En presencia de impurezas la velocidad de poro se ve reducida sensiblemente para lo cual se determina un factor de corrección a V_p que depende del espesor del poro y del tipo y tamaño de impurezas presentes en la matriz. La nueva velocidad de poros queda entonces determinada por:

$$V_{pl} = V_p FAC(\delta)$$

El factor de corrección toma en promedio valores en el intervalo [0.4-0.6].

Las impurezas se generan también por productos de fisión sólidos y gaseosos. Esto sugiere que los poros son fácilmente inmovilizables y sólo los que posee un espesor suficientemente grande son capaces de sortear el anclaje de las impurezas y migrar [16,38].

Cinética de redistribución de porosidad

La distribución de porosidades en la pastilla de combustible genera la relocación del combustible y la disminución de la temperatura central de la pastilla. Todo el proceso de reestructuración requiere un tiempo que va desde las pocas horas para reactores rápidos en donde las pastillas alcanzan una T central del orden del punto de fusión del UO_2 , hasta los tiempos infinitos en donde nunca se alcanza el equilibrio, en reactores en donde la temperatura central esté en el orden de los $2000 \text{ }^\circ\text{K}$, como es el caso de PWRs.

Típicamente los modelos para entender la distribución de temperatura en la pastilla dividen el combustible en cuatro zonas:

- 1) Zona sinterizada de fábrica.
- 2) Zona de grano equiaxial: en donde los granos tienen forma esférica.
- 3) Zona de grano columnar: con el eje más grande paralelo al gradiente de temperatura.

- 4) Zona central: fragmentada o desinterizada. Es una zona en donde los granos se han fragmentado o fusionado con otros debido a las altas temperaturas.

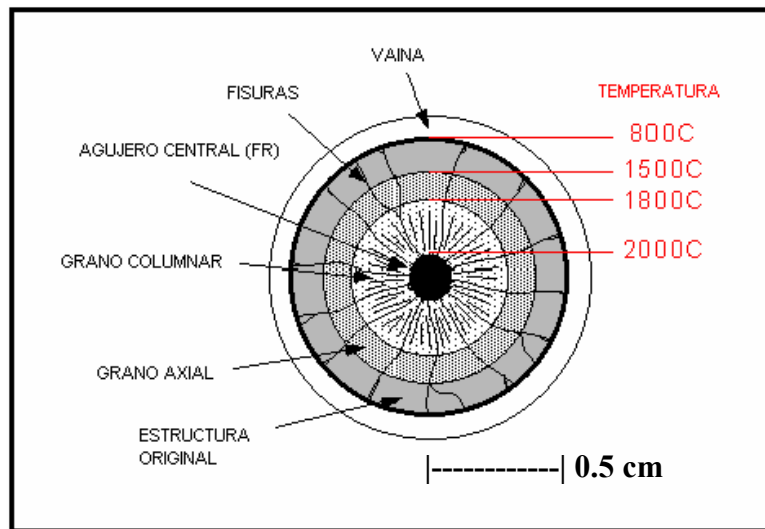


Figura II.11: Zonas generadas en el combustible durante el quemado.

Un modelo detallado requiere de un análisis muy minucioso de los límites de cada zona. El problema está fuertemente acoplado con la distribución de temperatura y el tiempo de irradiación y es resuelto numéricamente^[16, 38,42].

Para determinar la distribución de poros $P(r,t)$ y el volumen que ocupan en función de la distancia radial y del tiempo, debe resolverse una ecuación de la forma

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rV_p P)$$

$$P(r,0) = P(0) ; P(R,t) = P(0)$$

en donde la condición de contorno y la inicial se equiparan a la porosidad de fábrica del combustible. Esta ecuación está acoplada a la que determina la distribución térmica a través del coeficiente de conductividad del material y la potencia generada en el combustible, ya que ambos dependen de la porosidad. La conductividad del UO_2 se modifica siguiendo la relación

$$k_{UO_2}(P) = k_{100\%} \frac{1-P}{1+2P}$$

donde $k_{100\%}$ representa la conductividad sin porosidad, mientras que la potencia lineal sigue la ley

$$P_L(P) = P_L \frac{1-P}{1-P(0)}$$

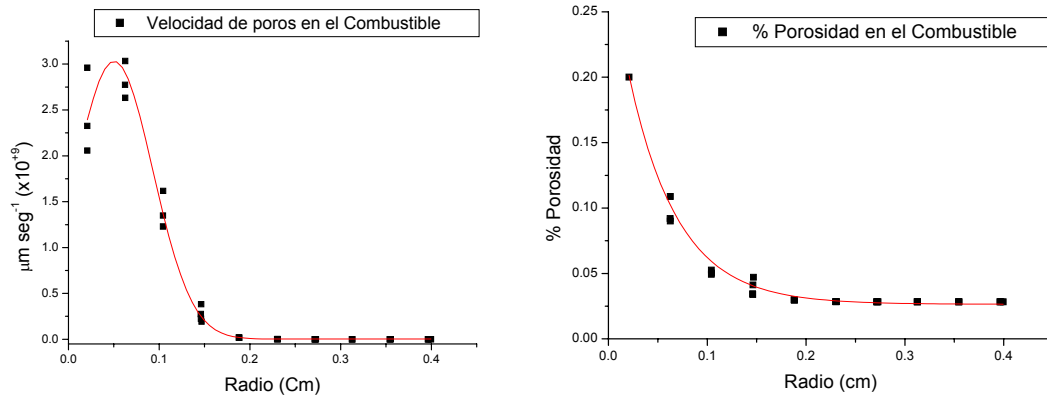


Figura II.12: Velocidad y distribución de porosidad en función del radio del combustible para una pastilla genérica a una potencia lineal constante de 300 W cm^{-1} .

Crecimiento del grano columnar

Tanto la posición como el tamaño de la zona de grano columnar dependen del tiempo de irradiación t_{irrad} , la velocidad de los poros V_p , la temperatura central T_C y la temperatura superficial de la pastilla T_S . Existe una fórmula empírica que vincula todos los parámetros antedichos:

$$t_{\text{irrad}} = \frac{R^2 \exp(-C)}{8V_p C} \left(\frac{T_{GC}^{9/2}}{(T_C - T_S)^2 \left(1 - \frac{T_{GC} - T_S}{T_C - T_S}\right)} \right) \exp\left(\frac{C}{T_{GC}}\right)$$

Obteniéndose una relación para la temperatura del límite de la zona de grano columnar T_{CG} de la forma

$$\frac{1}{T_{GC}} = Cte_1 \text{Log}(t_{\text{irrad}}) + Cte_2$$

donde C , Cte_1 , y Cte_2 son constantes a determinar de acuerdo al tipo de combustible, velocidad de poros y distribución de temperaturas en la pastilla y R el radio de dicha zona.

La localización del límite de la zona de grano columnar se determina resolviendo una ecuación integral que vincula la temperatura con el tiempo de irradiación y la posición límite:

$$t_{\text{irrad}} = \frac{R^2}{2V_p} \int_T^{T_{CG}} \frac{\left(\frac{1}{T}\right)^{5/2} \exp(C(T-1))}{\left(\frac{dT}{dr}\right)^2} dT$$

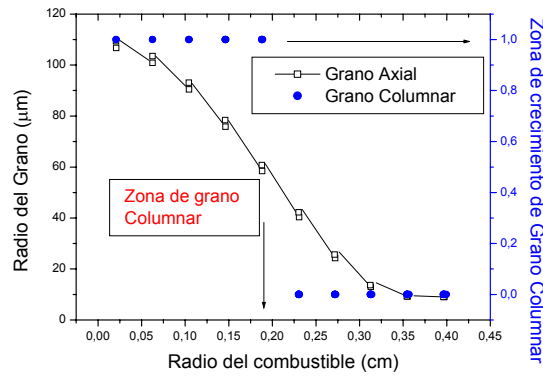


Figura II.13: Distribución de grano columnar y equiaxial sobre el radio del combustible.

Crecimiento de Grano equiaxial

Para temperaturas cercanas a los 1900 °K se produce un crecimiento de grano desde el compacto sinterizado a velocidades que pueden observarse en el término de días. El anillo característico de la zona de grano equiaxial es la zona de temperatura en el rango [1.800-2.100] °K. El tamaño de grano crece desde los 5 micrones (típico del sinterizado) hasta los 25-35 micrones de la zona equiaxial, aunque la definición entre una y otra zona no es bien precisa. El proceso es fuertemente dependiente de la temperatura.

Durante el crecimiento de grano, los granos grandes crecen a expensas de los más pequeños. Macroscópicamente la fuerza movilizadora para este proceso es la reducción de energía del sólido que acompaña el decrecimiento del área del contorno de grano. La energía por unidad de área del contorno es γ_{BG} = tensión en la superficie del grano.

$$\text{Un contorno curvo soporta una fuerza } \frac{2\gamma_{BG}}{R_c} \approx \frac{\gamma_{BG}}{G}$$

donde G es el tamaño de grano y R_c el radio de curvatura. Esa fuerza ocasiona que el contorno se mueva siguiendo una ley

$$G^2 - G_0^2 = kt$$

$$k = \frac{2M_{BG}}{\gamma_{BG}}$$

$$V_{BG} = M_{BG} F_{BG}$$

k es la constante de crecimiento de grano y es proporcional a la movilidad de borde de grano. Esta es la constante de proporcionalidad entre la fuerza y la velocidad del proceso. Dicha constante es la velocidad a la cual los átomos cruzan el contorno. Como es necesario que los átomos sean removidos de la red cristalina, el proceso es térmicamente activado y k sigue una ley tipo Arrhenius:

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right)$$

Sin embargo, se observa que en la mayoría de los materiales esta ley ideal de crecimiento de grano no se cumple, midiéndose leyes del tipo

$$G^m - G_0^m = kt \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) \quad m > 2$$

$$G^2 - G_0^2 = kt^a \exp\left(-\frac{Q'}{k_B T}\right) \quad a < 1$$

donde para el UO_2 $m=2.5$, $Q=460 \text{ kJ mol}^{-1}$ y $a=0.8$ y $Q'=360 \text{ kJ mol}^{-1}$ [16]

Usualmente la desviación de la ley ideal se explica por la presencia de impurezas disueltas en la red o inclusiones en el sólido que obstaculizan el progreso de los bordes de grano móviles.

Para el MATPRO la ley de crecimiento de grano equiaxial toma la forma

$$G^4 - G_0^4 = \frac{1.026910^{-13} t \exp\left(-\frac{35873.2}{T}\right)}{\left(1 - 5.74610^{-6} B\right)^2 T}$$

donde G se mide en metros, t en seg, y el quemado B en MWseg Kg^{-1} .

Diversos autores proponen leyes empíricas para describir el crecimiento de grano equiaxial a partir de datos obtenidos experimentalmente. Ainscough et al. [46] analizan el crecimiento isotérmico del grano equiaxial en UO_2 a temperaturas de $1300\text{-}1500 \text{ }^\circ\text{C}$. Burgeois et al [38] estudian el crecimiento de grano para rangos térmicos más elevados, entre 1.600 y $1.800 \text{ }^\circ\text{C}$. Singh [47] analiza rangos de entre 1.800 y $2.100 \text{ }^\circ\text{C}$. Los tiempos involucrados en cada análisis experimental son diferentes, mientras que los experimentos de Ainscough tienen una duración entre 12 y 24 semanas, Burgeois estudia tiempos de hasta 500 horas y Singh de 24 horas. Los modelos propuestos por cada autor son comparados con los propuestos por Olander [16], MATPRO [7] y Denis [9].

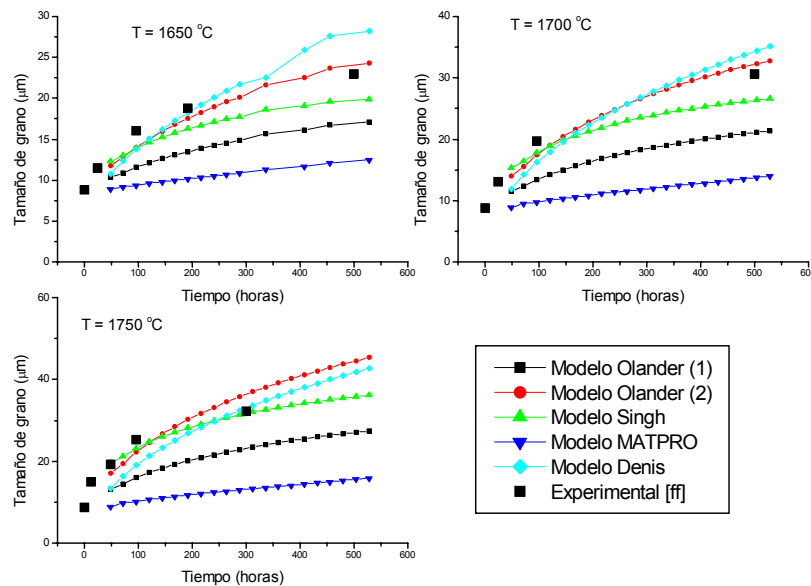


Figura II.14: Modelos de crecimiento de grano equiaxial para un tamaño de grano inicial de $8.8 \mu\text{m}$ [38].

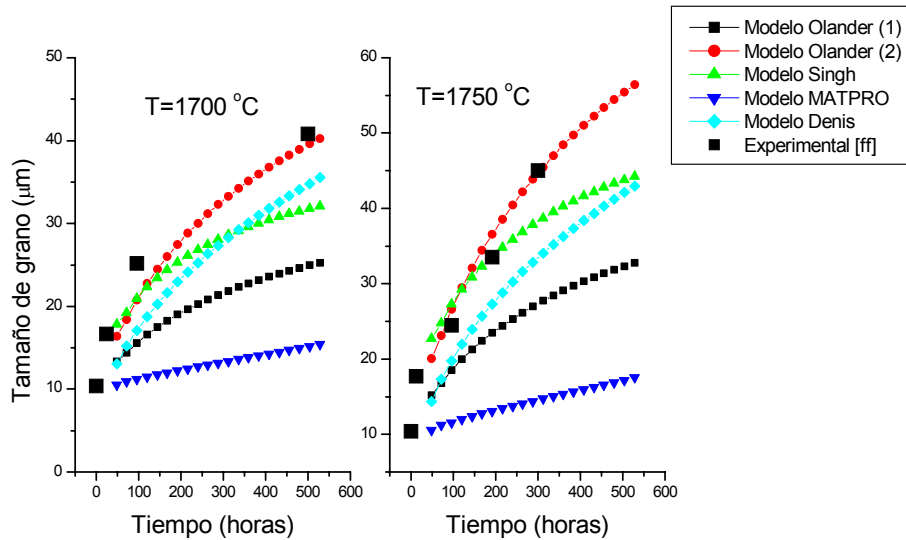


Figura II.15: Modelos de crecimiento de grano equiaxial para un tamaño de grano inicial de $10.4 \mu\text{m}$.

13. Liberación de Cesio y Yodo

Durante la fisión de U^{235} y Pu^{239} se producen isótopos de I y Cs en cantidades significativas. El porcentaje de esos isótopos liberados al gap entre pastilla-vaina resulta de interés en la descripción de posibles ataques químicos de la vaina. En DIONISIO se considera que todo el I y el Cs producidos por fisión está disponible para realizar el ataque a la vaina de Zircaloy. Esto no es realista y constituye una suposición de máxima ya que no se va a considerar las posibles recombinaciones entre el I y el Cs y los demás productos de fisión generados.

Debido a sus diferentes tasas de decaimiento, el Cs y el I son modelados en forma independiente. Además, las aproximaciones utilizadas para modelar la vida media de cada conjunto de isótopos son diferentes. Los isótopos de larga vida se acumulan en el combustible en proporción al quemado y son liberados por difusión a la atmósfera gaseosa interna de la barra. Los de corta vida alcanzan un saldo estacionario en el cual sus velocidades de liberación se balancean con la velocidad de decaimiento dentro del combustible y del gap. Las concentraciones de los isótopos de corta vida son proporcionales a la velocidad de quemado.

Para los isótopos de larga vida I^{127} , I^{129} , Cs^{133} , Cs^{135} , Cs^{137} la expresión utilizada para medir su liberación es^[7]

$$R_i = C_i B \left(\frac{4}{a} \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} - \frac{3Dt}{2a^2} \right)$$

donde R_i es la liberación total del isótopo i (kg de isótopo/kg de combustible), C_i una velocidad de liberación en función del quemado (Kg de isótopo/MWs), B el quemado (MWs/Kg combustible), D el coeficiente de difusión del isótopo (cm^2/seg), a es una distancia de difusión para la liberación de gases (cm) y t el tiempo desde el comienzo de la irradiación.

Para los isótopos de corta vida I^{131} , I^{132} , I^{133} , I^{134} , I^{135} , C^{138} se utiliza una condición para estados transitorios^[7]

$$R_i = \frac{\Delta B}{\Delta t} \left(\frac{1}{1.732E^{10}} \right) Y_i M_i \frac{\frac{3}{a} \sqrt{D\lambda_i}}{\left(\frac{3}{a} \sqrt{D\lambda_i} + \lambda_i \right) \lambda_i}$$

donde ΔB es el quemado durante el paso considerado MWs/KgU, Δt el paso de tiempo, Y_i la tasa de generación del isótopo (átomos de isótopo/fisión), M_i el peso molecular del isótopo (Kg/mol) y λ la constante de decaimiento del isótopo (1/seg).

Para temperaturas arriba de los 1000 K los productos gaseosos de fisión resultan suficientemente móviles como para migrar fuera de la red del combustible.

Los decaimientos para isótopos estables y de larga vida se resumen en la tabla II.1. El factor de conversión de C_i a Y_i en kilogramos de isótopos por MWs es $C_i = \frac{Y_i M_i 10^{-2}}{N_a E_f}$

donde N_a es el número de Avogadro y E_f la energía por fisión (MWs/fisión)^[7,16]. En la tabla II.2 se resumen los isótopos de corta vida.

Tabla II.1: Isótopos estables de I y Cs

Isótopo	Vida-media (años)	$Y_i \times 10^{-2}$	C_i (Kg/MWs)
I-127	estable	0,13	$9,5E^{-12}$
I-129	$1,7e+7$	0,8	$5,94E^{-11}$
Cs-133	estable	5,59	$5,04 E^{-10}$
Cs-135	$2,6e+7$	6,41	$4,98 E^{-10}$
Cs-137	30	6,15	$4,85 E^{-10}$

Tabla II.2: Isótopos de decaimiento rápido de I y Cs

Isótopo	Vida media	Cte Decaimiento (seg^{-1})	tasa
I-131	8,05 días	$9,97 \times 10^{-7}$	$3,1 \times 10^{-2}$
I-132	2,3 horas	$9,17 \times 10^{-7}$	$4,3 \times 10^{-2}$
I-133	20,8 horas	$8,37 \times 10^{-7}$	$6,9 \times 10^{-2}$
I-134	52,5 minutos	$2,22 \times 10^{-7}$	$7,9 \times 10^{-2}$
I-135	6,7 horas	$2,87 \times 10^{-7}$	$6,1 \times 10^{-2}$
Cs-138	32,2 minutos	$3,59 \times 10^{-4}$	$6,6 \times 10^{-2}$

Las figuras II.16 y II.17 presentan una comparación entre el modelo analítico y algunos resultados medidos para la liberación de isótopos de I y Cs.

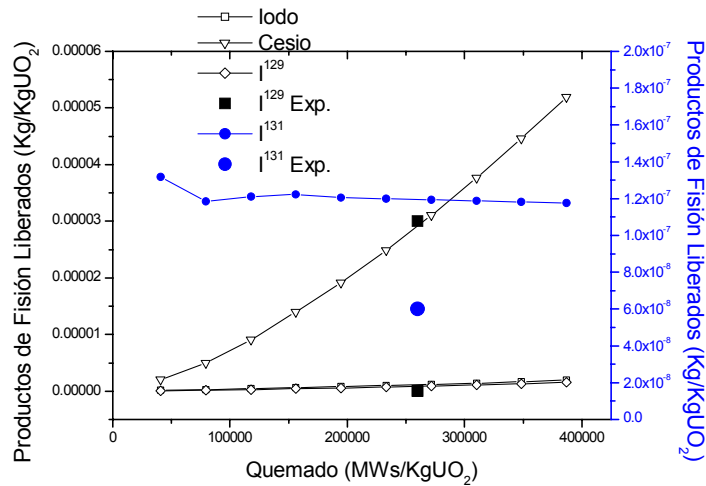


Figura II.16: Productos de fisión liberados para un quemado de $2,610^{+5}$ MWs/KgUO₂. Se grafica el total de Iodo y Cesio liberado y las fracciones de I¹²⁹ e I¹³¹ para una temperatura de 1.800 K. Los puntos representan datos experimentales.

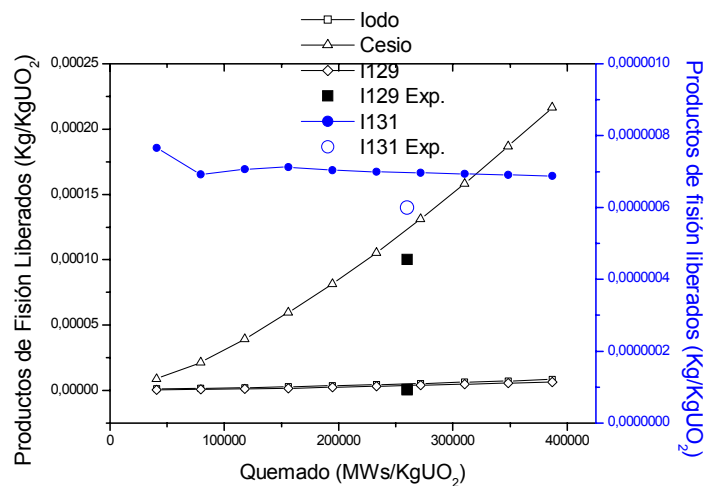


Figura II.17: Productos de fisión liberados para un quemado de $2,610^{+5}$ MWs/KgUO₂. Se grafica el total de Yodo y cesio liberado y las fracciones de I¹²⁹ e I¹³¹ para una temperatura de 2.200 K. Los puntos representan datos experimentales.

14. Modelo de captura de Hidrógeno por el Zircaloy

El modelo provee la fracción en peso de hidrógeno en la vaina durante las temperaturas típicas de operación en el reactor (hasta 650 K). La fracción total de hidrógeno se calcula como suma de tres términos: $H = H_0 + H_1 + H_c$, donde H es la fracción de hidrógeno en ppm, H_0 es la concentración inicial de fábrica, H_1 es la concentración que proviene de la desgasificación interna del agua en el combustible (en ppm) y H_c es la concentración de hidrógeno que proviene del refrigerante. Para el cálculo también se utilizan las dimensiones de la vaina, el tamaño de la capa de óxido sobre la pared externa de la vaina, la temperatura de la vaina y el tipo de reactor (WR o BR).

La concentración de hidrógeno que proviene del refrigerante también se evalúa en la subrutina que calcula el crecimiento de la capa de óxido sobre la vaina y en el cuerpo del programa es posible elegir entre un modelo u otro. H_0 ingresa en el programa en el archivo de entrada, al igual que la cantidad de partes por millón de agua que contiene el combustible^[30, 33,37].

15. Discusión

Cada uno de los modelos incluidos en DIONISIO fue validado en forma separada de su funcionamiento dentro del código. Siempre que esto fue posible, se compararon las predicciones de cada uno de ellos con datos experimentales. Se ha utilizado para cada modelo, ya sea en forma directa o como testigo, el MATPRO, manual de uso especializado para la construcción de códigos, fuente continua de consulta y contrastación de problemas numéricos afines a la simulación de combustibles nucleares.

Muchos de los problemas tratados poseen más de un tratamiento numérico incluido en el código. El usuario es quien determina cuál de ellos estará activo en una dada simulación. El tutorial del código explica cómo y de qué manera la elección de una u otra forma de descripción puede afectar la salida final.

Bibliografía

- [1] J.R. Mathews. The quantitative description of deformation and stress in cylindrical fast reactor fuel pins, *Advances in Nuclear Science and Technology*, Vol.6 Academic Press, (1972).
- [2] G. Delete, M. Charles. Thermal conductivity of fully dense unirradiated UO_2 : a new formulation from experimental results between 100°C and 2500°C and associated fundamental properties. *Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup and its Experimental Support*, IAEA-TECDOC-957, IAEA 203-216 (1997).
- [3] S. Timoshenko. *Theory of elasticity*. McGraw Hill, (1951).
- [4] Penny and Marriot, *Design for creep*, McGraw Hill, (1971).
- [5] S. Harriague, G. Coroli, E. Savino. BACO, a computer code for simulating a reactor fuel rod performance, *Nucl. Eng. and Design* 56 91-103 (1980).
- [6] L.J. Segerlind. *Applied finite element analysis*, 2nd Ed., Wiley (1984).
- [7] *Handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel behavior*, MATPRO version 11, NUREG/CR-0497, TREE-1280 (1979).
- [8] A. Denis, R. Piotrkowski. Simulation of isothermal fission gas release, *J. of Nucl. Mater.* 229 149-154 (1996).
- [9] A. Denis, R. Piotrkowski. A fission gas release model. *Water Reactor Fuel Element Modeling at High Burnup and Experimental Support*, IAEA-TECDOC-957, IAEA 455-465 (1997).
- [10] J.A. Turnbull, R. White, C. Wise. The diffusion coefficient of Fission Gas Atoms in UO_2 . *IAEA TC 659/3.5* 174-181 (1987).
- [11] R. White, M. Tucker. A new fission gas release model. *J. of Nucl. Mater.* 118 1-38 (1983).
- [12] K. Ito, R. Iwasaki, Y. Iwano. Finite element model for analysis of fission gas release from UO_2 fuel. *J. of Nucl. Sci. and Technol.* 22 (2) 129-138 (1985).

- [13] T. Nakajima. A comparison between fission gas release data and FEMAXI-IV code calculations. Nucl. Eng. And Design 101 267–279 (1987).
- [14] D. Stauffer. Introduction to percolation theory. Taylor & Francis, London and Philadelphia, (1985).
- [15] M. Maldovan, A. Denis, R. Piotrkowski. Simulation of isothermal fission gas release. An analytical solution. Nucl. Eng. and Design 187 327–337 (1999).
- [16] D. Olander. Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements, Technical Information Center, USDOE, (1976).
- [17] D. Franklin, J. Roberts, C. Li. Low temperature swelling and densification properties of LWR fuels. J. of Nucl. Mater. 125 96–103 (1984).
- [18] A. C. Marino, E. Savino, S. Harriague. BACO code version 2.20: a thermomechanical description of a nuclear fuel rod, J.Nucl. Mater. 229 155–168 (1996).
- [19] J. N. Reddy. An introduction to the finite element method. Mc Graw-Hill, (1993).
- [20] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor. El método de los elementos finitos. Vol I - Vol II. Mc Graw-Hill, (1994).
- [21] A. Soba, A. Denis. Finite Element Simulation of the Thermoelastic Behavior of a Fuel Rod. Technical Committee Meeting on Fuel Chemistry and Pellet-Clad Interaction Related to High Burnup Fuel, IAEA, September 7-11, Nyköping, Suecia (1998).
- [22] A. Denis, A. Soba. Simulation of Pellet-Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. TECHNICAL COMMITTEE MEETING on NUCLEAR FUEL BEHAVIOUR MODELLING AT HIGH BURNUP AND ITS EXPERIMENTAL SUPPORT, Windermere, 19–23 June (2000).
- [23] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. Theory of elasticity. Pergamon Press, Addison Wesley. (1959).
- [24] H. Cheng Huan, A. Usmani. Finite element analysis for heat transfer. Springer Verlag, (1991).
- [25] K. Ito, M. Ichikawa, T. Okubo, Y. Iwano. FEMAXI-III a computer code for fuel rod performance analysis, Nucl. Eng. and Design 76 3–11 (1983).
- [26] J. K. Fink, L. Leibowitz. Thermal conductivity of zirconium, J.Nucl. Mater. 226 44-50 (1995).
- [27] Y. Iwano. An efficient numerical method for solving creep problems, Nucl. Eng. and Design 88 333–339 (1985).
- [28] A. Levy, B. Pifko. On computational strategies for problems involving plasticity and creep, Int. Journ. Num. Meth. Eng. Vol. 17 747-771, (1981).
- [29] International Atomic Energy Agency, Fuel Modelling at extended burnup, IAEA–TECDOC–998, IAEA (1998).
- [30] A. C. Marino, E. E. Perez, P. Adelfang. Irradiation of Argentine (U,Pu)O₂ MOX fuels. Postirradiation results and experimental analysis with the BACO code, J. of Nucl. Mater. 229, 169-186, (1996).
- [31] R. Hill. The Mathematical Theory of Plasticity. Clarendon, Oxford, (1950).
- [32] D. R. Olander, Thermodynamics and transport processes in reactor fuel. *Pure & App. Chem.*, Vol. 67, No. 6, pp. 1003-1010, (1995).

- [33] F. Nagase, T Otomo, H. Uetsuka. Oxidation Kinetics of Low-Sn Zircaloy-4 at the Temperature Range from 773 to 1,573K. *Jr. Nucl. Sci. and Technology*. Vol. 40, No. 4, p. 213–219 (2003)
- [34] Termohidráulica de reactores nucleares. Curso II: Hidráulica. Maestría en reactores nucleares. 2003. David Parkansky. Unidad de Actividad Reactores y Centrales Nucleares.
- [35] H. Bailly, D. Menessier, C. Prunier. The nuclear fuel of pressurized water reactors and fast reactors design and behaviour. Diffusion editions Tec&doc, (1999).
- [36] S. Harriague, G. Coroli, E. Savino. BACO (BARRA COmbustible), a computer code for simulating a reactor fuel rod performance, *Nuc. Eng & Design*. 56 91-103 (1980).
- [37] G.A Berna. FRAPCON-2: A computer code for the calculation of steady state thermal-Mechanical behavior of oxide fuel rods. NUREG/CR-1845, (1980).
- [38] L. Burgeois, P. Dehaut, Pore Migration in UO₂ and grain growth. *J. Nucl. Mat*, 295, 73-82 (2001).
- [39] J. Carbajo, G. Yoder, S. Popov, V. Ivanov. A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ Fuels. *J. Nucl. Mat*, 299, 181-198 (2001).
- [40] A.J. Anderson, R.B.Thompson, C.S. Coox. Ultrasonic measure of the Kearns texture factors in Zircaloy, Zirconium and Titanium. *Metalurgical and Materials Transactions, A, V* 30A, (1999).
- [41] G. Bertolino, G. Meyera, J. Perez Ipiña. Mechanical Properties Degradation at Room Temperature in ZRY-4 by Hydrogen Brittleness. *125 Materials Research*, Vol. 5, No. 2, 125-129, (2002).
- [42] V.V. Rondinella. High Burn-Up Fuels for LWRs 3.3 Physics properties of fuels at high burn-up (I) 2005 Frédéric Joliot/Otto Hahn Summer School, Karlsruhe, (2005).
- [43] A.Denis, A. Soba. Simulation of Pellet-Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. *Nuclear Engineering and Design* 223 pps 211-229 (2003).
- [44] K. Bathe, *Finite Element Procedures*, PRENTICE HALL, (1996).
- [45] Y. C. Fung, *Foundations of Solid Mechanics*, PRENTICE HALL, (1965).
- [46] J.B. Ainscough. Isothermal grain growth kinetics in sintered UO₂ Pellets, *J. Nucl Mater*, 49 117 (1973/74).
- [47] R.N. Singh. Isothermal grain growth kinetics in sintered UO₂ Pellets. *J. Nucl Mater*. 64 174 (1977).

III. TRATAMIENTO DEL GAP Y DEL PROBLEMA DE CONTACTO VAINA-PASTILLA

1. La conductancia térmica del gap (abierto/cerrado)

El tratamiento del gap en DIONISIO deviene en uno de los aspectos fundamentales del código ya que la distribución de temperatura y el modo de extracción del calor del sistema están fuertemente relacionados a la presencia o no de gap, el ancho del mismo y el gas que lo llena. Asimismo, dicha distribución térmica es condicionante a todo el resto del cálculo pues la mayoría de los fenómenos involucrados dependen de la temperatura y/o de los gradientes térmicos que se producen en el sistema. Por eso mismo determinar la conductividad térmica de los materiales implicados ha llevado una gran parte del trabajo experimental relacionado a los componentes de reactores nucleares generando, especialmente para el combustible y la vaina, modelos ampliamente validados. Sin embargo para el caso de la conductividad del gap aún hoy existen baches importantes en dos aspectos fundamentales. Por un lado existen pocos datos experimentales; por otro, los modelos teóricos propuestos no son válidos para todo el rango de exigencias a las que deben responder los combustibles durante la historia de potencia completa. Son muchas las situaciones que “vive” el gap a lo largo del tiempo de permanencia dentro de un reactor: puede permanecer abierto durante gran parte de su historia mientras que la composición de gases, (debido a la liberación durante el quemado de productos de fisión gaseosos de baja conductividad), la temperatura y la presión interna del elemento, varían con el tiempo de irradiación; o puede cerrarse para producir contacto vaina-pastilla (PCMI, Pellet Cladding Mechanical Interaction), el cual dependerá del modo de contacto entre ambas superficies y de la rugosidad de las mismas. Estas situaciones también dependen del tipo de combustible, del material de la vaina y de las diferentes exigencias a las que someta a la barra la historia de potencia del reactor. Por otro lado, las variables involucradas toman valores en un amplio rango posible: por ejemplo la presión interna del gas de llenado va desde pocas atmósferas al comienzo de la vida hasta las 77-100 al final de la vida; en el caso de gap cerrado, la presión de contacto, parámetro que resulta difícil de determinar, puede pasar de unos pocos MPa hasta alcanzar valores de 50 MPa.

En la referencia [10] puede hallarse una revisión de los modelos conocidos para la conductancia del gap entre UO_2 y Zircaloy, en los casos abierto y cerrado. A continuación se resume el conjunto de modelos seleccionados para DIONISIO que da respuesta a la mayor cantidad de situaciones vividas por el elemento combustible en operación comparándolo con algunos datos experimentales, poniendo especial atención en las suposiciones y casos particulares que otros modelos no predicen. En general, se observa que elegir un modelo determinado supone resignar una respuesta a alguno de los factores que influyen en el problema.

Modelo de conductancia del gap

Gap abierto: El primer mecanismo de transferencia de calor con gap abierto es el de conducción a través de la mezcla gaseosa que llena el espacio pastilla-vaina. Al comienzo de la historia de potencia dicho gas es helio, en general a presión atmosférica o presurizado a unas pocas atmósferas. Bajo irradiación se liberan productos de fisión gaseosos: básicamente

xenón (90%) y kriptón (10%) más otros en menor cuantía, que generan una mezcla de menor conductividad que el helio puro. Las leyes de conductividades gaseosas están dadas por funciones del tipo^[3, 4]:

$$k_i = A_i T^{B_i}$$

donde A_i y B_i son constantes e $i = \text{He, Xe, Kr, otros}$. La composición del gas es una función del tiempo de irradiación y la conductividad resultante de la mezcla se calcula en cada instante a partir de la fórmula^[4]:

$$k_{\text{gasmix}} = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i$$

$$\beta_i = \frac{k_i}{x_i + \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n \psi_{ij} x_j}$$

donde

$$\psi_{ij} = \phi_{ij} \left[1 + 2.41 \frac{(M_i - M_j)(M_i - 0.142M_j)}{(M_i + M_j)^2} \right]$$

$$\phi_{ij} = 2^{-3/2} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{k_i}{k_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j} \right)^{1/4} \right)^2$$

M_i y x_i son el peso molecular y la fracción molecular de la especie i respectivamente. Al mismo tiempo, fenómenos como la densificación, el swelling, el creep, las deformaciones termoelastoplásticas, la relocación y la fractura del combustible producen una variación en el ancho del gap con el tiempo de operación del reactor. Si el gap es mucho más grande que el camino libre medio de las moléculas del gas, la conductancia toma la fórmula sencilla:

$$h_{\text{gap}} = \frac{k_{\text{gasmix}}}{A_{\text{gap}}(t)}$$

donde k_{gasmix} es la conductividad de la mezcla y $A_{\text{gap}}(t)$ el ancho del gap que depende del tiempo. La mencionada disminución del espacio disponible para el gas de llenado así como la liberación de nuevos gases producen la variación de la presión interna del elemento que puede alcanzar hasta 100 atmósferas al final de la vida. Dicha presión resulta de gran influencia al considerar gaps próximos a cerrarse, como se verá más adelante^[3, 4].

Cuando las dos superficies combustible-vaina se aproximan hasta distancias del orden de los caminos libres medios de las moléculas del gas de llenado, la temperatura inmediatamente adyacente a las superficies no es igual a la temperatura superficial, hallándose una discontinuidad sobre las paredes que depende del libre camino medio de las moléculas de cada componente gaseosa. Dicha discontinuidad se denomina salto en temperatura (“thermal jump”) y modifica la conductancia del medio en la forma:

$$h_{\text{gap}} = \frac{k_{\text{gasmix}}}{A_{\text{gap}}(t) + J_V + J_F}$$

donde los coeficientes J_V y J_F son las distancias extrapoladas en la vaina y el combustible respectivamente y dependen del tipo de material, la temperatura superficial, la presión interna

del gas y de un parámetro de acomodación que caracteriza el tamaño del salto térmico de acuerdo al tipo de gas y material sobre el que se refleja.

De entre los diferentes modelos propuestos en la literatura para la conductancia entre superficies cercanas^[1,3,4,8] se elige para DIONISIO el que toma la forma:

$$h_{gascond} = \sum_{i=1}^n \frac{\beta_i x_i}{A_{gap}(t) + \frac{4}{\alpha_i P} \left(\frac{\gamma_i - 1}{\gamma_i + 1} \right) \sqrt{\frac{\pi M_i T_{gas}}{2R}} \beta_i}$$

$$\beta_i = \frac{k_i}{x_i + \sum_{\substack{i \neq j \\ j=1}}^n \psi_{ij} x_j}$$

medida en $W m^{-2} K^{-1}$. Donde T_{gas} es la temperatura, P la presión interna, γ el cociente de los calores específicos y α_i el coeficiente de acomodación. El modelo es válido hasta un ancho de gap del orden de la rugosidad media de ambas superficies y resulta adecuado ya que se calcula en función de cantidades promediadas, de evaluación sencilla de acuerdo a las variables que el código maneja. El coeficiente de acomodación térmica del gas sobre una

superficie particular se define como $\alpha = \frac{T_r - T_0}{T_s - T_0}$ $0 \leq \alpha \leq 1$, donde T_0 es la temperatura de

las moléculas que arriban a la superficie de temperatura T_s y rebotan con temperatura T_r ; si $T_r=T_s$, α es 1 y las moléculas que rebotan están completamente equilibradas con la superficie. Para superficies rugosas estos coeficientes aumentan debido a la mayor probabilidad de rebotes que una superficie irregular genera.

Tabla III.1: Valores de coeficientes de acomodación térmica tomada de^[4]

Gas	α gas-Zircaloy	α gas - combustible
He	0,071	0,34
Ar	0,16	0,8
Kr	0,85	0,85
Xe	0,85	0,85
H ₂	0,071	0,34
O ₂	0,2	0,85

Los valores de los saltos térmicos para una mezcla de gases se pueden estimar directamente de los saltos térmicos de los gases puros. Para temperaturas entre 150-300 °C, (J_V+J_F) es del orden de 10^{-3} cm para He, 5×10^{-4} cm para el Ar y menor que 10^{-4} para el Xe. La expresión dada para una mezcla es

$$J_m = \frac{\sum x_i J_i / \sqrt{M_i}}{\sum x_i / \sqrt{M_i}}$$

Contribución de la radiación: Cuando el gap se encuentra abierto y la temperatura es mayor a 300 °C, es necesario contemplar la contribución a la conductancia dada por la radiación de cada superficie. Una expresión para este término está dada en Olander^[3] como

$$h_{Rad} = \frac{4\sigma T^3}{(1/\varepsilon_V) + (1/\varepsilon_F) - 1}$$

donde ε_i es el factor de emisividad de cada superficie. La temperatura utilizada es el promedio entre la temperatura exterior del combustible y la interior de la vaina. $\sigma=5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ es la constante de Stefan-Boltzman. Los valores para los coeficientes de emisividad pueden obtenerse de las expresiones:

$$\varepsilon_V = 0.1906 - 0.2166 \exp(-3.79210^{-3} T)$$

$$\varepsilon_F = 0.85$$

con T en el rango (373 – 1900) K. Para gaps pequeños, la contribución radiante es muy chica comparada con la conducción.

Gap cerrado: En condición de contacto vaina-pastilla, suponiendo que ambas superficies son rugosas, una parte del calor es transportada por conducción entre los sólidos en las regiones de contacto físico y otra por conducción gaseosa en las regiones en donde no hay contacto, dependiendo también de la forma del mismo (plástico o elástico) además de la magnitud de las rugosidades de cada superficie y la dureza de las mismas. La figura III.1 representa el fenómeno idealizado de dos superficies rugosas en contacto en donde δ es el ancho medio de la capa de contacto, aproximadamente igual a la suma de las rugosidades medias de los dos sólidos.

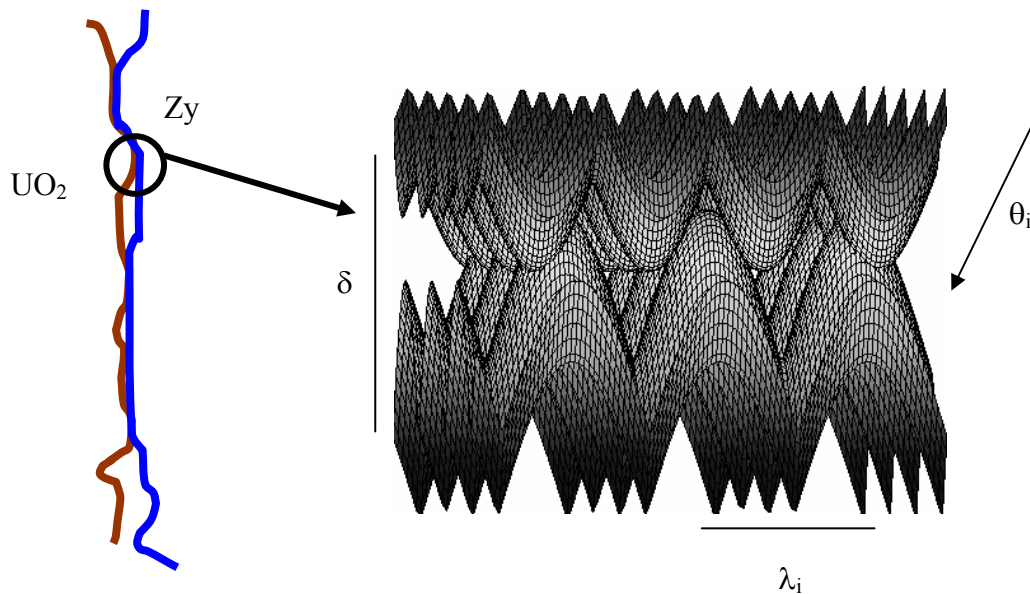


Figura III.1: Esquema idealizado de dos superficies de contacto con diferentes rugosidades.

Existen diversos estudios analíticos para obtener una conductancia de contacto. Centikale and Fishenden^[1] representaron cada porción de contacto sólido por un cilindro de radio R_1 . Para N cilindros en contacto por unidad de área, el área asociada a cada cilindro será $\pi R_2^2 = \frac{1}{N}$ donde R_2 es el radio de la zona alrededor del contacto efectivo que forma la región interfacial. Un análisis de la conducción del calor en esa geometría idealizada nos da una expresión para la conductancia del gap en contacto sólido-sólido toma la forma:

$$h_s = \frac{1}{R_1} \left(\frac{2k_F k_V}{k_F + k_V} \right) \frac{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^2}{\tan^{-1} \left(\frac{R_2}{R_1} - 1 \right)}$$

La fracción del área de contacto $(R_1/R_2)^2$ se incrementa con la presión interfacial P_i a causa del aumento de la deformación y puede aproximarse como

$$\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^2 = Cte_1 \left(\frac{P_i}{H} \right)^n$$

donde H es la dureza MEYER⁵ de la superficie más blanda y n un coeficiente a determinar según el modelo. Considerando que el radio medio del contacto de la superficie 1 es proporcional a la raíz cuadrada del radio medio de la rugosidad ($R_1 = Cte_2 \delta^{1/2}$), y que en la expresión para h_s es $R_1/R_2 \ll 1$ y el arco tangente toma el valor $\pi/2$, la conductancia estará dada por la ecuación

$$h_s = C \frac{P_i}{H \delta^{1/2}} \left(\frac{2k_F k_V}{k_F + k_V} \right)$$

siendo el valor estimado óptimo de la constante C igual a la unidad. La suma de las rugosidades medias de los dos sólidos se puede aproximar por ($\sim 4.4 \times 10^{-6}$ m). Este modelo puede mejorar levemente si se considera que el radio de contacto varía con una distribución seudo uniforme, esto quiere decir que el área alrededor del contacto es proporcional a su tamaño. De este modo, la forma final de la conductancia de dos sólidos en contacto será^[3]:

$$h_s = 1.45 \left(\frac{2k_F k_V}{k_F + k_V} \right) \left(\frac{P}{H} \right)^n \frac{\sqrt{(\tan \theta_F)^2 + (\tan \theta_V)^2}}{\sqrt{(\delta_1^2 + \delta_2^2)/2}}$$

donde $\tan \theta_F$ y $\tan \theta_V$ representan a las pendientes de las rugosidades de ambas superficies (ver figura III.1). Para una superficie ideal (que puede representarse por una función trigonométrica uniforme), $\tan \theta = \frac{2\delta}{\lambda}$ donde λ es la distancia media entre picos de cada superficie.

Validación de los modelos de conductancia térmica

La conductancia total del gap correspondiente a la suma de los tres términos descriptos $h_{tot} = h_{rad} + h_{gasmix} + h_s$ se utiliza dentro de las ecuaciones de distribución de temperatura presentadas en el capítulo II. La conductancia ingresa en la condición de contorno de transferencia entre la pastilla y la vaina.

La primera observación que surgió a este modelo fue una discrepancia entre las conductancias gaseosas numéricas y las medidas en función de la presión del gas dentro del elemento, en especial para presiones bajas (menores a 2 atmósferas) y en presencia de helio

⁵ Un modelo para determinar la dureza Meyer del Zircaloy utilizada está dado en MATPRO por $H = \frac{4L}{\pi d^2} = \exp(2.6034 + T(-2.6394 \times 10^{-2} + T(4.3502 \times 10^{-5} + T2.5621 \times 10^{-8})))$

en el llenado. Para suplir esa discrepancia se agregó un término a la conductancia que depende de la presión interna y de la cantidad de He en la mezcla. Dicha componente, que se ajusta en forma empírica, también contempla la variación en las rugosidades de las paredes de la vaina y de la pastilla.

$$h_{adicional} = 4.69 \times 10^{-6} \exp(22.85x_{He}) \exp(-1.2 \times 10^{-4} (\delta_{UO_2} + \delta_{Zy}) (P_{gas} - 10)^2)$$

donde x_{He} representa el porcentaje de He en la mezcla, P_{gas} es la presión interna del gas en bar y δ_i es la rugosidad del material i. Con dicho término agregado se compara el modelo con datos experimentales. En la figura III.2 se presentan resultados del modelo con diferentes gases de llenado del gap comparados con resultados experimentales^[8]. En la figura III.3 el modelo se contrastó en detalle con datos obtenidos de la literatura^[8, 9, 10, 11] en donde se presentan valores de conductancias para diferentes rugosidades medias. En el gráfico se observan los intervalos abarcados en tres rangos distintos de rugosidades del UO₂ y de la vaina de Zircaloy, 0.4-0.8, 1.0-1.5 y 1.8-2.5 μ en función de la presión de contacto. El resultado numérico considerando una rugosidad media de 0.6, 1.25 y 2.15 μ m cae dentro del rango de los valores experimentales.

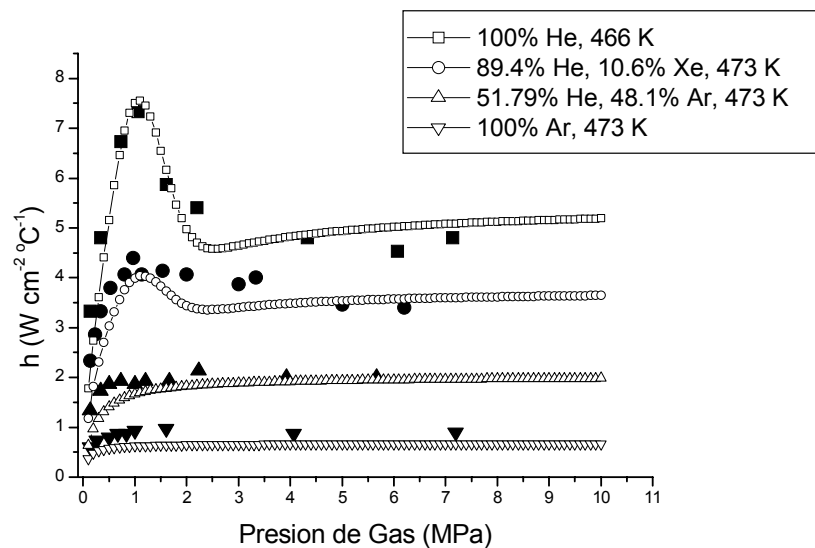


Figura III.2: Conductancia en función de la presión interna gaseosa para diferentes mezclas. Los resultados concuerdan con los proporcionados por Ainscough^[8].

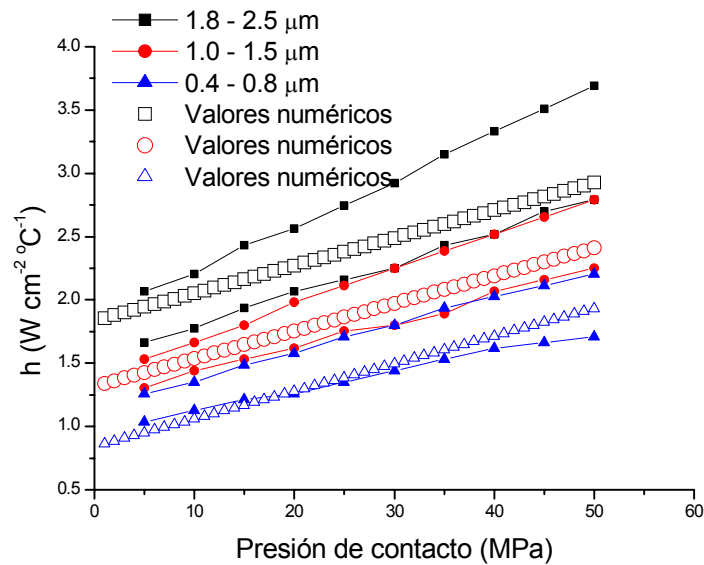


Figura III.3 Modelo de conductancia para diferentes rugosidades y presiones de contacto.

Para probar el modelo en condiciones realistas bajo irradiación se utilizaron los casos que compusieron el ejercicio FUMEX I^[12], comparando las mediciones de temperatura central alcanzada en el combustible con las predichas por otros códigos y por DIONISIO. Se observa en la figura III.4 una aproximación aceptable a los resultados y una dispersión en muchos casos inferior a las predichas por otros códigos, teniendo en cuenta la multiplicidad de situaciones presentes en las historias de potencia preestablecidas en FUMEX I.

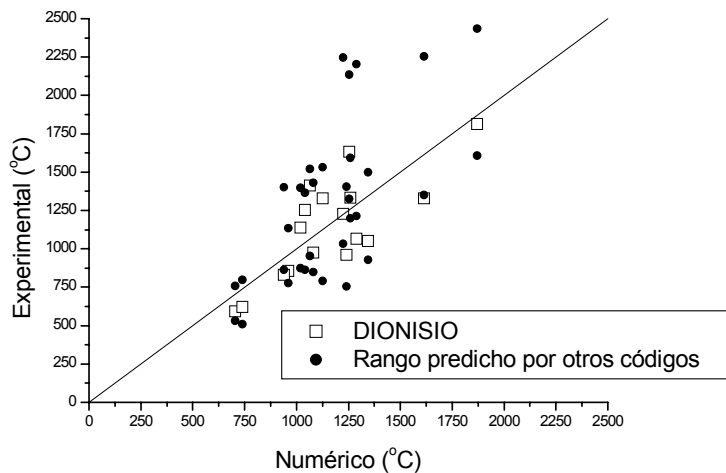


Figura III.4: Temperatura central experimental comparada con valores numéricos de DIONISIO y otros códigos.

2. Modelo mecánico de contacto PCMI

El problema del PCMI (Pellet-Cladding Mechanical Interaction) ha sido de particular interés en la industria nuclear desde sus primeros prototipos de elementos combustibles. Pero a partir de los estudios llevados a cabo con el fin de incrementar el quemado y la vida útil de

los combustibles ha tomado un nuevo enfoque tanto en el aspecto teórico como en el de su simulación, ya que el daño de las vainas por este mecanismo es el límite más severo que se impone al elemento combustible y su vida dentro del reactor. Por otro lado, aún a bajos quemados, el PCMI, sumado a la corrosión bajo tensión, es un factor limitante de rampas severas así como causante de posibles fallas en operación. Para analizar el fenómeno se deben tener en cuenta diversos aspectos que hacen al mismo:

1) La fragmentación de la pastilla de combustible que se produce durante las primeras rampas de la historia de potencia debido a las tensiones térmicas. Estas fisuraciones se orientan preferentemente en dirección radial y axial, reducen las tensiones de la pastilla y disminuyen el espacio entre la vaina y la pastilla contribuyendo a la denominada relocalización del combustible.

2) Con el paso del tiempo, el creep de la vaina y el swelling de la pastilla llevan al gap a cerrarse total o parcialmente. El aumento radial de la pastilla puede dar lugar, en caso de gap cerrado, a arrugas circunferenciales en la superficie de la vaina, conocida como “efecto bambú” (figura III.5).

3) La dilatación térmica de la pastilla sumada al creep y al swelling producen la gradual reducción del dishing y los espacios existentes entre las fisuras generando nuevas improntas en la vaina (arrugas secundarias).

4) En condiciones de fuerte PCMI, el estado mecánico del sistema pastilla-vaina ya no puede diferenciar tensiones externas de las internas, moviéndose casi como un conjunto. La vaina acomoda los fragmentos de la pastilla y ésta sostiene a la vaina. Por otro lado, la enrarecida atmósfera debido a la liberación de productos de fisión (sobre todo los corrosivos), comienza a generar el fenómeno de SCC sobre todo en zonas propicias para ello (figura III.6).

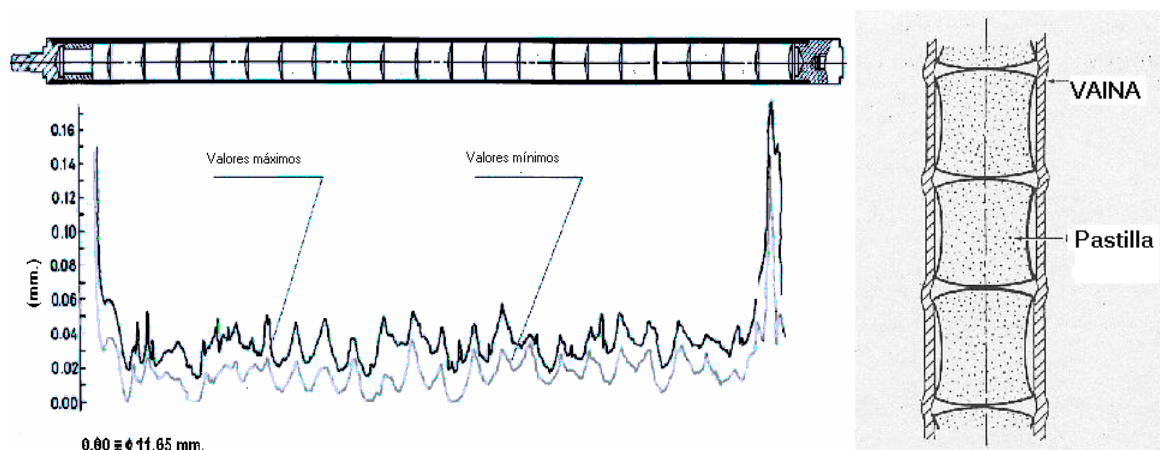
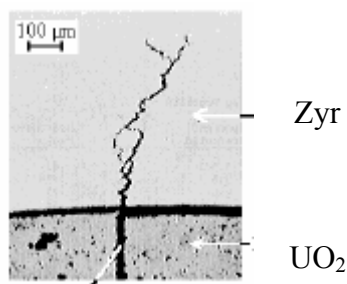


Figura III.5: Deformación localizada de la vaina debida al PCI. Efecto “bambú”.

Figura III.6: Fisura de la vaina inducida por SCC en condiciones de PCMI



Si bien los fenómenos de creep y swelling son los responsables del PCMI durante la mayor parte del tiempo en que éste se produce, las fuertes dilataciones térmicas sumadas al SCC son los fenómenos más importantes en cuanto a la posible rotura de la vaina. A esto último se debe agregar el posible contacto diferenciado que se produce frente a dos fragmentos de la pastilla fisurados. Siendo el análisis realizado en DIONISIO bidimensional, este último aspecto no es tenido en cuenta en el cuerpo del programa ya que requiere además un análisis detallado de la tensión tangente (“hoop stress”) así como la posibilidad de fricción entre la pastilla y la vaina en dirección tangencial. Este análisis se realiza en forma independiente en el código como se verá en el capítulo IV.

El contacto numérico se expresará por medio de restricciones al prohibir la interpenetración de las superficies. Sobre cada uno de los dominios se utiliza una formulación irreducible en los desplazamientos y multiplicadores de Lagrange en el tratamiento de las fuerzas sobre la frontera para unir los subdominios mencionados. Todo esto deriva de un principio de trabajos virtuales suponiendo una ecuación de continuidad para los desplazamientos en la frontera entre ambos dominios en donde no se considera además la existencia de deslizamiento debido a que para el tratamiento del elemento combustible se toma sólo media pastilla y se restringe el grado de libertad de traslación. Esta aproximación no está alejada de la realidad ya que la pila de pastillas no permite el libre deslizamiento sobre la pared de la vaina, con excepción de las pastillas de los extremos.

Debido a que los modelos son bidimensionales, restringiremos el análisis de todos los casos de prueba a problemas de tensión y/o deformación placa o con simetría de revolución, en el intento por chequear los algoritmos en las mismas condiciones que los casos analíticos [17, 18,19].

Algoritmo de resolución numérica

El algoritmo utilizado para resolver el problema de contacto es tomado y adaptado de la Bathe et al [21], en donde se realiza un tratamiento general del problema del contacto plano y axisimétrico en donde se contempla la posibilidad de fricción, deslizamiento y separación entre los cuerpos involucrados [13,21]. Para el presente trabajo se adoptó ese algoritmo para el tratamiento particular de problemas de contacto en casos de deformación plana o simetría axial en donde la condición de contacto se considera siempre sin deslizamiento entre los cuerpos. El algoritmo presenta algunas características particulares: a) el potencial total de las fuerzas de contacto se incluye en la formulación variacional para reforzar las compatibilidades geométricas a lo largo de la superficie de contacto; b) en la región de contacto, las tensiones de superficie se evalúan a partir de las fuerzas aplicadas, consideradas como fuerzas nodales equivalentes (en el sentido de los trabajos virtuales); c) esas tensiones de superficie se utilizan en la decisión de cuándo un nodo permanecerá en contacto fijo, sufrirá deslizamiento o se separará del receptor; d) el número de ecuaciones que determinan las condiciones de contacto se ajusta dinámicamente a lo largo de cada iteración.

Como resultado del contacto entre dos superficies se desarrollan fuerzas iguales y de sentido opuesto sobre la fuente y el receptor que serán las responsables de eliminar la superposición numérica. Las fuerzas normales son de carácter compresivo mientras que las tangenciales deben satisfacer la ley de fricción correspondiente.

De acuerdo a la figura III.7 y su magnificación, un nodo K de la fuente se supone en contacto cuando dicho nodo penetra la superficie del receptor en la iteración $(i-1)$. En ese caso la fuerza de contacto en la iteración (i) es cero y se genera en la iteración siguiente al eliminar la superposición entre los cuerpos. La figura muestra cómo el nodo K que pertenece al cuerpo fuente entra en contacto con el segmento j con nodos A y B del receptor. Los parámetros involucrados son:

x_A x_B x_K = coordenadas globales de los nodos A , B y K .

x_C = coordenada global del punto en donde se producirá el contacto físico con el receptor.

Δ_K = superposición.

d_j = largo del lado j .

n_s y n_r = vectores unitarios a lo largo de las direcciones (s, r) del sistema isoparamétrico de coordenadas a lo largo del receptor.

β_j = parámetro que señala la localización física del punto de contacto.

λ_K = fuerza de contacto del nodo K y el punto C . Notar que la fuerza se distribuye sobre el lado j con una interpolación lineal.

$$\lambda_A = -(1-\beta_j)\lambda_K$$

$$\lambda_B = -\beta_j\lambda_K$$

Para la formulación de este problema se utiliza la notación incremental de Bathe^[13] a la que se impone la condición de contacto agregando a las condiciones del potencial variacional usual, el potencial de las fuerzas de contacto con las restricciones compatibles con los desplazamientos del contorno, obteniéndose para el funcional la expresión $\Pi_c = \Pi - \sum_k W_k$ donde Π es el potencial usual sin las condiciones de contorno y la sumatoria es el incremento dado por las fuerzas de contacto en cada nodo k . Este término se interpreta como la contribución del multiplicador de Lagrange para imponer la condición de contorno. Este funcional varía de acuerdo a los parámetros involucrados según sean los diferentes comportamientos del problema, esto es si se considera el caso con o sin deslizamiento entre los cuerpos, y es construido de modo de generar la ecuación incremental apropiada en términos de los trabajos virtuales.

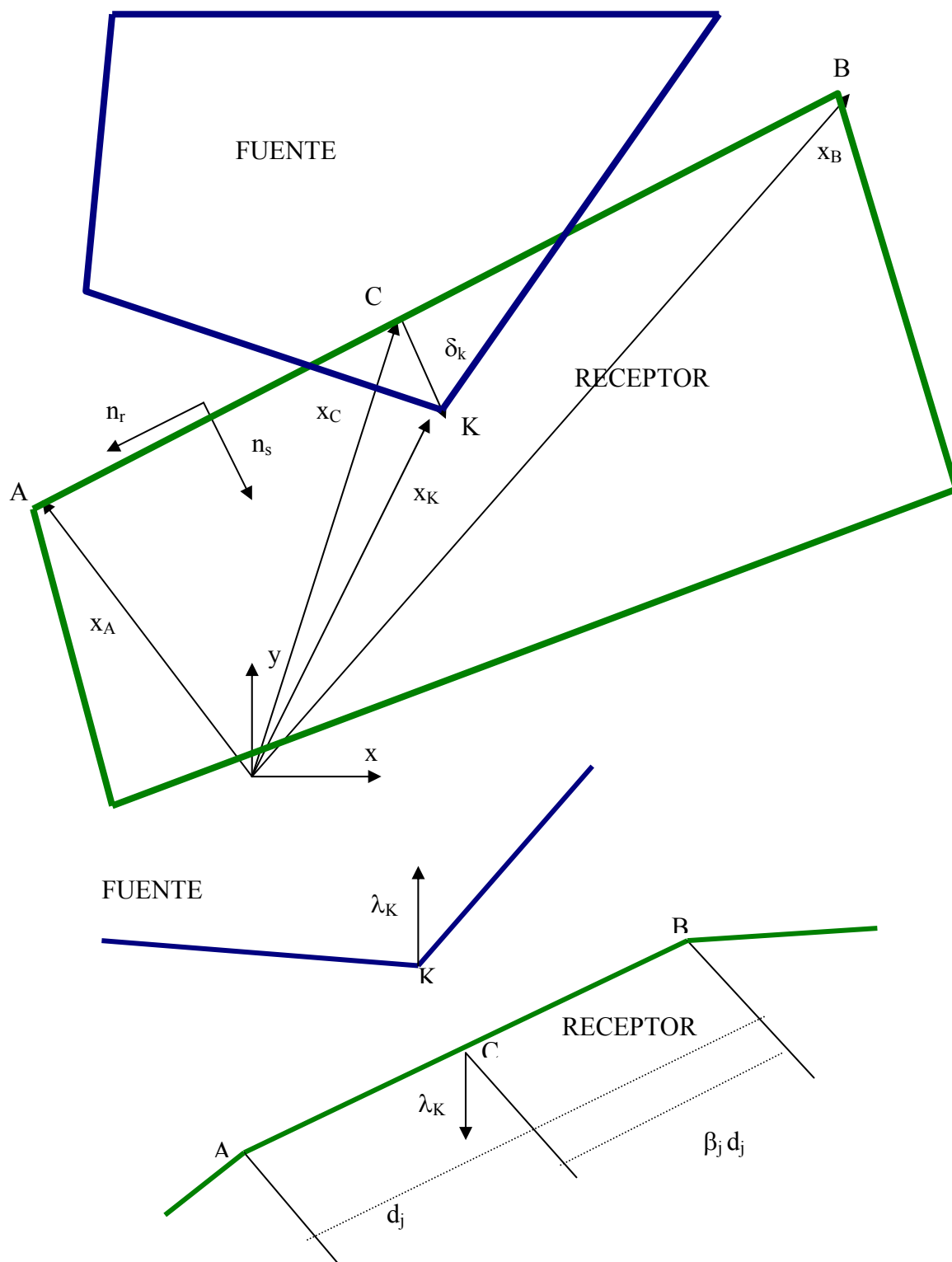


Figura III.7: Esquema de los parámetros involucrados entre el RECEPTOR y la FUENTE.

iteración (i-1), mientras que para los perteneciente a las superficies contiene la fuerza correspondiente a $R_c^{(i-1)}$.

A partir del vector diferencia de fuerzas nodales, por una interpolación lineal de los desplazamientos, se calculan las tensiones normales y tangentes sobre cada nodo involucrado y de allí se obtienen los correspondientes incrementos en la fuerza de contacto λ_H , donde $H = K, A$ y B para el paso (i-1) que servirán de entrada en la siguiente iteración

En el caso general mencionado, a partir de las tensiones normales y tangenciales, se determinará la condición de separación, deslizamiento o soldadura, de acuerdo a los coeficientes μ_s y μ_d entre los materiales^[19,21].

Casos de prueba

Un caso típico de análisis del contacto entre dos materiales, que posee solución analítica, viene determinado por el conjunto de los denominados “problemas de Hertz”, el cual consiste en una esfera un o cilindro de un dado material que contacta a una superficie plana. Dicho problema se resolvió en simetría axial y en deformación plana utilizando el algoritmo de DIONISIO. En la figura III.8 se adjunta una malla tipo con la que se realizó el análisis en donde se observan los elementos “suaves” que restringen los grados de libertad de traslación de la fuente. El gráfico de la figura III.9 compara el vector desplazamiento sobre el plano $z=0$ con la solución analítica y con la obtenida por el programa COSMOS. Las figuras III.10 y III.11 grafican las componentes radial y tangencial del tensor de tensiones sobre el plano $z=0$ y las componentes radial y axial del mismo tensor sobre el eje z dentro del receptor. Las tensiones calculadas analíticamente corresponden al caso fuera de la región de contacto, es decir en la superficie exterior al círculo de contacto de radio $a \approx 0.2459$.

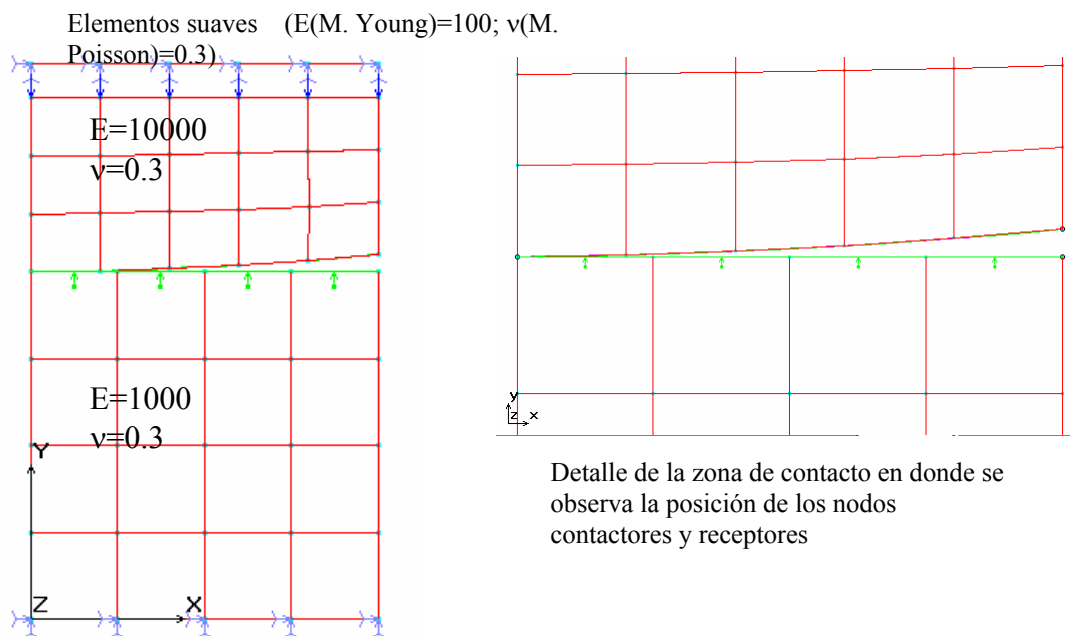


Figura III.8: Malla de elementos finitos para el problema de Hertz. Se detallan los nodos con desplazamientos prescritos y una ampliación de la zona de contacto.

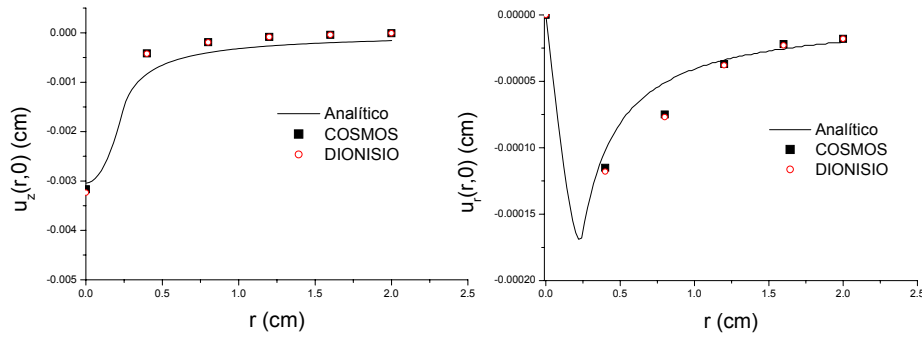


Figura III.9: Desplazamientos sobre el plano $z=0$ en el problema de Hertz axisimétrico. Caso analítico comparado con el resultado numérico.

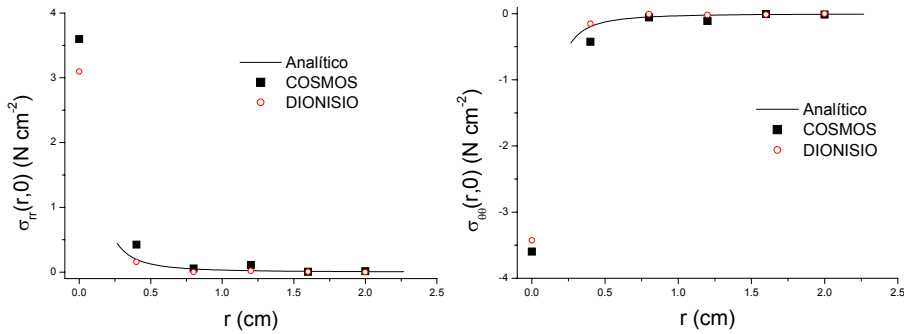


Figura III.10: Tensor de tensiones sobre el plano $z=0$ en el problema de Hertz axisimétrico. Resultados analíticos y numéricos. El caso analítico se grafica fuera de la región de contacto. $R > a \approx 0.2459$.

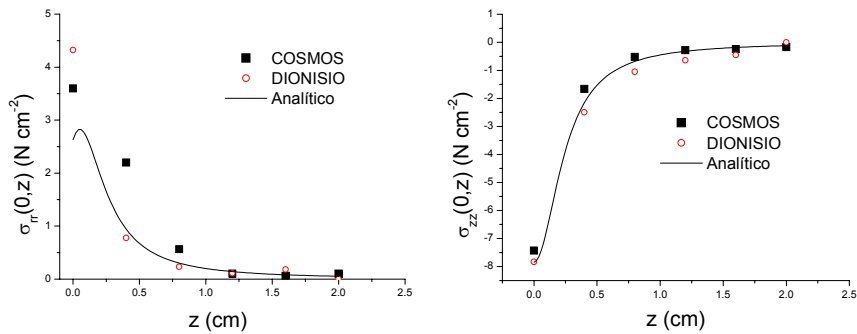


Figura III.11: Tensiones sobre el eje z ($r=0$) en el receptor. Resultados analíticos y numéricos.

En la tabla III.2 se adjuntan los resultados de fuerza de contacto normal y cantidad de deformación provistos por DIONISIO y el programa COSMOS comparados con los calculados analíticamente. Tanto los gráficos como la tabla muestran una notable paridad en las predicciones.

Tabla III.2: Penetración y fuerza de contacto, resultado analítico y numérico.

	Analítico	COSMOS	DIONISIO
δ deformación plana (cm)	-0.133×10^{-1}	-9.7813×10^{-2}	-9.0866×10^{-2}
δ en simetría axial (cm)	-0.3×10^{-2}	-3.1674×10^{-2}	-3.2346×10^{-2}
F contacto normal en deformación plana (N)	-	2.6415	2.5244
F contacto normal en simetría axial (N)	0.1357	0.15855	0.1618

3. Problema de contacto Vaina-Pastilla bajo irradiación

Experimentos MOX^[32]

En el marco del programa óxidos mixtos (U,Pu)O₂ llevado a cabo en la CNEA, se construyeron prototipos que fueron irradiados en el reactor HFR-PETTEN (Holanda). Dos de las barras que componían el experimento, A.1.2 y A.1.3, fueron sometidas a una historia de potencia similar, hasta alcanzar un quemado de aproximadamente 15 MWd/KgU durante 531 días efectivos de irradiación. Posteriormente a la barra A.1.3 se la sometió a una fase final de grandes rampas de potencia altamente exigentes. Durante esta última fase se detectó un incremento en la actividad del circuito primario por lo que el experimento tuvo que ser interrumpido. Una inspección visual detectó un pequeño agujero circular en la vaina similar a los producidos por fallas SCC. Se observaron, asimismo, las deformaciones tipo bambú sobre la vaina, medidas por la técnica de corrientes de Eddy (figura III.12).

Se utiliza el código DIONISIO para estimar la deformación final de la vaina así como el ancho de gap a fin de vida en cada barra.

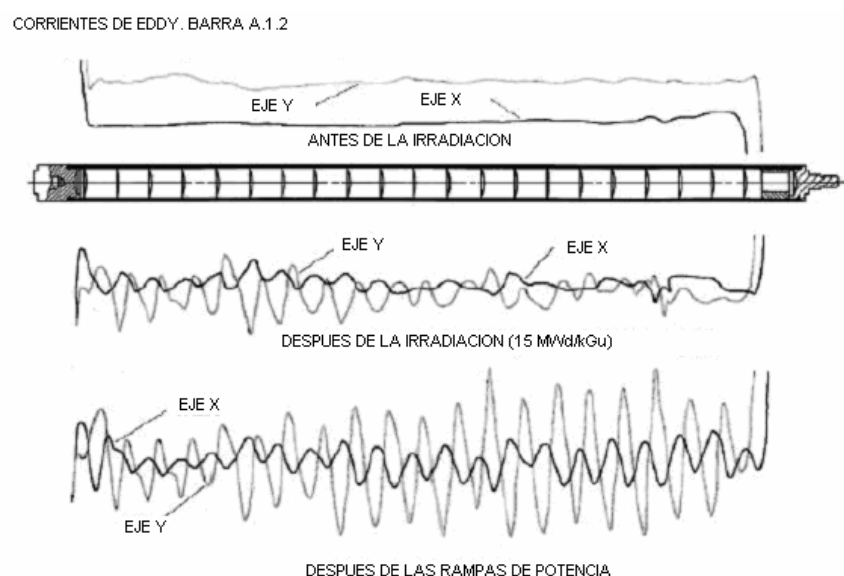


Figura III.12: Deformaciones de la barra A.1.3 medidas por la técnica de corrientes de Eddy.

En las figuras III.13 se presenta la evolución de los radios central y superior de la vaina en la zona de simulación, que corresponden al plano central y al extremo de una pastilla-vaina respectivamente. También se grafica la diferencia entre ambas medidas para comparar con el resultado medido experimentalmente a fin de vida para las barras A.1.2 y A.1.3. Los resultados numéricos coinciden con los medidos además de observarse la diferencia relativa entre las deformaciones de la primera barra, sometida a una potencia estacionaria, y la segunda, después de ser sometida a la exigencia de la última serie de rampas finales.

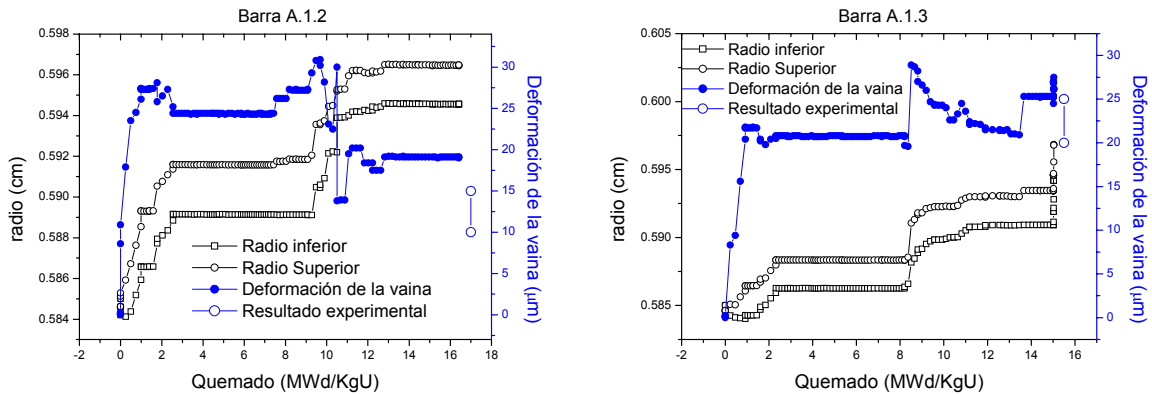


Figura III.13: Evolución de los radios superior y medio de la vaina y su diferencia para los experimentos A.1.2 y A.1.3

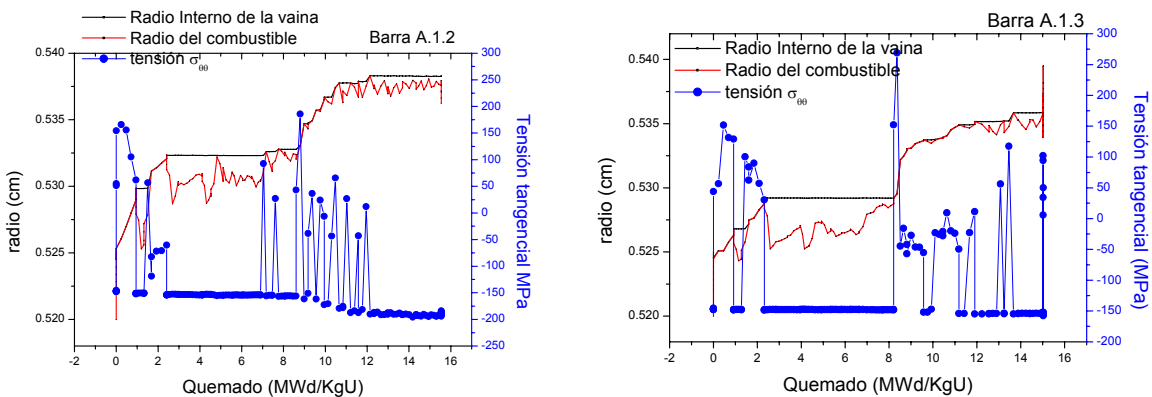


Figura III.14: Evolución de las superficies de contacto y tensión tangencial para las barras A.1.2 y A.1.3

Las figuras III.14 presentan la evolución de los radios interno de la pastilla y externo de la vaina junto a la tensión tangencial. Puede apreciarse el cambio de signo de la misma al producirse el contacto pastilla-vaina. El gap final en el experimento fue estimado en 8 a 12 μm , que coincide con el obtenido por el código DIONISIO.

Experimentos CONTACT^[31,33,34]

Los experimentos CONTACT fueron diseñados para analizar el comportamiento de combustibles PWR bajo condiciones de exigencia mecánica que forzarán el contacto pastilla-vaina en diversas situaciones. Las barras fueron irradiadas en un loop que simula un reactor de agua presurizada dentro de un dispositivo móvil, pudiendo mantener una potencia más o

menos constante durante todo el experimento. CONTACT 1 se irradió a una potencia cercana a los 400 W/cm hasta alcanzar un quemado de aproximadamente 22 MWd/kgU con una presión interna de 1 MPa de helio mientras que el CONTACT 2 se irradió con potencia cercana a los 250 W/cm y una presión de helio de entre 0,1-0,2 MPa. La barra se extrajo tempranamente (5,5 MWd/kgU de quemado) debido a una falla en los sistemas de adquisición de datos y se reemplazó por otra de similares características denominada CONTACT 2bis que se mantuvo bajo irradiación hasta alcanzar los 12,4 MWd/kgU.

Básicamente se midieron las deformaciones radiales de la vaina, la presión interior, los gases liberados por tipo e isótopo y la temperatura central. Dichos resultados experimentales, además del análisis post irradiación de la estructura interna del combustible, se comparan con los resultados numéricos obtenidos con DIONISIO. En esta sección se presentan algunas conclusiones generales del experimento relacionadas al PCMI. En general se observa que para el experimento CONTACT 1, de mayor exigencia térmica, el contacto pastilla vaina provoca mayores deformaciones finales en la vaina que el experimento CONTACT2 (figura III.15). Por otro lado la deformación predicha numéricamente para este último experimento es mayor que la observada experimentalmente. Por otro lado la deformación predicha numéricamente para este último experimento es mayor que la observada experimentalmente. Este hecho particular coincide con el desconcierto de los autores del experimento que no pueden explicar el motivo de sus mediciones negativas. Ellos proponen como explicación problema en la distribución de los transductores que utilizaron para medir.

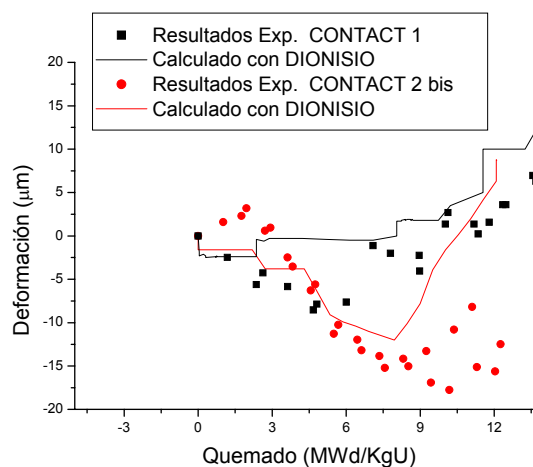


Figura III.15: Deformación de la vaina para CONTACT 1 y CONTACT2.

Las figuras III.16 presentan la evolución del radio interno de la vaina junto al de la pastilla, superpuesta a la tensión en la dirección tangencial (hoop stress), en donde puede apreciarse que la misma toma valores positivos altos al producirse el contacto.

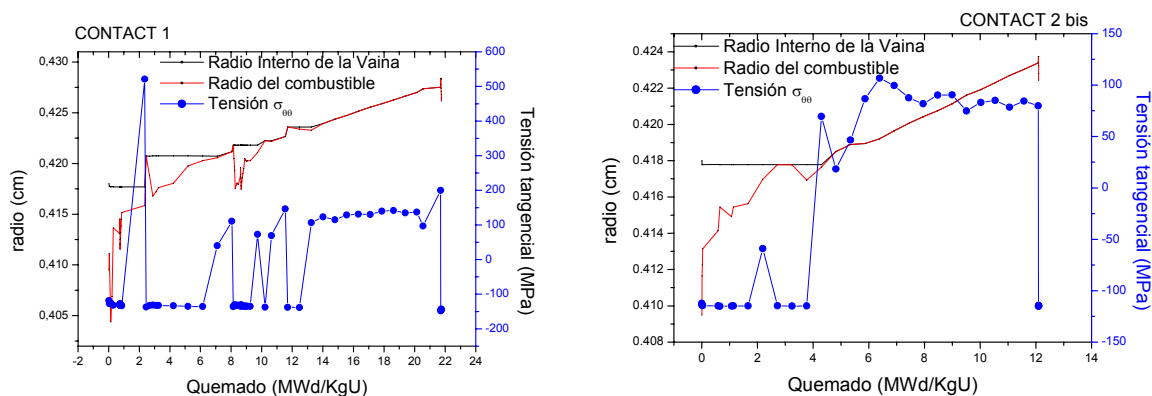


Figura III.16: Evolución de las superficies de contacto y tensión tangente para CONTACT 1 y CONTACT 2.

4. Discusión

El fenómeno de PCMI es, sin duda, el más complejo de abordar en cualquier código de simulación de quemado de combustible. No sólo por la complejidad numérica al tratar el contacto entre dos superficies sino también por la correlación entre el PCMI y demás fenómenos fisicoquímicos que suceden, tanto en la pastilla como en la vaina o en el gap. En particular, el tratamiento térmico de este último resulta condicionante para el cálculo y depende asimismo del contacto entre las superficies involucradas. El modelo de conductancia del gap se construye con una componente de radiación, un término de conductancia de mezcla de gases dado por el MATPRO^[4], al que se le agrega la conductividad de contacto dada por el modelo de Mikin^[9], y la corrección para bajas presiones gaseosas de propia autoría. Este modelo permite obtener excelentes resultados al reproducir los datos experimentales de conductividad gaseosa además de concordar adecuadamente con la mayoría de los experimentos de contacto con los que se lo comparó.

El algoritmo de contacto mecánico, por otro lado, describe con cierto margen de error algunos de los problemas analíticos típicos de la literatura además de pasar satisfactoriamente la comparación con códigos de elementos finitos comerciales y con otros resultados de simulación de PCMI^[27,28,29,30]. También muestran un buen comportamiento al utilizar DIONISIO aplicado a situaciones ideales^[35] así como las comparaciones con situaciones reales bajo irradiación, en donde puede apreciarse el excelente acoplamiento con los restantes modelos fisicoquímicos incluidos en el código^[12,22,23,25,26,27].

Bibliografía

- [1] L.S Tong, J. Weisman. Thermal analysis of pressurized water reactors. American Nuclear society. La Grange Prk, Illinois USA (1989).
- [2] G. Jacobs, N. Todreas. Nuclear Science and Engineering: 50, 283-290 (1973)
- [3] D.Olander. Fundamental Aspect of Nuclear Reactor Fuel Elements, Thechnical Information Center, (1976).
- [4] MATPRO-Versión 11 (1981)
- [5] S. Wahid, M. Sudana. Int. Journal of Heat Transfer 43, 4483-4487, (2000).
- [6] S. Loyalka, Nuclear Technology 57, may (1982).
- [7] I. Savija, J.R. Culham, M. Yovanovich. Journal of thermophysycs and Heat Transfer, 17, 1, Jan-Mar, 43-52 (2003).

- [8] J.B. Ainscough. Gap Conductance in Zircaloy-clad LWR fuel rods, OECD, NEA. (1982).
- [9] M. Cooper, B. Mikic, M. Yovanovick. Int J. Heat Mass Transfer, 12:279 (1960)
- [10] A. Soba. Comparación entre modelos de conductancia térmica de contacto UO₂-Zircaloy, Actas del congreso MECON 2005, (2005).
- [11] International Atomic Energy Agency, Fuel Modelling at extended burnup, IAEA–TECDOC–998, IAEA (1998).
- [12] A.Denis and A. Soba. Simulation of Pellet-Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. Nuclear Engineering and Design 223 pps 211-229 (2003).
- [13] K. Bathe. Finite Element Procedures, PRENTICE HALL, (1996).
- [14] Y. C. Fung. Foundations of Solid Mechanics, PRENTICE HALL, (1965).
- [15] V. Feodosyev. Strength of Materials, MIR PUBLISHERS, (1968).
- [16] D. Maugis. Contact, adhesion and rupture of elastic solids, Springer-Verlag, (2000).
- [17] F. J. Gallego, J.J. Anza. Un modelo de elementos finitos mixtos para la resolución del problema del contacto elástico. Mét. Num. P/ Cál. y Dis. en Ing., vol 5, 2, 163-184 (1989).
- [18] Ulf Sellgren, S. Björklund, S. Andersson. A finite element-based model of normal contact between rough surfaces. Wear 254 1180,1188 (2003).
- [19] J. Zurita, M. Doblare y L. Garcia. Determinación de tensiones de contacto mediante el M.E.C. en problema multicuerpo con simetría axial. Métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería, vol 9, 1, 15-34 (1993).
- [20] L.D.Landau and E.M.Lifshitz, Theory of elasticity, PERGAMON PRESS, (1959).
- [21] K. Bathe, A. Chaudhary. A solution method for planar and axisymmetric contact problems. Int. J. Num. Meth. Engng,21,65-88 (1985).
- [22] A.Soba y A.Denis. Finite Element Simulation of the Thermoelastic Behavior of a Fuel Rod. Technical Committee Meeting on Fuel Chemistry and Pellet-Clad Interaction Related to High Burnup Fuel, IAEA, September 7-11, Nyköping, Suecia (1998).
- [23] A. Soba, A. Denis. Modelo Termoelástico por Elementos Finitos de Deformaciones en Vainas de Elementos Combustibles. 83° AFA, La Plata (1998).
- [24] J. Brochard, F. Bentejac, N. Hourdequin, S. Seror, C. Verdeau, O. Fandeur, S. Lansiard, P. Verpeaux. Modelling of Pellet Cladding Interaction in PWR fuel. Transactions SMiRT 16, Washington DC, August (2001).
- [25] A Soba, A. Denis. Simulación por elementos finitos de fenómenos térmicos, elásticos y plásticos en elementos combustibles. AATN, Bariloche, (1999).
- [26] A. Denis, A. Soba. Simulación de la interacción termomecánica entre la pastilla y la vaina y liberación de gases de fisión. AATN, Buenos Aires, (2000).
- [27] A. Denis, A. Soba. Simulation of Pellet-Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. Technical Committee Meeting on Nuclear Fuel Behaviour Modelling at High Burnup and its Experimental Support, Windermere, 19–23 June (2000).
- [28] J.R. Mathews. The quantitative description of deformation and stress in cylindrical fast reactor fuel pins, in Adv. in Nuclear Science and Technology, Vol.6, Academic Press (1972).
- [29] L. Caillot, B. Linet, C. Lemaignan. Pellet clad interaction in PWR fuel. Analytical irradiation experiment and finite element modelling, Proc. SMiRT 12, Germany, (1993).
- [30] G. Zhou, J.E. Lindback, H.C. Schutte, L.O.Jernkvist, A.R.Masih. Modelling of Pellet-Clad Interaction during Power ramps. (1999)

- [31] IFPE/CONTACT Rev.1 Database for CONTACT experiments irradiates at CEA GRENOBLE. J A Turnbull, October 1998, Revision 1, issued Jan 2003.
- [32] A. C. Marino, E. Pérez, P. Adelfang. Argentine Nuclear Fuels MOX irradiated in the Petten Reactor, Experience analysis with the BACO code. Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup. Windermere, England, 19-23 Sep (1994).
- [33] M Bruet, J Dodalier, P Melin and M L Pointud. CONTACT 1 and 2 Experiments: Behaviour of PWR Fuel Rods up to 15000 MWd/tu. IAEA Specialists' Meeting on Water Reactor Fuel Elements Performance Computer Modelling, UK, 17-21 March (1980).
- [34] M Charles, C Lemaignan. Fuel Performance under Normal PWR Conditions: A Review of Relevant Experimental Results and Models. J. Nucl. Mater. vol. 188 pp 96-103, (1992).
- [35] A. Marajofsky, A. Denis A. Soba. Análisis numérico de la influencia de la forma de una pastilla de combustible sobre la condición de contacto pastilla-vaina. A. CAC. CNEA. AATN, Buenos Aires, (2004).

IV. FRACTOMECAENICA EN VAINAS DE ZIRCALOY DE BARRAS COMBUSTIBLES EN OPERACIÓN.

1. Introducción a la Mecánica de Fractura Lineal Elástica (LEFM) y Plástica (EPFM)

La mecánica de fractura se propone determinar bajo qué condiciones de carga y deformación una fisura presente en un material se propagará. El tema tiene obvias e importantes implicancias tecnológicas, económicas y de seguridad. El parámetro de intensidad de tensiones (K) es un elemento característico de la mecánica de fractura y su determinación resulta de importancia relevante. De acuerdo a los tres modos típicos de carga del cuerpo fisurado, existen tres parámetros K. Entre ellos, el MODO I es el más importante desde el punto de vista técnico y corresponde al modo normal de carga: la tensión aplicada es normal al plano de la fisura y tiende a abrirla mientras el vértice de la fisura se desplaza en forma perpendicular al plano de la misma. El factor de intensidad de tensiones asociado al Modo I puede ser calculado en condiciones puramente elásticas, en lo que se ha denominado Mecánica de Fractura Lineal Elástica, LEFM.

Para caracterizar la resistencia a la fractura de un material para cada modo de carga, en forma independiente de la geometría y dimensiones de la pieza, se define el factor de intensidad de tensiones

$$K = \sigma \sqrt{\pi a}$$

donde σ es la tensión remota aplicada y a es la profundidad de la fisura. Un dado material falla, es decir, la fisura se propaga, cuando K alcanza su valor crítico K_C . Las componentes del campo de tensiones en un cuerpo lineal elástico fisurado tienen la forma

$$\sigma_{ij} = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}(\theta) + \text{otros términos}$$

donde r y θ son las coordenadas polares medidas a partir del vértice y el plano de la fisura y presentan la conocida singularidad del campo de tensiones en el extremo (tip) de la misma.

$f_{ij}(\theta)$ es una función que depende de la orientación de la fisura en el espacio^[3]. El primero es el término principal y los subsiguientes introducen correcciones de menor orden.

Si en las inmediaciones de la fisura el material presenta comportamiento dúctil, la deformación total contiene componentes plásticas y las consideraciones en LEFM no son válidas. Se hace entonces necesaria la inclusión de efectos plásticos en el cálculo en lo que se denomina Mecánica de Fractura Elastoplástica (EPFM). Por otra parte, la dependencia con la temperatura de los parámetros físicos y la presencia de gradientes térmicos introduce nuevas modificaciones en los cálculos.

Técnica de la Integral J (TEJ)

Uno de los parámetros más utilizados en mecánica de fractura para caracterizar el grado de estabilidad de una fisura es la Integral J, que define la intensidad de la tensión y la deformación plástica en la región que rodea el extremo de la misma. Es una función de la tensión aplicada, de la deformación en el entorno de la fisura, del tamaño y de la geometría del cuerpo. Este parámetro es análogo a K y se relaciona en forma sencilla con él. La mayor diferencia entre ellos es que J representa la intensidad del campo elastoplástico que rodea el

extremo de la fisura mientras que en LEFM sólo importa la intensidad del campo elástico circundante. El método de la integral J, junto al del desplazamiento de apertura de fisura (COD), es el más usado actualmente para la determinación de las condiciones de fisura y es sencillo de calcular numéricamente.

Específicamente, la integral J se define mediante el balance entre la energía interna de desplazamiento U y el trabajo externo de las fuerzas de tracción t_i aplicadas sobre el volumen encerrado en un camino L alrededor de la fisura, caracterizado por la normal n. Dicho camino debe encerrar la zona de comportamiento elastoplástico. El último término de la ecuación es la modificación por temperatura y representa la energía térmica del problema, donde A es el área encerrada dentro de la curva L, β es el coeficiente de expansión térmica, y la delta de Kröneker determina que sólo influyen en el balance de energía los términos principales del tensor de tensiones.(Figura IV.1)

$$J = \oint U dy - t_i \frac{\partial u_i}{\partial x} dL + \int_A \beta \sigma_{ij} \delta_{ij} \frac{\partial T}{\partial x} dA$$

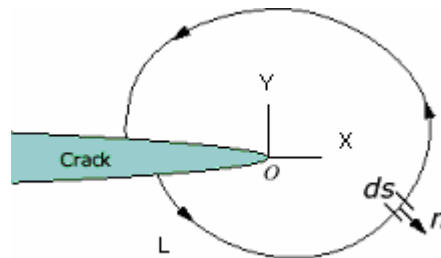


Figura IV.1 Camino de integración J para una probeta estándar

Si la integral J se evalúa en la región dominada por el campo elástico, o sea, la región K_I , ésta se relaciona con el factor de intensidad de tensiones a través de la sencilla ecuación:

$$K_I = \sqrt{\frac{8\mu J}{1+k}}$$

donde $k = 3 - 4\nu$, $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ es el módulo de corte, E es el modulo de Young y ν es el coeficiente de Poisson^[1,2,3].

Al incrementar la carga sobre un material dado con una fisura a, la región plástica comenzará a dominar el campo de la fisura y el valor obtenido para J ya no podrá relacionarse con el K de LEFM. Si continúa incrementándose, el extremo de la fisura se redondea y se alcanza un valor crítico J_{I0} a partir del cual la fisura crecerá en forma estable y dúctil. J_{I0} es el punto crítico y es una medida conservativa de la tenacidad a la fractura dúctil del material.

La expresión analítica de la integral J en el caso de un material elasto plástico con geometría tubular de radio R y presión interna P depende y está limitada por los valores que toman las relaciones entre el radio R, el ancho de la fisura a y el espesor del tubo t. Los valores de las constantes involucradas son similares a la expresión anterior.

$$J_{tot} = J_{el} + J_{pl} = \frac{K_I^2}{E'} + \alpha \frac{\sigma_{yield}^2}{E} (t-a)(a/t)h(a/t, n, t/R) \frac{P^{n+1}}{\left(\frac{2(t-a)\sigma_{yield}}{\sqrt{3}(R+a)}\right)^{n+1}}$$

donde α y n son constantes de la relación plástica entre la deformación y la tensión y h es una función geométrica de probeta finita. Esta última expresión presenta dos términos correspondientes a las contribuciones elástica y plástica.

En la figura IV.2 se presentan los resultados del cálculo de J elastoplástico realizada con el algoritmo utilizado en DIONISIO y una comparación con resultados analíticos. En la tabla se resultados se incluyen también los valores calculados por otros autores^[2].

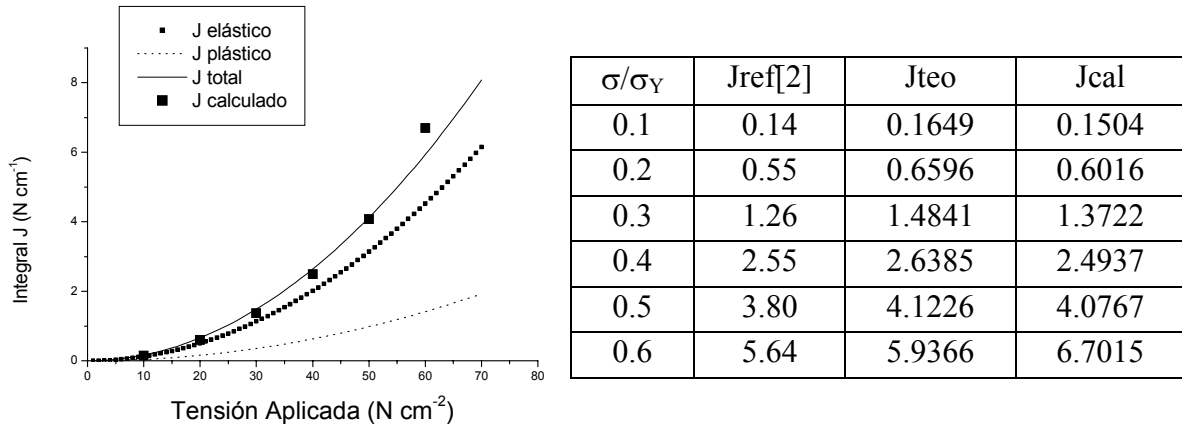


Figura IV.2 Comparación entre el resultado numérico y el analítico para la integral J en EPFM y tabla asociada

2. Propagación de fisuras: Curva R y crecimiento de fractura dúctil

Muchos materiales, especialmente así diseñados, presentan un crecimiento de fisuras no catastrófico. Esto es, con un J que supere los valores umbrales, la fisura no evoluciona descontroladamente sino que crece en función del tiempo y de las condiciones de tensión a las que se somete al material a través de una curva denominada resistencia al crecimiento de fisura (J_R , resistance curve o R-curve.). Al aumentar la J aplicada al tip de la fisura, se producen diferentes estadios de deformación graficados en la figura IV.3. Inicialmente se observa una deformación plástica y redondeo del vértice original (“Blunting”), en estos instantes iniciales la curva es lineal hasta el J umbral o J de rigidez a la fractura en donde comienzan a actuar micro mecanismos de fractura propiamente dicha y se genera el desgarramiento dúctil con el correspondiente crecimiento (este punto en donde comienza el avance de la fisura es impreciso y muy difícil de determinar, mucho más impreciso que el punto de tensión de fluencia del 0.2%)^[3,4]. Un material presenta un crecimiento de fisura estable cuando la función de intensidad J es igual a la curva R y cuando $dJ/da \leq dJ_R/da$. En cambio la fractura crecerá en forma inestable cuando el primer miembro es mayor que el segundo. La pendiente de la curva J_R en algún estadio del crecimiento de a , proporciona información acerca de la estabilidad de ese crecimiento.

Una modificación de la condición de inestabilidad se provee al introducir un módulo de desgarramiento que permite definir el crecimiento estable y toma la forma:

$$T_{Des} = \frac{E}{\sigma_0^2} \left(\frac{dJ}{da} \right)$$

donde σ_0 es una tensión suma de la tensión de fluencia y una tensión máxima en un ensayo de tracción uniaxial que depende del material y tiene en cuenta el endurecimiento. Utilizando el modulo de desgarramiento cuando $J \geq J_R$ se obtiene que $T_{Des} \geq T_R$.

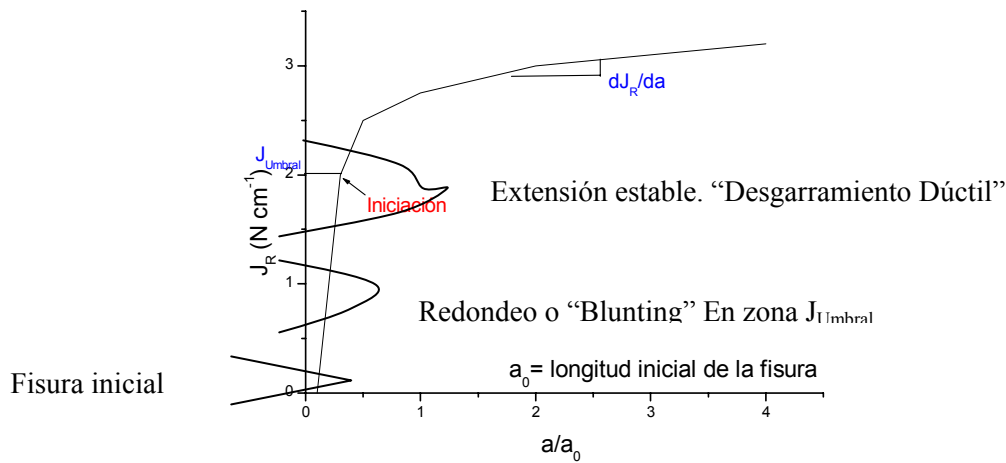


Figura IV.3: Diferentes estadios de crecimiento de fisuras y curva R asociada (ideal)

Para que exista un crecimiento estable controlado por J , es necesario que exista deformación controlada en el entorno de la fisura con la posible excepción de una pequeña zona en el vértice, debido a que en estas condiciones son válidos los cálculos incrementales. Para ello, la primera condición necesaria será que da en cada paso sea mucho menor que la zona controlada por J (los caminos de cálculo de la integral, figura IV.1). Una segunda condición que garantiza un régimen de carga predominantemente proporcional llevará a que $\frac{1}{J} \frac{dJ}{da} \gg \frac{1}{S}$ donde S es la zona de influencia de J .

El modelo aplicado a vainas de Zircaloy bajo irradiación y sometidas a extremas temperaturas y cargas variables presenta un número elevado de suposiciones que llevan al modelo hasta los límites de su validez. Sin embargo el Zircaloy presenta endurecimiento con el aumento de la irradiación y dicho endurecimiento eleva la curva-R^[4]. Al mismo tiempo las cargas aumentan levemente en el tiempo aunque considerando espacios temporales acotados es posible suponerlas constantes y uniformes (considerando las simetrías del problema).

Otro aspecto a tener en consideración al analizar predicciones de crecimiento de fisura es el tamaño de las vainas. Si bien el parámetro J umbral no depende del tamaño de la muestra, las condiciones analizadas sí se modifican con la magnitud de la fisura en relación con la zona de influencia de la integral J así como el ancho total del material. Esto quiere decir que cuando la fisura alcanza valores mayores que el 75% de la vaina las expresiones aquí analizadas dejan de ser válidas. Por otro lado, la curva R es una curva ideal ya que no se conocen valores para material bajo irradiación.

3. Fallas en vainas de Zircaloy

Los procesos involucrados en las fallas de vainas de combustibles en operación son de carácter diferente y mutuamente relacionados por lo que obtener un modelo completo de este

problema resulta extremadamente complicado, aún bajo las simplificaciones que conlleva todo modelo numérico. Básicamente cuatro son los fenómenos que influyen en la falla de una vaina:

- 1) PCMI: la fuerte interacción mecánica entre la pastilla y la vaina especialmente en regiones fisuradas de la pastilla o en la zona de interfase pastilla-pastilla. Sobre estas zonas no sólo se genera una distribución de tensiones pronunciada sino que además se produce una gran concentración de productos de fisión como iodo o cesio, ambos factores críticos en la corrosión bajo tensión.
- 2) El coeficiente de rozamiento entre el material de la vaina y el de las pastillas, fuertemente dependiente de la rugosidad de las superficies, que va a aumentar la fuerza tangencial sobre la vaina en la dirección de apertura de las fisuras.
- 3) Usualmente las fallas en vainas ocurren en el marco de fuertes rampas de potencia que impiden la posibilidad de relajar tensiones en poco tiempo.
- 4) Existe una fuerte influencia de la estadística ya que cientos de vainas sometidas a las mismas condiciones sólo producen un porcentaje de fallas muy bajo, lo que lleva con frecuencia a incluir modelos probabilísticos en los análisis de fractura.

El modelo incluido en DIONISIO no considera el cuarto factor ya que contempla un iniciador de tamaño predeterminado por el usuario. De este modo no se consideran esos primeros estadios de formación de cracks intergranulares y se suponen defectos internos suficientemente grandes como para concentrar tensiones y comenzar la propagación de la fisura. Por otro lado, análisis experimentales de condiciones mecánicas del Zircaloy muestran la fuerte dependencia de sus constantes constitutivas con la historia térmica a la que se somete el material^[11]. Gran cantidad de análisis experimentales y teóricos se ha realizado en este sentido básicamente sometiendo tubos de Zircaloy en presencia de iodo a fuertes presiones^[8,9,10].

Bajo la suposición de corrosión bajo tensiones por iodo, la propagación de una fisura se produce cuando la función de intensidad de tensiones J es mayor que el umbral de crecimiento de fisura transgranular J_{Sc} . El mecanismo de propagación ocurre bajo tensión moderada y con una atmósfera con alta concentración de iodo. El modo de este mecanismo es por tensión bajo corrosión transgranular, es frágil y su velocidad de propagación se considera controlada por las condiciones sobre el *tip* de la fisura, la intensidad de tensiones, la temperatura y la cantidad de iodo disuelto en la atmósfera, fenómenos que son variables dentro del cuerpo del programa y se actualizan con el tiempo. La velocidad de propagación del crack bajo I-SCC se expresa como:

$$\frac{da}{dt} = \begin{cases} 0 & \text{si } J < J_{Sc} \\ CF(I_2) \left(\frac{J}{J_{Sc}} \right)^n \exp\left(-\frac{Q}{RT} \right) & \text{si } J \geq J_{Sc} \end{cases}$$

donde C es una constante en m/s, n es una constante adimensional que para el Zircaloy-2/-4 ronda el intervalo [1,35-1,5], Q es la energía de activación que depende de la temperatura y toma valor en el intervalo [33-45] kcal mol⁻¹ para bajas temperaturas (<300 °C) y [19-33] para

la región de altas temperaturas. J_{Scc} es el umbral de intensidad de tensiones y depende de la textura del material, la temperatura y la irradiación y bajo condiciones normales de operación, puede caer dentro del intervalo $[250 \text{ } 1.000] \text{ N m}^{-1}$. $F(I_2)$ es una función adimensional de la cantidad de yodo en la atmósfera.

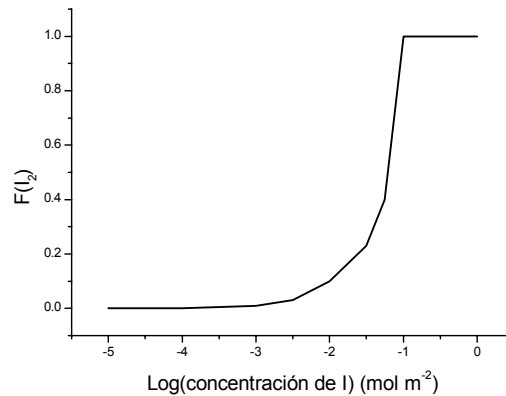


Figura IV.4: función adimensional $F(I_2)$.

Bajo condiciones de alta tensión el crecimiento de fisuras se supone dúctil y controlado por la curva de resistencia J_R para el Zircaloy. Como no existen mediciones de la curva J_R para el material irradiado, se utiliza una idealizada como la de la figura IV.5 para determinar el incremento de la fisura. Dada una función de intensidad de tensiones J y un tamaño de fisura a , el incremento da se puede hallar imponiendo la propagación de la fisura según la curva J_R , o sea:

$$\begin{aligned}
 da &= 0 && \text{si } J(a) < J_R(a) \\
 da &\neq 0 && \text{si } J_R(a + da) = J(a)
 \end{aligned}$$

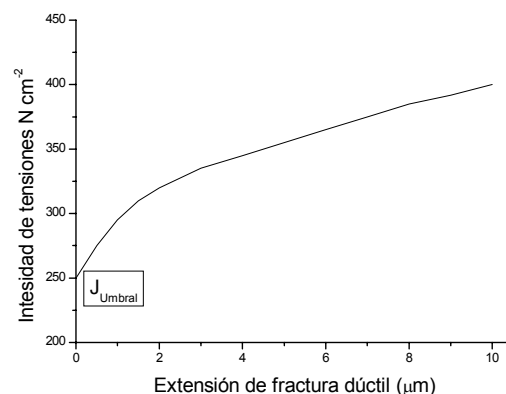


Figura IV.5: Curva J_R ideal para el Zircaloy

Cálculo de los parámetros involucrados en el cuerpo del programa. Implementación.

La estructura de cálculo de evolución de fallas en el cuerpo del código DIONISIO se realiza a través de la función FRACTURA_VAINA. La misma es llamada sólo si el usuario determina al inicio, si existe o no fisura en la vaina, especificando su tamaño. En dicho caso el código va a la subrutina llevando la distribución de presiones y la temperatura de la vaina, el inventario de productos de fisión liberados, si existe o no contacto pastilla vaina, y el tipo del mismo. Con esas condiciones de exigencia, la subrutina calcula el factor de intensidad de tensiones sobre la fisura y genera la condición para evaluar si la fisura crecerá o no.

En el apartado II.13 se realizó un análisis de concentración de productos de fisión involucrados en los procesos de I-SCC. Esos modelos son independientes de la existencia o no de fractura en la vaina y el detalle del inventario de dichos productos liberados al gap y zonas relevantes a medida que el quemado evoluciona son un aporte esencial de DIONISIO.

La implementación del cálculo de la integral J conlleva un tratamiento numérico separado del cuerpo del programa principal. El dominio a tratar se ejemplifica en la figura IV.6 y corresponde a un tubo delgado con una fisura ya formada. Las constantes materiales del tubo corresponden a las de Zircaloy a la temperatura del momento en que se llama a la función. Asimismo, las presiones sobre la pared interna corresponderán a la presión interior del elemento y a las tensiones de contacto (en caso de que éste ocurra) que pueden tener o no componente tangencial, según sea el módulo de rozamiento pastilla-vaina. Por otro lado, la cantidad de I en la atmósfera modificará la función para el crecimiento de la fisura.

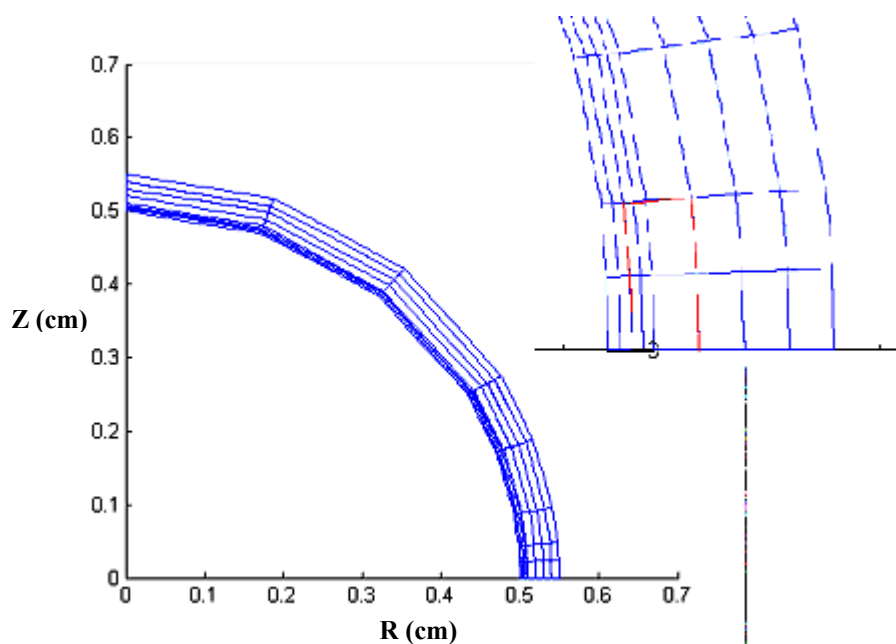


Figura IV.6: Discretización en EF del dominio a tratar y detalle del camino de integración J.

El dominio para el cálculo de J se considera en deformación plana y la fisura es paralela al radio. Fisuras de diferentes orientaciones y formas no están incluidas todavía en el programa.

La subrutina efectúa el mallado sobre el dominio, considerando una longitud de fisura del tamaño establecido en la última iteración, establece las condiciones de contorno de ese instante de tiempo y resuelve mediante MEF el problema elastoplástico planteado. En el

cuerpo de DIONISIO y con el valor de $J(a)$ y la cantidad de I en la atmósfera determinada, se evalúa la condición de crecimiento por I-SCC y/o por crecimiento dúctil a través de la curva R del Zircaloy en forma dinámica a medida que la evolución de las condiciones de quemado e irradiación afectan a los parámetros involucrados. En cada llamada a la función de fractura, se determina el incremento en la fisura, que se añade al tamaño al inicio del paso previo y regresa al cuerpo principal del programa. Es importante destacar que las condiciones de tensión y deformación del sistema son guardadas y son puntos de partida de la siguiente llamada a la función.

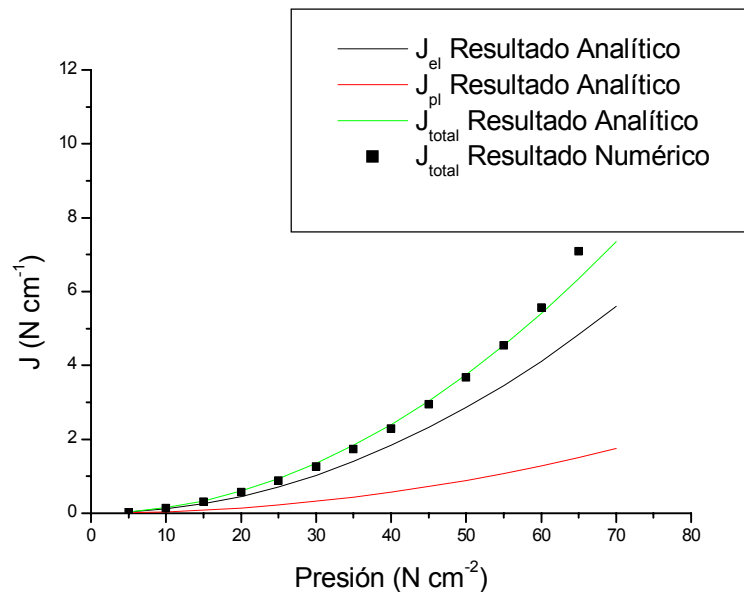


Figura IV.7: Cálculo de J para un paso estacionario. Comparación con el cálculo analítico.

Las figuras IV.7 y IV.8 presentan una primera evaluación del cálculo de J realizadas para validar dicha integral sobre el camino de integración elegido en una fisura de diversos anchos (en % del ancho total del tubo). El cálculo se realiza en forma estacionaria con una presión interna fija y se compara con la expresión analítica propuesta en la sección IV.1.

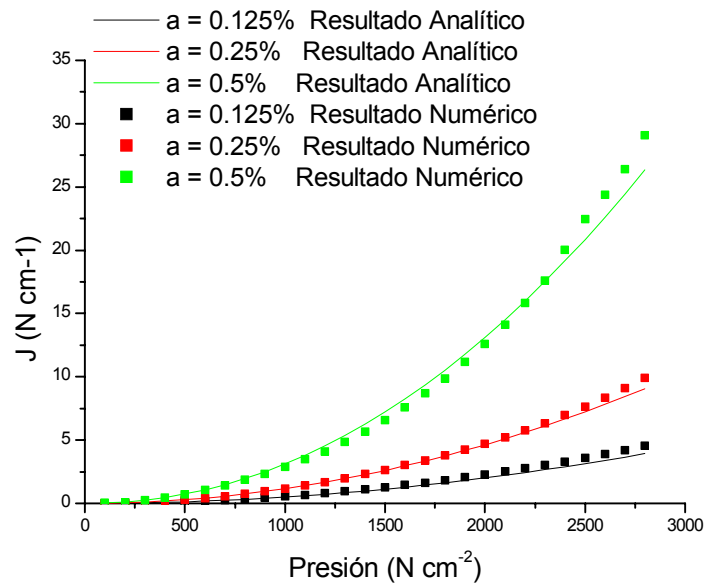


Figura IV.8: Cálculo de J para un paso estacionario. Comparación con el cálculo analítico para varios tamaños de iniciador en % del ancho de la vaina.

Aplicación del modelo de falla a un caso de testeo

El modelo se aplica a un caso idealizado en un dominio tipo CANDU con un ancho de vaina de 0.6 milímetros, en donde, en primer lugar, se supone un tamaño inicial de fisura del 10% y se modifican los coeficientes de rozamiento μ entre la pastilla y la vaina al comenzar el contacto. En la figura IV.9 se observa cómo el crecimiento de fisura aumenta su velocidad para un coeficiente de 1.4, mientras que para los menores, dicho crecimiento no alcanza a superar la décima de milímetro en una historia de potencia de 125 días de duración.

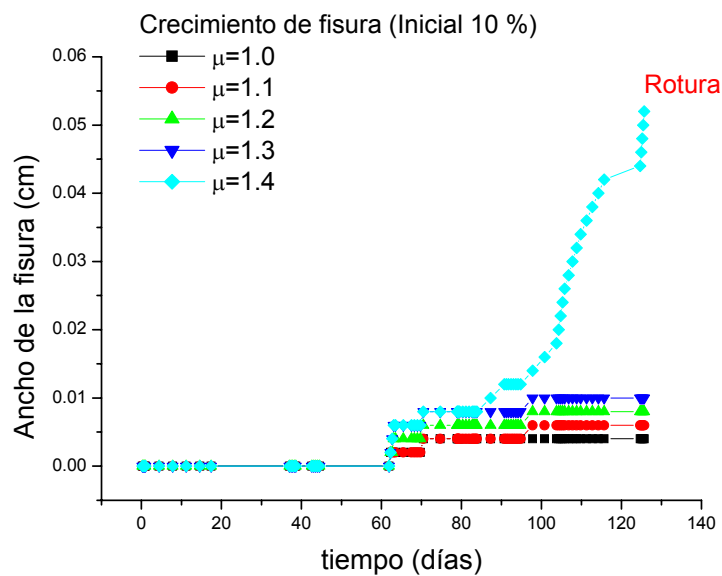


Figura IV.9: Crecimiento de fisura de 10% para diferentes μ .

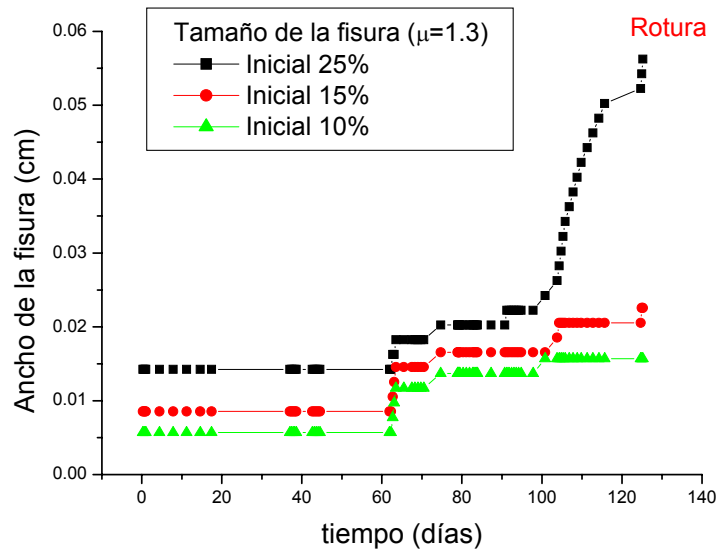


Figura IV.10: Crecimiento de fisura de diferentes tamaños para $\mu=1.3$.

En segundo lugar se analizó, para un valor fijo del coeficiente de rozamiento, la evolución de las fisuras con distintos tamaños de iniciadores para observar cuál de ellos alcanza rotura. La figura IV.10 muestra para $\mu=1.3$ y tamaños iniciales de 10, 15 y 25% la evolución del tamaño en los 125 días de irradiación del experimento numérico. En la figura IV.11 se presenta el cálculo de la integral J a través del tiempo de irradiación notándose el incremento que se produce al producirse el contacto pastilla-vaina e intervenir la condición de contacto en el cálculo de la integral.

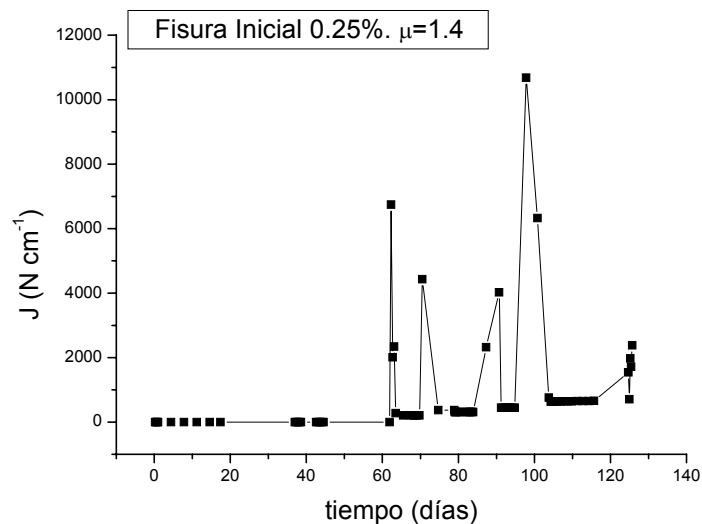


Figura IV.11: Valor de la integral J en función del tiempo de irradiación para uno de los casos de estudio.

Experimentos MOX-HALDEN

Como se describió en el capítulo III, la barra A.1.3 del experimento MOX fue sometida a una rampa de gran exigencia a fin de vida, que ocasionó la evolución de una fisura hasta provocar una falla, de forma esférica, propia del SCC. Las micrografías de la figura IV.12 muestran las fisuraciones en la pared interna de la vaina existentes antes de las rampas finales.

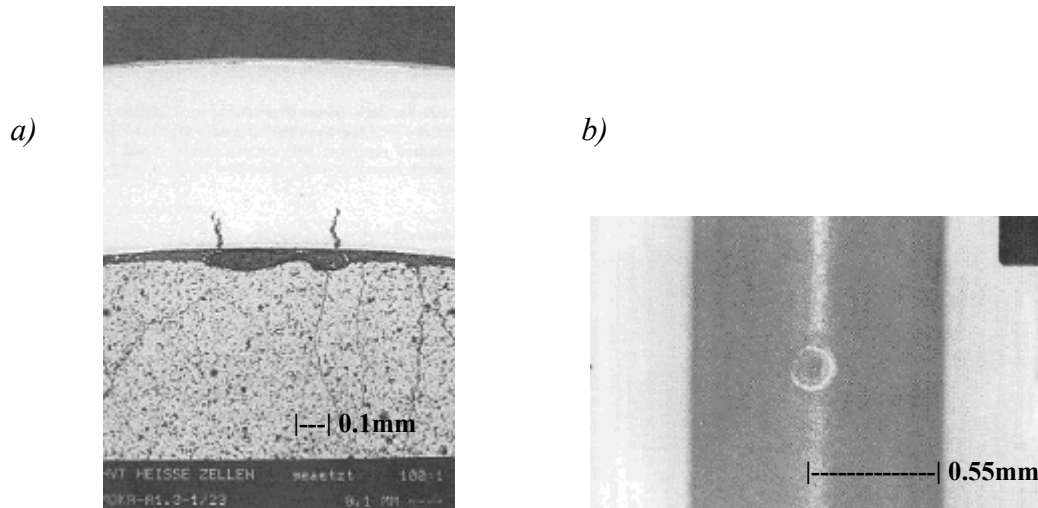


Figura IV.12: a) *Microcrack antes de la rampa de potencia.* b) *Falla de forma esférica en la inspección a fin de vida.*

Para probar las curvas y parámetros introducidos en la función de fractura de la vaina se utilizó este experimento a partir de una micro fisura de 12 micrones de longitud, del orden de unos pocos tamaños de grano del Zircaloy. La misma se sometió a la historia de potencia suponiendo, como se describió en los apartados anteriores, que las fuerzas de contacto máximas afectaban su evolución. Se supusieron diversos coeficientes de rozamiento entre la pastilla y la vaina para analizar con cuál de ellos se alcanzaba un comportamiento similar al observado en el experimento. En la figura IV.13 se observa la evolución del crecimiento de la fisura para diferentes valores de dicho coeficiente. El comportamiento óptimo se observa para $\mu=1.25$, en donde la fisura evoluciona hasta el final de la irradiación estacionaria y crece drásticamente hasta romperse debido a la exigencia de las últimas rampas de fin de vida.

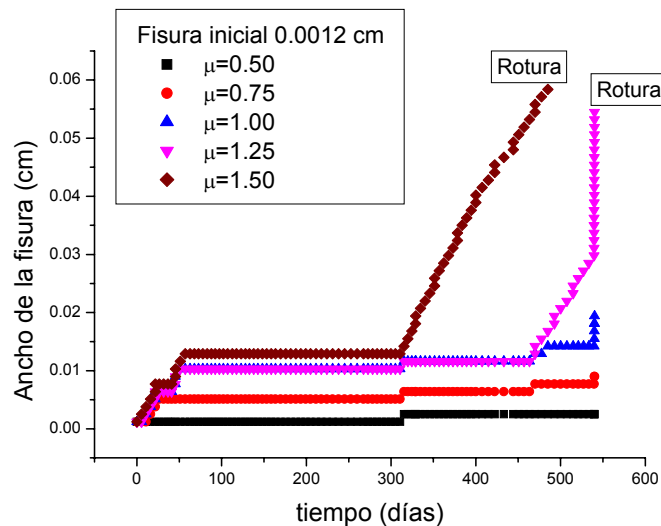


Figura IV.13: Análisis de crecimiento de una fisura inicialmente de 12 micrones hasta alcanzar rotura a lo largo de la historia de potencia.

4. Discusión

Si bien aún no existe una casuística adecuada para testear el modelo propuesto, su inclusión dentro de un código como DIONISIO provee la posibilidad de entender y analizar numéricamente la evolución de fisuras durante la historia del quemado de una barra combustible, estudiando la interacción entre los fenómenos involucrados en dicha historia y aquellos que afectan directamente al avance.

El modelo depende del coeficiente de rozamiento entre la vaina y la pastilla y responde a la predicción de generación de micro fisuras durante una historia de potencia normal. La elección de un coeficiente de rozamiento alto permite reproducir el tiempo de la rotura obtenida en el experimento MOX.

Bibliografía

- [1] L. Bezerra, J. de Medeiros, F. Cesari, P. Battistela, International Association for Boundary Element Methods, UT.Austin, USA, May (2002).
- [2] T. Denyse de Araújo, T. Bittencourt, D. Roehl, L. Martha, European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, Barcelona, España, Sep (2000).
- [3] T.L. Anderson. Fracture mechanics. Fundamentals and applications. CRC Press, Texas A&M University, USA, (1991).
- [4] L. A. De Vedia. Mecánica de fractura .Proyecto Multinacional de Investigación y Desarrollo en Materiales, OEA-CNEA, (1986).
- [5] D.R.J. Owen, A.R.Fawkes. "Engineering Fracture Mechanics . Numerical Methods and Applications". Swansea Pineridge Press. 1983
- [6] A. Soba, A. Denis. Estimación numérica del parámetro de fractura KI en condiciones elásticas mediante el métodosde elementos finitos. Anuario de la 88 Reunión de la Asociación Física Argentina, Bariloche, (2003).

- [7] A. Soba, A. Denis. Estimación numérica de parámetros de fractura en condiciones elásticas y elastoplásticas mediante elementos finitos. XXX Reunión de la AATN, Buenos Aires, (2003).
- [8] L. O. Jernkvist. A model for predicting Pellet-cladding interaction-induced fuel rod failure. Nucl. Eng. Des. 156 393-399 (1995).
- [9] R. W. Seog, Y. H. Kang, J. Lee. Effects of iodine concentration on iodine-induced stress corrosion cracking of Zircaloy-4 tubes. J. Nucl. Mat, 152, 194-203 (1988).
- [10] I. Shuster, C. Lemaignan. Influence of texture on iodine-induced stress corrosion cracking of Zircaloy-4 cladding tubes. J. Nucl. Mat, 189, 157-166 (1992).
- [11] J.E. Talia, F. Povolo. Tensile properties of Zircaloy-4, J. Nucl Mat 67,198-206 (1997).
- [12] F. H. Huang, Fracture Toughness Evaluation for Nuclear Reactor Pressure Tubes of Zircaloy-2 Using the Electric-Potential Method. ASTM International Symposium on Small Specimen Test Techniques and Their Applications to Nuclear Reactor Vessel Thermal Annealing and Plant Life Extension New Orleans, Louisiana. Prepared for the U.S. Department of Energy Assistant Secretary for Defense Program (1991).
- [13] J Spino, J. Cobos-Sabate, F. Rousseau. Room-temperature microindentation behaviour of LWR-fuels. Part 1: fuel microhardness. Journal of Nuclear Materials 322, 204–216 (2003).
- [14] O.N. Pierron, D.A. Koss, A.T. Motta, K.S. Chan. The influence of hydride blisters on the fracture of Zircaloy-4. Journal of Nuclear Materials 322, 21–35, (2003).

V. VALIDACION

Se divide el capítulo de validaciones de DIONISIO en cuatro partes bien diferenciadas. En la primera se trata el experimento FUMEX I en forma completa. Este experimento se encuentra completamente terminado no obstante constituir una fuente continua de validación de códigos. En la segunda parte se propone el testeado de casos para reactores PHWR, sobre todo CANDU. Por su importancia sobre todo para Argentina, este tipo de validaciones presenta especial interés para DIONISIO. La tercera parte se dedica exclusivamente al experimento ciego en el que participó DIONISIO organizado por la OIEA y en el que tuvo una excelente performance. La cuarta y última parte se dedica a diferentes casos de reactores LWR y BWR. Muchos de los casos analizados en las últimas tres partes componen el FUMEX II.

1. Experimentos FUMEX I

El ejercicio FUMEX^[1] tuvo por objeto evaluar la calidad de las predicciones de los diversos códigos de simulación de comportamiento de elementos combustibles en condiciones de operación normal. Consistió en el análisis de seis casos patrón, que incluían 10 barras de combustible que fueron irradiadas en el reactor de Halden, Noruega. A dicho ejercicio ciego se sumaron quince países con 19 códigos en total que recibieron como datos las historias de potencia y las características geométricas de cada elemento combustible. A partir de ellos se debía evaluar algunos aspectos del combustible como la temperatura central, la presión interna y la fracción de gas liberado para diferentes quemados preestablecidos. Los resultados de los cálculos se compararon entre sí y con los datos experimentales, hasta entonces desconocidos por los participantes. Además de estas complicadas historias de potencia reales, se realizaron una serie de versiones simplificadas para testear y comparar las habilidades de predicción de cada código.

El caso simplificado 1 (SC1) consistió en una barra de combustible sometida a una potencia constante de 20 kW/m hasta alcanzar un quemado final de 50 MWd/kg UO₂. El propósito de este caso fue investigar la estabilidad de los códigos. Se requirió como dato de salida la temperatura central, la cantidad de gases de fisión liberados y la presión dentro de la barra a diferentes estadios del quemado. En el caso simplificado 2 (SC2) la potencia se mantuvo constante en 20 kW/m hasta un quemado de 30 MWd/kg UO₂ para pasar a una potencia de 40 kW/m y ser mantenida así hasta el final de la vida (EOL) a un quemado de 50 MWd/kg UO₂. Se requirió la evaluación de los mismos parámetros que para SC1 comparando así el incremento en la temperatura y en la cinética de liberación de gases de fisión en respuesta a un incremento de potencia. Los casos simplificados 3 al 7 (SC3-SC7) consistieron en analizar barras con helio como gas de llenado con diferentes tamaños para el gap (25, 50, 75, 100 y 115 μm , respectivamente) corriéndolos en una rampa de potencia lineal creciente desde 0 hasta 40 kW/m. La rampa era instantánea y no tuvo en cuenta el paso temporal, por lo que se analizó la respuesta inmediata de cada código a las solicitaciones de los parámetros involucrados. Con estos casos se buscó comparar las predicciones para la temperatura central a diferentes potencias lineales, para distintos espesores del gap. Los casos SC3-SC7 permitieron realizar una curva temperatura central vs. espesor de gap y testear la respuesta de los diferentes códigos ante esos parámetros.

Finalmente, el caso simplificado 8 (SC8) representaba una barra con gas de llenado xenón con un gap de 50 μm la que fue comparada con el SC4. El propósito de esta última comparación era investigar la influencia de la composición del gas sobre la temperatura central de la pastilla. El xenón es mucho menos conductor que el helio por lo que se espera, a igual espesor del gap, una mayor temperatura central en la pastilla.

Los resultados de los casos simplificados reportados por los participantes del ejercicio y los obtenidos por DIONISIO son extractados en la tabla V.1. El rango comprendido entre el menor y el mayor valor reportado, el valor medio y la desviación estándar también se encuentran presentes en los valores de testeo. Se observa claramente que los resultados de DIONISIO caen en todos los casos dentro de los intervalos centrados en los valores medios y sus dispersiones respectivas.

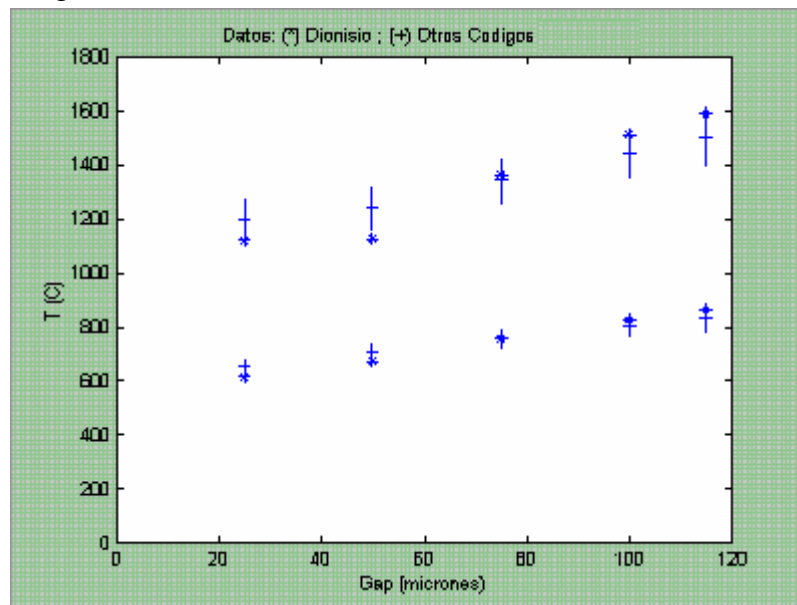


Figura V.1: Temperatura central de la pastilla en función del ancho del gap. Se comparan los datos proporcionados por otros códigos a los que se suma la desviación media, con el predicho por DIONISIO.

En la figura V.1 se ha graficado la temperatura central en función del ancho en micrones del gap, comparando los resultados obtenidos con DIONISIO con los de otros códigos. Los resultados de DIONISIO se ajustan a las predicciones de la media de los códigos intervinientes en la simulación.

Los casos reales del FUMEX I están constituidos por 10 experimentos de irradiación monitoreados durante el tiempo que involucró cada historia de potencia respectiva. Los casos se diferenciaron por sus características geométricas y químicas y se buscaba reproducir ciertas condiciones específicas de operación. La tabla V.2 es el sumario de resultados de los casos FUMEX, los provistos por otros códigos y por DIONISIO.

Tabla V.1: Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de DIONISIO para los casos simplificados del experimento FUMEX.

			Otros Códigos			DIONISIO
			rango	Valor Medio	σ	
SC1	Temperatura Central, °C, a	5 MWd/kg	725—970	873.2	65.1	890.04
		30 MWd/kg	739—1003	899.3	76.9	891.32
		50 MWd/kg	790—1126	980.4	114.4	1079.4
	dT/dBup a	20 MWd/kg	-1.4—4.64	1.22	1.82	-0.3
	FGR, %, a	50 MWd/kg	0—47	22.4	16.6	32.24
	Quemado, MWd/kg	Para 1% FGR	0—12	2.62	3.45	6.75
	Umbral de Lib. %		0—41	24.7	11.0	18.85
	Presión, bar	BOL	8.7—11.5	10.0	0.7	11.01
		Mínimo	8.7—11	9.7	0.6	10.64
		EOL	11.2—35	17.23	6.85	20.93
SC2	Temperatura Central, °C, a	30 MWd/kg, Antes Rampa	704—1006	911.86	81.65	874.55
		30 MWd/kg, Desp. Ramp	1476—1710	1620.6	76.5	1542.6
		50 MWd/kg, EOL	1369—2099	1845	200	1902.6
	FGR, %	30 MWd/kg, Ant. Ramp	0—2.3	0.65	0.73	0.69
30 MWd/kg, después ramp		2.2—31	15.6	7.7	6.84	
50 MWd/kg, EOL		17—47	35	8.6	51.68	
	Presión, bar	EOL	35—153	93.5	33.2	82.65
SC3	Temperatura Central, °C, a	20 kW/m	598—720	652.5	31.8	614.19
		40 kW/m	1075—1315	1198.2	72.5	1119.0
SC4		10 kW/m	436—490	462.8	15.6	452.12
		20 kW/m	651—780	706.4	35.5	673.07
		30 kW/m	866—1091	965.3	57.8	899.44
		40 kW/m	1098—1385	1238.9	78.0	1123.1
SC5		20 kW/m	702—840	755.8	35.6	755.97
		40 kW/m	1180—1460	1340.5	85.3	1362.4
SC6		20 kW/m	743—900	802.7	41.9	822.10
		40 kW/m	1282—1580	1442.7	93.0	1506.2
SC7		20 kW/m	746—940	830.8	50.3	860.44
		40 kW/m	1338—1645	1497.4	98.0	1586.9
SC8		10 kW/m	651—930	780.5	99.5	820.02
		20 kW/m	851—1277	1049.2	122.0	1058.0
		30 kW/m	984—1554	1293.4	157.1	1276.8
		40 kW/m	1242—1769	1546.7	172.1	1635.3

Uno de los parámetros de interés es la conductividad térmica del gas de llenado del gap. Por este motivo, también en los casos FUMEX se proponen barras con anchos variables de gap y diferentes gases de llenado. En algunos de los casos se introdujo xenón como gas de llenado desde un comienzo como una manera de simular un combustible con un estado

avanzado de quemado. La baja conductividad térmica del xenón empeora la conductividad de la mezcla gaseosa, aumentando la temperatura de la barra. Por otra parte, un aumento de la temperatura del sistema genera una mayor liberación de gases a la mezcla y la consecuente disminución de la conductividad.

Tabla V.2: Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de DIONISIO para los experimentos FUMEX.

		Datos exper.	Otros Códigos	DIONI SIO
FUMEX 1	Temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 15kW/m, °C	705	530–760	764.0
	Temp. cent a 20MWd/kgUO ₂ , 15kW/m, °C	740	508–800	531.0
	FGR a EOL, %	1.8	0.05–2.18	0.53
FUMEX 2	Temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 40kW/m, °C		1210–1820	1298.0
	Temp. cent a EOL		480–850	622.0
	FGR a EOL, %	3	1.2–8.5	3.00
	Presión interna a potencia y EOL, bar	20.3	20.1–46	22.11
FUMEX 3 Barra 1	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , °C	960	775–1134	806.0
	temp. cent antes rampa, °C	1240	755–1405	1079.0
	temp. cent al tope de la rampa, °C	1870	1606–2435	2120.0
	FGR antes rampa, °C		0–40.5	21.0
	FGR al tope de la rampa, °C		11.1–69.9	36.52
FUMEX 3 Barra 2	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 25kW/m, °C	1345	930–1501	995.0
	temp. cent antes rampa de potencia, °C	1040	865–1365	1257.0
	temp. cent al tope de la rampa, °C	1470	1327–2136	2005.0
	FGR antes rampa de potencia, %		0.6–44	10.01
	FGR después rampa de potencia, %		5.6–50.5	20.02
FUMEX 3 Barra 3	Temp. Cent a 5MWd/kgUO ₂ , 25kW/m, °C	1080	850–1430	994.0
	Temp. Cent. antes rampa de potencia, °C	940	865–1400	1119.0
	Temp. al tope de la rampa, °C	1615	1351–2254	2064.0
	FGR antes rampa de potencia, %		0.3–55.5	17.8
	FGR después rampa de potencia, %		7.1–61.5	33.87
FUMEX 4 Barra A	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 30 kW/m, °C	1020	876–1398	1150.0
	temp. cent. al tope de la rampa, °C	1125	792–1533	1801.0
	temp. cent a EOL, °C	1225	1035–2246	1690.0
	FRG antes rampa de potencia, %		0.3–10.6	7.62
	FGR después rampa de potencia, %		0.7–28.4	12.90
	FGR a EOL, %		15.4–53.8	21.33
	Presión después rampa, bar	21	4.8–45	22.66
FUMEX 4 Barra B	Temp. Cent a 5MWd/kgUO ₂ , 30 kW/m, °C	1065	953–1522	1173.0
	Temp. Cent. al tope de la rampa, °C	1260	1200–1593	1684.0
	Temp. Cent. a EOL, °C	1290	1213–2203	1780.0
	FRG antes rampa de potencia, %		1.2–24.6	13.7
	FGR después rampa de potencia, %		2.7–38.9	16.00
	FGR a EOL, %		27.5–54.6	21.33
	Presión después de la rampa, bar	23.9	3–45.3	44.0
FUMEX 5	FGR antes de la rampa, %	0	0–43.1	0.019

	FGR a EOL, %	5.8	1–46.8	4.23
	presión al inicio, bar	2.3	2.7–66.6	2.83
	presión a EOL, bar	9.4	3.9–82.6	9.19
FUMEX 6	FGR al final de la irradiación base, %	16.4	0.9–20.2	13.0
	presión al final de la irradiación base, bar		2–25.4	29
FUMEX 6F	FGR a EOL, %	45	8.9–38.2	41.78
	presión a EOL, bar	84.6	40.4–102	72.91
FUMEX 6S	FGR a EOL, %	50	14–50.4	45.26
	presión a EOL, bar	92.3	40.4–106.7	76.82

A continuación se presentan algunos de los resultados gráficos obtenidos en donde, en el esquema pequeño, se muestra la historia de potencia lineal promediada en función del quemado del UO_2 para cada caso, que constituye el dato de entrada de DIONISIO; el gráfico principal consiste en: ‘(a)’ la temperatura central de la pastilla y ‘(b)’ los gases de fisión liberados en función del quemado del UO_2 . Se puede observar que existe una correspondencia funcional entre la respuesta de la temperatura central de la pastilla y la potencia.

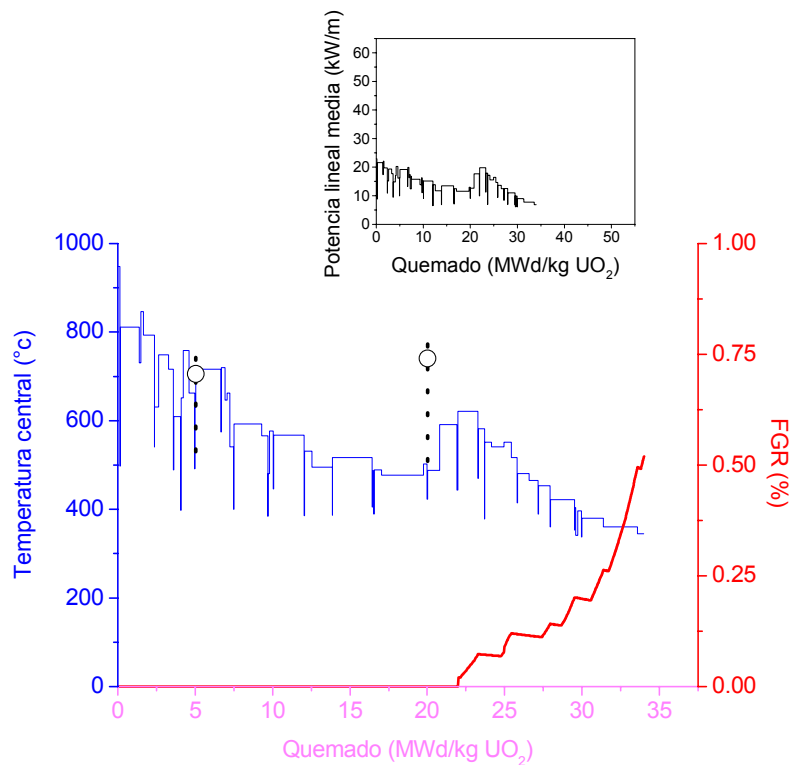


Figura V.2: Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 1. Historia de potencia lineal simplificada.

El experimento FUMEX 1 representa la irradiación de un combustible tipo de un reactor PWR en condiciones de potencia de baja exigencia que no contiene rampas pronunciadas por lo que las temperaturas en el dominio son relativamente bajas. La temperatura central fue medida al cabo de quemados de 5 y 20 MWd/kg UO_2 cuando la potencia era de 15 kW/m. En ambos casos se observa (tabla V.2) que las predicciones de los códigos en general subestiman levemente la temperatura y lo mismo sucede con DIONISIO. En cuanto a los gases de fisión liberados las predicciones de todos los códigos presentan una amplia dispersión. Debido a las condiciones de irradiación y las temperaturas moderadas, la

cantidad de gas producido se encuentra apenas por encima del umbral de saturación de borde de grano, resultando en liberaciones bajas (entre 1-3%) que DIONISIO predice con alto grado de acercamiento.

En el caso del FUMEX 2 el combustible es sometido a potencias lineales más altas, lo que genera un mayor quemado y más exigencia en todas las variables involucradas. En cuanto a la temperatura central, dado que no se realizaron determinaciones experimentales, los resultados de DIONISIO sólo pueden compararse con los de otros códigos observándose que caen en la zona central del rango de resultados; lo mismo ocurre con el porcentaje de liberación de gases de fisión. En este experimento también se mide la presión interna durante la irradiación, que aumenta por el incremento de gas liberado al volumen libre y por el aumento de la temperatura en la barra.

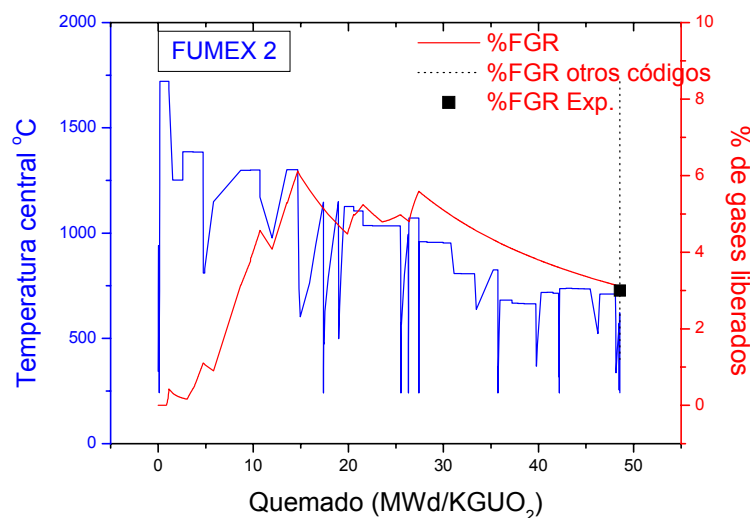


Figura V.3: Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 2. Se presenta el resultado de liberación experimental y el rango predicho por otros códigos.

El experimento FUMEX 3 considera tres barras que se irradiaron en forma estacionaria hasta 30 MWd/kg UO₂ y fueron luego sometidas a una rampa de potencia severa. La barra 1 contiene helio como gas de llenado y un gap de 50 micrones. Las barras 2 y 3 poseen xenón como gas de llenado y sus tamaños de gap son de 50 y 25 micrones respectivamente. El gas xenón junto a un gap pequeño en la última barra simula condiciones de severa liberación de gases y alto quemado. Los diferentes tamaños del gap permiten realizar un test de los modelos de conductividad del gap y sus respuestas a diferencias dimensionales. Se compara la temperatura central y la cantidad de gases liberados en cada barra con los valores experimentales y con los obtenidos mediante otros códigos. La alta temperatura de la barra llenada con helio indica la presencia de gran cantidad de gases de fisión liberados. En el caso de las barras con xenón, inicialmente la conductividad es muy baja y el gap tiende a cerrarse mucho más rápidamente que en el caso del helio. Este efecto contraresta la degradación de la conductividad del interior de la barra lo que da como resultado una distribución de temperatura menor en la pastilla y menor cantidad de gases liberados. En DIONISIO la predicción de la temperatura central es buena cuando el gas de llenado es helio y cae en los rangos de otros códigos cuando se utilizó xenón.

El caso FUMEX 4 es una comparación entre las respuestas de una barra con helio y otra con una mezcla inicial de helio y xenón a diferentes presiones iniciales. La respuesta de DIONISIO para el caso A es adecuada mientras que, en el caso B, se encuentran ciertas divergencias con los resultados experimentales. No es reportada la liberación de gases de fisión experimental pero las respuestas de todos los códigos en general están dentro del mismo rango y responden a las rampas de potencia de igual manera.

El propósito principal de los casos FUMEX 5 y 6 fue analizar la respuesta de los códigos ante rampas pronunciadas a fin de vida. Para el caso 5 la irradiación base es de baja potencia por lo que durante ese período existe muy poca liberación de gases, hasta que al producirse la rampa al final de la vida, se observa el fuerte incremento de la liberación que conlleva el correspondiente incremento en la presión interna. La respuesta de DIONISIO a este último caso es excelente. Para los casos 6F y 6S la respuesta de DIONISIO a la liberación es subestimada levemente lo que explica la diferencia en el resultado de la presión.

2. Experimentos en reactores PHWR

FUMEX II caso 27 3a): El ejercicio FUMEX II contó entre sus casos ideales de análisis con una serie de experimentos numéricos dedicados a la intercomparación de modelos para reactores tipo CANDU. Son en total 11 historias de potencia ideales correspondientes a potencias lineales constantes entre 100 – 600 W/cm (figura V.4)

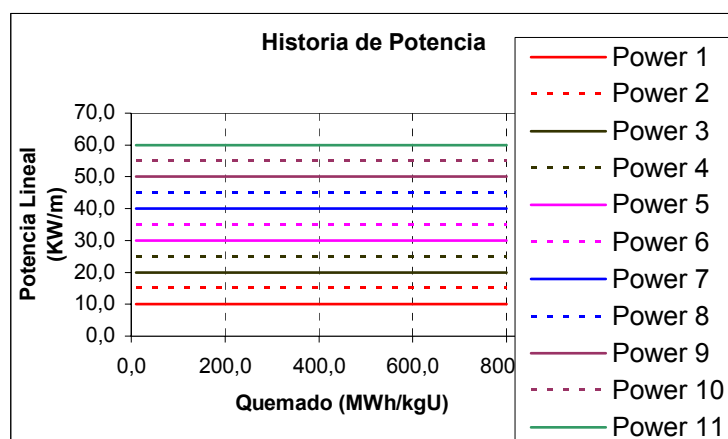


Figura V.4: Historia de potencia idealizada para los FUMEX II 27 3a.

Las historias para todos los casos se continúan hasta alcanzar 800 MWh/KgU (33.33 MWd/KgU). Para cada historia utilizando el código QUEMADO (ver apéndice I) a partir de conocer la temperatura del refrigerante, el coeficiente de transferencia térmica entre el refrigerante y la vaina ($5 \text{ W}/(\text{cm}^2 \text{ K})$) y la temperatura exterior de la vaina se estimó la cantidad de días necesarios en que las barras deben mantenerse en el reactor para alcanzar el quemado correspondiente.

Sobre la base de estas historias se graficaron las temperaturas centrales alcanzadas en cada caso (figura V.5), el % de gases de fisión liberados y la presión interna del elemento (figura V.6), la conductancia gaseosa del gap (figura V.7) y el estado del gap durante la irradiación (figura V.8). Básicamente, a través de esta serie de experimentos, se promueve el ensayo de los modelos incluidos en el código, su respuesta creciente al aumento de la exigencia térmica, la creciente liberación de gases de fisión con el correspondiente aumento

de presión interna. Es interesante notar cómo el gap se cierra al inicio de la vida aún para potencias bajas (situación para la que son diseñadas las vainas CANDU) mostrando una buena respuesta mecánica del código.

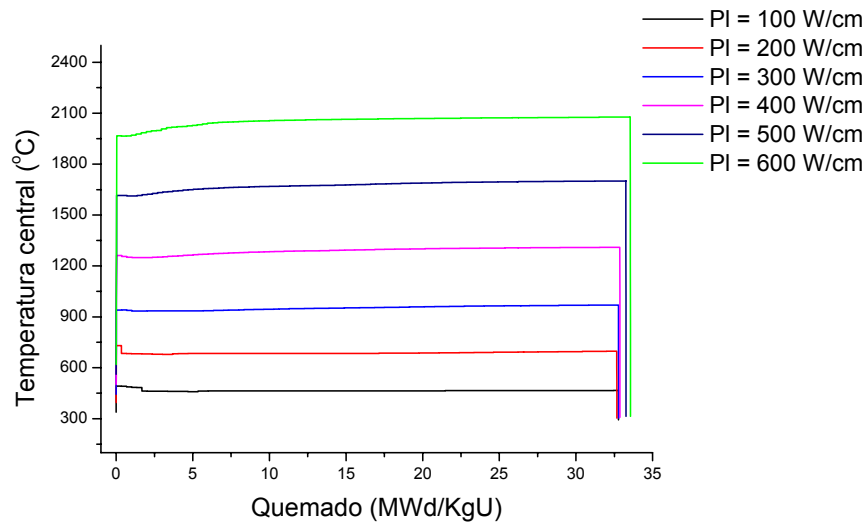


Figura V.5: Temperatura central sobre la pastilla.

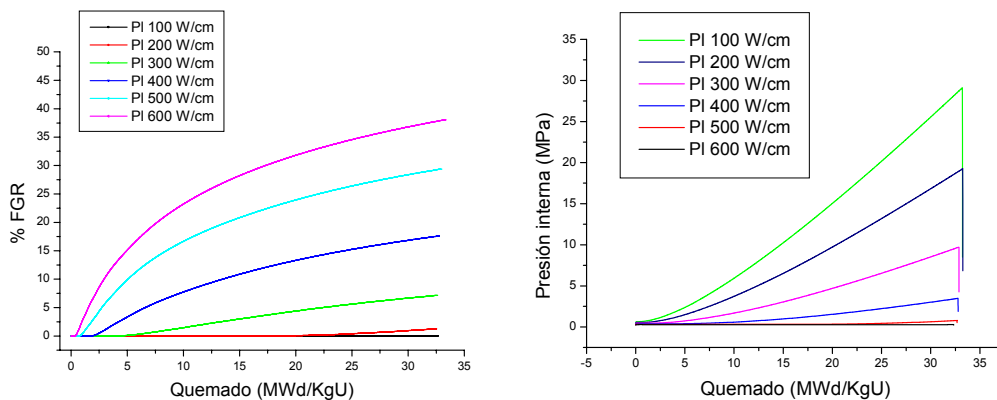


Figura V.6: % FGR y presión interna del elemento.

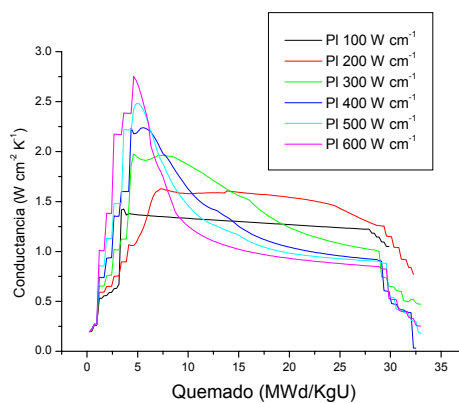


Figura V.7: Conductancia gaseosa del gap.

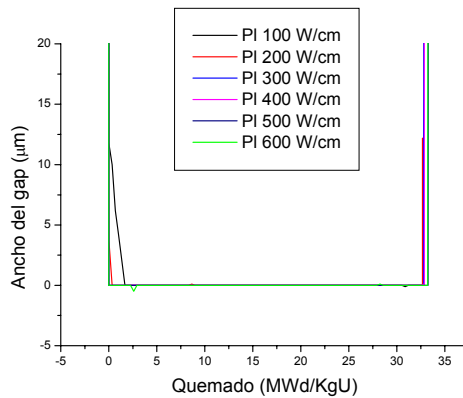


Figura V.8: Ancho del gap durante la irradiación.

Elemento Combustible experimental (EFE) N° 89 y N° 51^[2]: El objetivo primordial de la prueba de irradiación llevada a cabo en el Instituto para la Investigación Nuclear Pitesti, Rumania (Rumania) entre 1985-1987 fue proveer información sobre el comportamiento de elementos combustibles tipo CANDU dentro de los límites de parámetros de diseño. Un hecho particular del diseño de combustibles CANDU es el plenum pequeño. Para analizar dos casos con dos volúmenes diferentes de plenum se proyectaron dos pruebas de irradiación en el dispositivo C2 para el reactor TRIGA de 14MW.

Los elementos combustibles experimentales fueron adecuadamente instrumentados con transductores de presión para seguir su evolución durante la irradiación. Debido a la asimetría axial dentro del núcleo del reactor TRIGA, el elemento experimental CANDU era más corto que el usual. La densidad de las pastillas del elemento N°89 fueron de 10,54 - 10,62 g/cm³, y el gap diametral de 0,0084 cm, cercanos a los valores nominales de diseño de 10,6g/cm³ y 0,0080 cm respectivamente. El segundo elemento, N°51, poseía una densidad de 10,70 - 10,75 g/cm³ y un gap diametral de entre 0,100 - 0,130 mm. Por otro lado el enriquecimiento en U²³⁵ fue de 3,92 %wt en N°89 y 7,04%wt. en el N°51.

Para ambos experimentos la potencia lineal nominal fue de 550 W/cm +/-30 con un quemado de ~5,7340 MWd/kgU para N°89 y 6,0256 MWd/kgU para N°51. El refrigerante se encuentra a una presión de 10,7 MPa. con un pH 9,5-10,5. La temperatura sobre la vaina oscila entre 250-325 °C. En las figuras V.9 se observan las historias de potencia del ensayo y su versión simplificada utilizada en DIONISIO

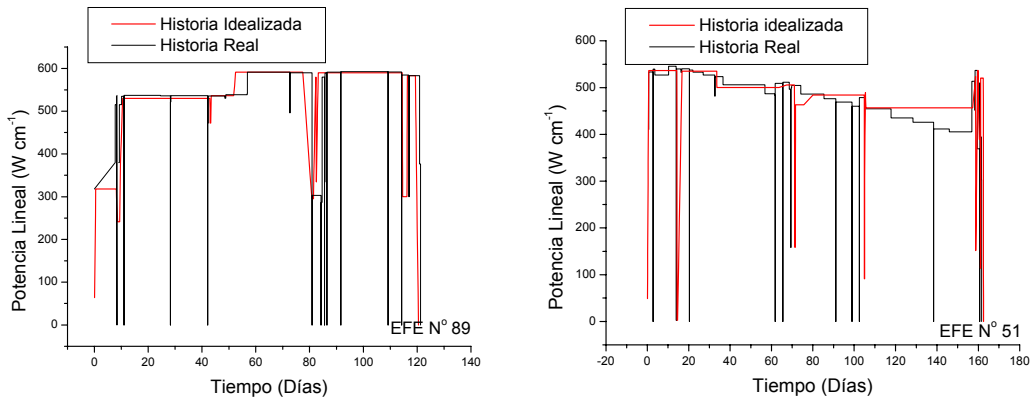


Figura V.9: Historia de potencia ideal y real del elemento 89 y 51.

El ensayo principal consistió en analizar la evolución de la presión interna del elemento en función del tiempo de irradiación para dos elementos CANDU del tipo Rumano. El volumen de gas medido para el EFE 89 fue de 10,79 cc. mientras que el predicho por DIONISIO es de 14,1 cc, situación que puede explicar la sobreestimación de la presión interna al inicio del experimento. Por otro lado el volumen libre a fin de vida para el EFE 89 fue de 1,22 cc mientras que el calculado por DIONISIO alcanza 1,88 cc, por lo que la presión final no alcanza la medida experimentalmente. La mayor temperatura del EFE 89 se debe a la mayor potencia lineal a la que fue sometida y por la formación de una capa de óxido sobre la vaina debido al alto pH del refrigerante, situación que no ocurre en la EFE 51.

Los datos experimentales correspondientes a los gases liberados para el EFE 51 fueron perdidos durante la recolección. La cantidad predicha por DIONISIO es mucho menor a la de la EFE 89 a pesar de que la presión final medida para la barra 51 es mucho más alta, situación que no predice el código. Para entender esta discrepancia podemos considerar que el reactor donde fue irradiado el EFE 51 sufrió dos variaciones abruptas a cero de la potencia (scrams) en unos pocos días, que acelera la microfisuración y la consecuente liberación de gases aumentando la presión para el experimento [2].

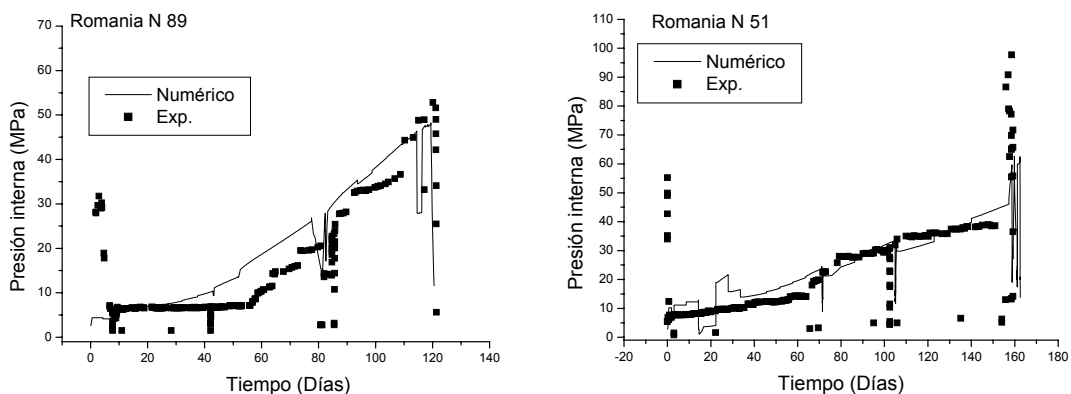


Figura V.10: Presión medida y predicha por DIONISIO, elemento 89 y elemento 51

DIONISIO no posee aún modelos que den cuenta de la microfisuración. Esto representa una limitación tanto en el análisis de alto quemado como en el de rampas de

potencia, situaciones en las que la pastilla desarrolla microfisuraciones que aceleran la liberación de gas. La ausencia de modelos que las representen hace que el código subestime la liberación en esos casos.

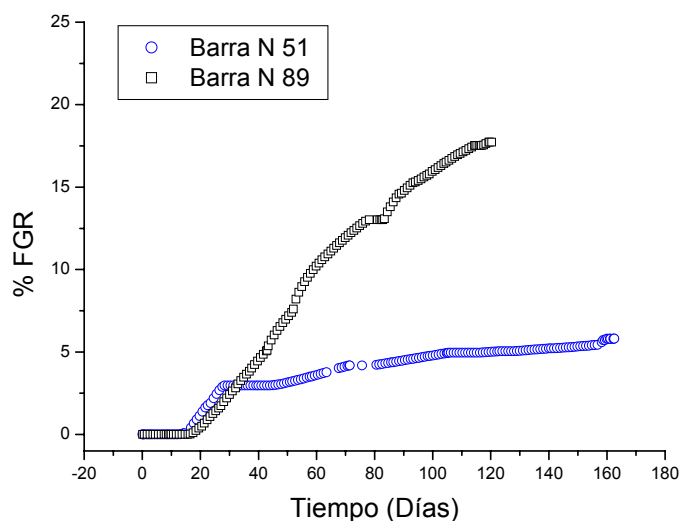


Figura V.11: FGR predicha por DIONISIO para ambos elementos.

AECL Bundles JC y NR^[3]: Estos experimentos corresponden a dos elementos CANDU de 37 barras cada uno irradiados en el reactor Chalk River NRU Bruce-A bajo condiciones del refrigerante correspondientes a las de un reactor PHWR típicas, de 9 a 10.5 MPa de presión y 300°C de temperatura. Los elementos se denominan JC y NR

El enriquecimiento fue de 1.55 wt% de U²³⁵ para JC y 1.44 wt% para NR. Para este último elemento se diseñaron tres tipos de barras con diferentes volúmenes de plenum con la intención de analizar su influencia sobre los parámetros del sistema. Las características distintivas de los cuatro tipos de barras se listan en la tabla V.3. El quemado estimado de ambos elementos fue de 26.7708 MWd/KgU y 9.7917 MWd/KgU para JC y NR respectivamente.

En este experimento no se instrumentaron las barras para seguimiento de ninguna variable y todas las mediciones se realizaron a fin de vida en post irradiación. Se midieron las cantidades en mililitros de gases de fisión generados y sus porcentajes relativos en tipos de gas, las dimensiones diametrales máximas y medias de cada elemento, especialmente las diferencias producidas por el efecto bambú (ridges) y los cambios en longitud del elemento debidos a la irradiación. Por último, se midió el tamaño de grano equiaxial y se observó la presencia de grano columnar y los respectivos radios relativos (radio hasta donde se detecta el tipo de grano/radio del combustible). Todos los resultados y sus comparaciones con los medidos se listan en la tabla V.4.

Tabla V.3: Condiciones de cada barra utilizada en el experimento AECL Bundle JC y NR

	JC	NR		
		Sin Plenum	Plenum 0,35 cm ³	Plenum 0,58 cm ³
Gas de llenado	10% He 90% Ar	100% He	100% He	100% He
Presión	1 atm	1 atm	1 atm	1 atm
Cantidad de gas (ml)	2,5 (2,49 Num)	2,0 (2,07 Num)	2,1 (2,13 Num)	2,7 (2,67 Num)
Pastillas	23	30	29	29
Longitud de la pila (mm)	480,39	480,36	472,19	468,37
Gap Diametral (mm)	0,10	0,067	0,043	0,057
Ancho de la vaina (mm)	0,4385	0,4550	0,4650	0,4650
Material vaina	Zy-4	Zy-4	Zy-4	Zy-4

Tabla V.4: Resultados experimentales y numéricos para AECL-Bundle JC y NR

	JC		NC	
	Exp.	Num.	Exp.	Num.
FGR total (ml)	48,3-60,6	42,52	39,1-42,6	34,15
FGR % Xe	0,8595	0,8471	0,8467	0,8413
Kr	0,0753	0,0941	0,1	0,0934
He	0,0413	0,0058	0,0479	0,0651
Ar	0,0193	0,0528	-	-
Ancho de Ridge (µm)	53-100	84	30-60	64
Diámetro final (mm)	1,314-1,320	1,321- 1,338	1,309-1,314	1,329-1,341
Deformación % plano medio	0,32-0,69	0,86	0,36-0,90	2,31
Deformación % Ridge	1,16-2,1	2,15	(-)0,18-0,12	1,43
Incremento de Longitud %	0,083-0,24	0,97	0,055-0,095	0,27
Tamaño de grano (µm)				
Exterior	8,5	10	-	10
Radio medio	29,75	32,5	-	24,5
Central (columnar)	GC (0,47)	GC (0,56)	GC (0,435)	GC (0,56)

3. Experimento Ciego sobre combustibles PHWR

Se trata de un experimento que se propuso para los participantes en la reunión técnica organizada por la OIEA sobre Modelado de Combustible para Reactores PHWR^[11]. A los participantes del experimento se les proveyó tan solo de una breve descripción del experimento, realizado en un reactor Indio PHWR. Estos elementos combustibles estaban compuestos de 19 barras formando anillos concéntricos: una en el centro, seis en el medio y doce en el exterior. Se irradió hasta un quemado promedio de 15MWD/KgU y se realizaron exámenes post irradiación. La historia de potencia de las barras central, medias y externas se muestra en la figura V.12.

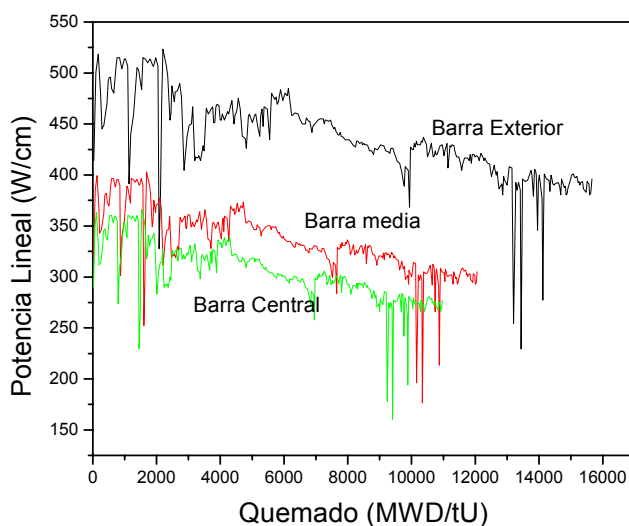


Figura V.12: Historia de potencia para las tres barras consideradas.

A los participantes se les requirió entregar: la temperatura central (figura V.13), la presión interna (figura V.13), la FGR (figura V.14) y el volumen de gas liberado en cc (figura V.14) vs. el quemado en todos los casos, la evolución del tamaño de grano central en función del quemado y el perfil de gases retenidos en la pastilla a fin de vida (figura V.15) así como la serie de datos listadas en la tabla V.5. Contra entrega de los datos requeridos, los organizadores de la reunión enviaron los datos medidos, también presentes en la tabla V.6 en donde se muestran ambos resultados: numéricos y experimentales.

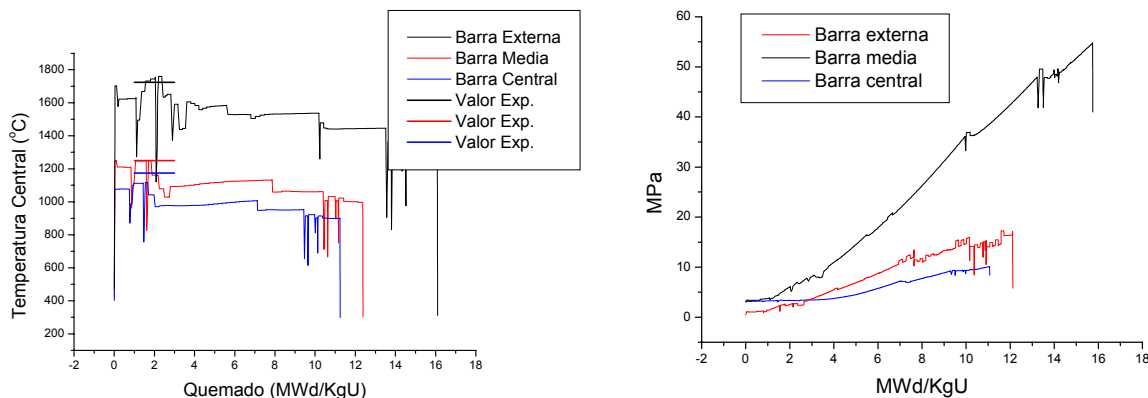


Figura V.13: Temperatura Central y Presión interna vs. Quemado.

Tabla V.5: Resultados numéricos vs. Experimentales.

	Barra externa		Barra media		Barra central	
	Num.	Exp.	Num.	Exp.	Num.	Exp.
Presión interna a fin de vida (en el reactor) (bar)	40.95	--	16.0	--	8.4	
Presión interna a TA (bar)	21.43	24.5	8.37	4.3	4.3	3.2
Gap a fin de vida (μm)	32.00	26	21.50	24	18.5	16.0
Espesor de capa de óxido (μm)	11.52	3.7	7.44	3	5.87	3.3
Volumen libre final (cc)	3.24	3.1 – 3.7 Av.3.36	3.13	3.0 – 3.3 Av.3.15	3.14	3.2
Temperatura central máxima ($^{\circ}\text{C}$)	1761.3	1724	1250.8	1250	1116.4	1174
Volumen de FGR (cc CNPT)	62.5	74.3	24.5	12.3	12.84	9.3
% FGR	14.96	24.1	6.37	1.9	3.0	0.64
Tamaño de grano en el centro de la pastilla (μm)	34.4	33	10.6	19	10	15

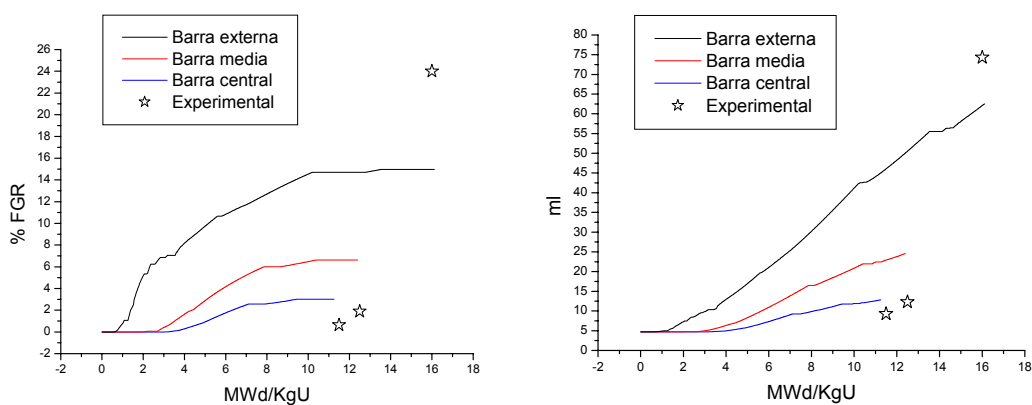


Figura V.14: % FGR y Volumen de gas liberado (cc STP) vs Quemado.

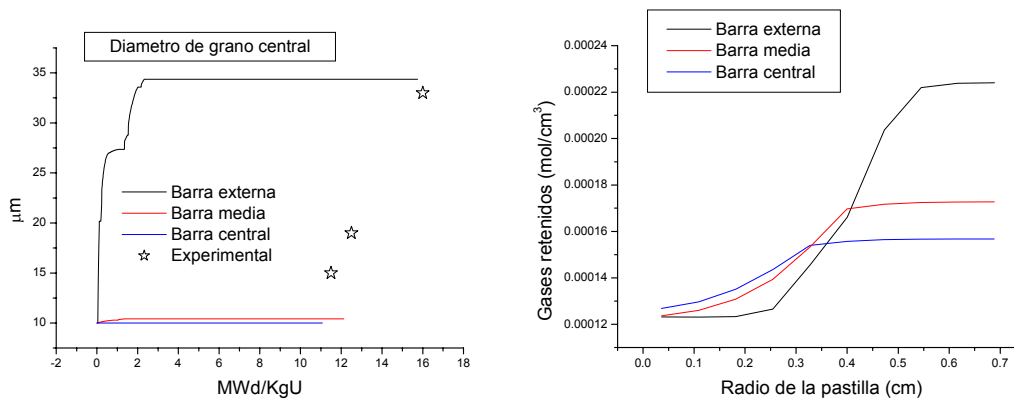


Figura V.15: Evolución del tamaño de grano central y perfil de gases retenidos en la pastilla a fin de vida.

4. Experimentos en reactores PWR/BWR

IFPE/CONTACT^[4]:

La serie de experimentos CONTACT se realizó en el reactor experimental SILOE con los aportes de CEA y FRAMATOME. Se diseñaron pequeñas barras de Zircaloy-4 y pastillas de UO₂ de un PWR de diseño típico de 17x17. El propósito del experimento fue analizar el comportamiento de PCMI bajo irradiación. Sobre cada barra instrumentada se midió la temperatura central, el diámetro externo de la vaina y el FGR.

La barra denominada CONTACT 1 se irradió a una potencia constante, cercana a 400 W/cm hasta un quemado de ~22 MWd/kgU.

La denominada CONTACT 2 se irradió bajo condiciones más leves de potencia cercana a 250 W cm. Alcanzó ~5.5 MWd/kgU de quemado y tuvo que ser desplazada por una falla en los instrumentos de control. Se reemplazó por CONTACT 2bis, la cual alcanzó un quemado de 12.4 MWd/kgU con una potencia aproximadamente constante de ~25W/cm y una presión interna de 0.1-0.2 MPa de helio.

Este experimento fue analizado en el marco del PCI en el capítulo III. En este apartado vamos a comparar las mediciones de temperatura y de FGR con los resultados de DIONISIO. En las figuras V.16 y V.17 se presenta la temperatura central medida y la calculada. Las mediciones de FGR son reproducidas numéricamente y se comparan con las medidas (figura V.18). Para los experimentos CONTACT 2 y 2 bis se observa una leve liberación (0.6% a fin de vida para 2 bis). Los valores para CONTACT 1 son mucho más altos debido a la historia de potencia de mayor magnitud a la que es sometida la barra y alcanza el 18 % a fin de vida.

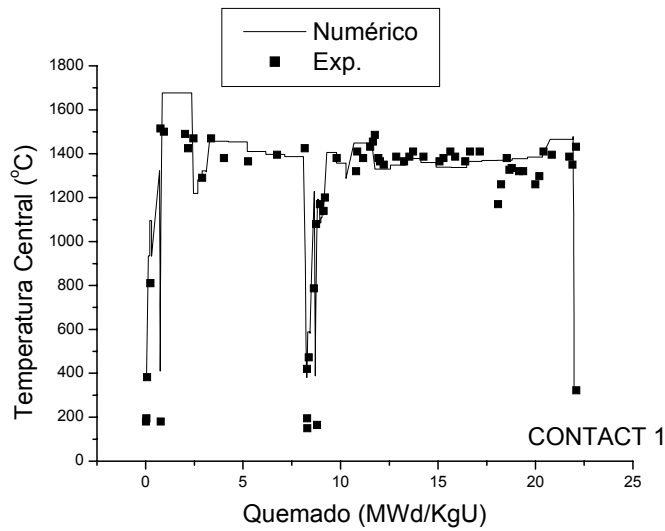


Figura V.16: Temperatura vs. quemado para CONTACT1.

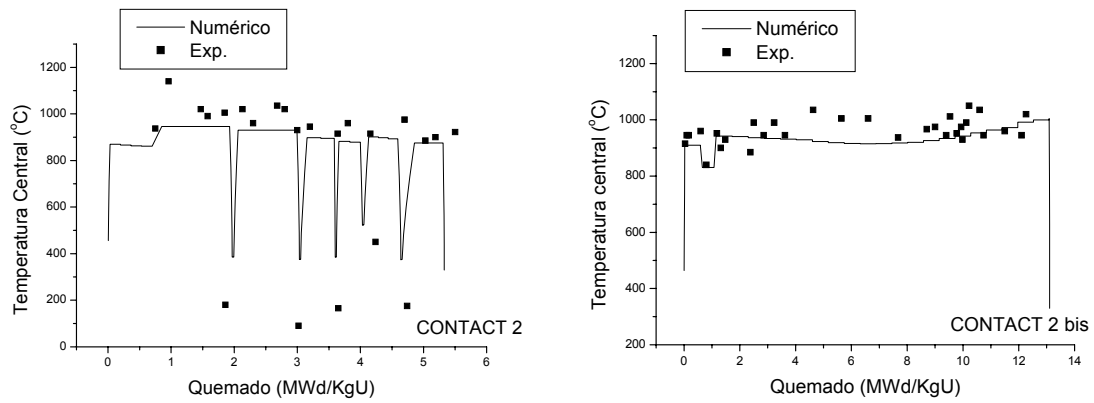


Figura V.17: Temperatura vs. quemado para CONTACT2 y CONTACT2 bis.

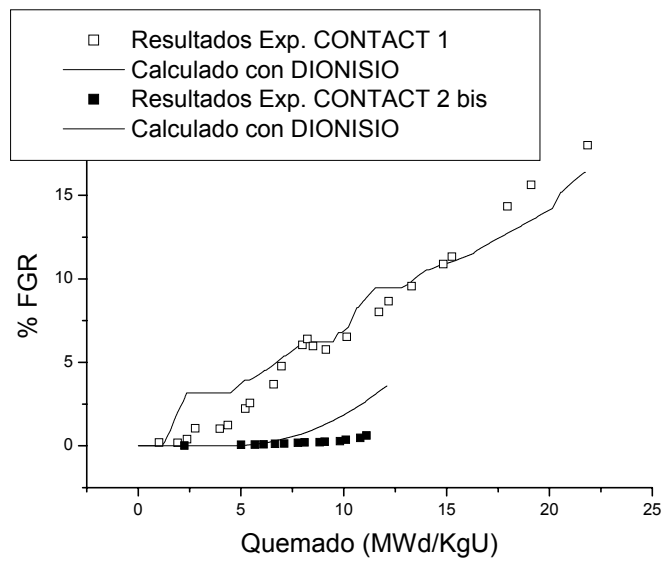


Figura V.18: FGR vs. quemado para CONTACT1 y CONTACT 2 bis.

Respuesta térmica en transitorios: Experimento IFA-507^[5,6]

Este experimento fue llevado a cabo en 1984 en el Reactor Halden con el objetivo de analizar la respuesta térmica de una barra combustible ante una rampa de potencia brusca llevada a cabo en pocos segundos. Después de que se alcanzase un quemado de 18 MWd/KgUO₂ las barras, de UO₂ con un enriquecimiento de 10 % en U²³⁵ y vaina de Zircaloy, fueron instrumentadas con termocuplas en el centro de las pastillas hasta una profundidad de 18 cm dentro de la pila, la cual poseía 48 cm de altura con 37 pastillas en su interior. El experimento reportó la variación de la temperatura en el transitorio generado por la rampa en función del tiempo para dos barras denominadas T3 y T5. La potencia lineal se llevó desde 114 W/cm hasta 226 W/cm en 30 segundos para la barra T3 y de 108 a 216 W/cm para la T5, lo que nos habla de una velocidad de aproximadamente 224 W/cm por minuto, lo cual es muy grande y posible tan solo por tratarse de potencias relativamente bajas.

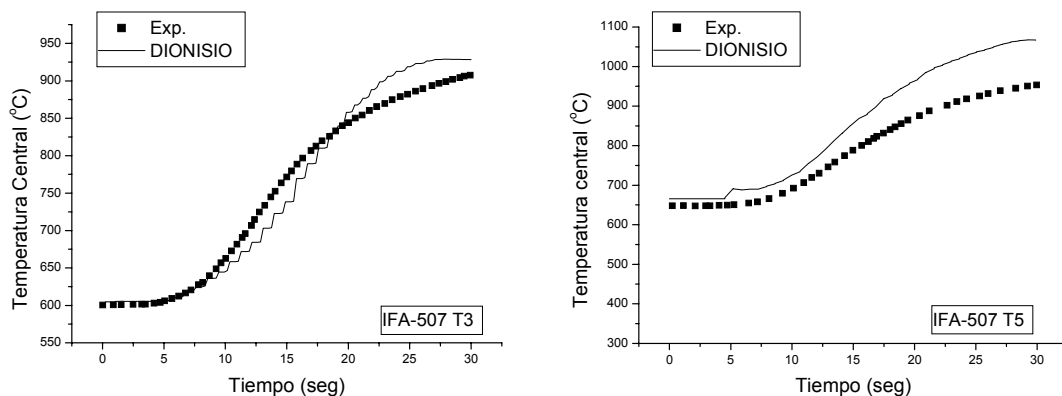


Figura V.19: *Temperatura central vs tiempo del transitorio para T3 y T5.*

Mas allá de los apartamientos mostrados en la barra T5 entre los resultados experimentales y los numéricos, destacamos en este experimento que hablamos de respuestas a variaciones medidas y sucedidas en apenas 30 segundos que generaron una respuesta en DIONISIO de igual forma funcional que la obtenida experimentalmente (figura V.19).

Experimento REGATE L10^[7]

Diseñado para estudiar la liberación de gases de fisión y el comportamiento del diámetro de la vaina durante y después del transitorio realizado a un quemado de 47 MWd/kgU. La irradiación base de las barras se realizó en un reactor PWR para después ser sometido a un proceso de re-irradiación en el reactor experimental SILOE en Grenoble, France. El objetivo principal fue obtener un combustible con un quemado alto después de unos 1.152 días en el reactor, para después someterlo a fuertes rampas de potencia y medir la liberación de gases de fisión, el hinchado de la pastilla y la resistencia a la corrosión de las vainas.

El experimento corresponde a un típico análisis de alto quemado. La extensión del quemado de combustible a valores mayores los 50 MWd/KgU (se proponen los rangos 50-80 MWd/KgU) encierra ciertas complejidades y los modelos utilizados en DIONISIO requieren

cierto número de adaptaciones que el código todavía no contempla. Sin embargo, conocer las deficiencias de los modelos que el código tiene incorporados permite reconocer los puntos débiles que requieren una mejora para su extensión.

En la tabla V.6 se presenta una comparación de las principales predicciones experimentales con las realizadas numéricamente por DIONISIO. En ellas se observan las disimilitudes sobre todo en los referentes a FGR, modelo que debe reprogramarse teniendo en cuenta el aumento de micro fisuraciones del combustible y el consiguiente aumento en la liberación.

Tabla V.6: Resultados experimentales y de DIONISIO para el experimento RIGATE.

	Exp.	DIONISIO
Quemado máximo	51	50,1758
FGR Antes SILOE	1,5 %	4,6%
Después SILOE	10,2%	4,8%
Capa de óxido max. (μm)	28,6	21,6
Diámetro externo max. (cm)		
Antes SILOE	0,9459	0,9571
Después SILOE	0,9515	0,9577
Xe retenido en la pastilla	0,0 a 0,9	0,0018 a 0,0391

Proyecto RISO. Ensayo AN4^[8,9]

El laboratorio RISO, Dinamarca, ha llevado a cabo tres programas de irradiación básicamente para investigar la liberación de gases de fisión y los cambios microestructurales que se producen a alto quemado. El proyecto final tuvo lugar entre 1986 y 1990. Este tipo de ensayos, de difícil reproducción numérica, consiste en alcanzar un cierto grado de quemado con una barra combustible, extraerla del reactor para su reinstrumentación y regresarla al reactor con las termocuplas y transductores de presión incorporados. Para realizar este proceso se congela la barra de modo que los fragmentos de fisión no se muevan de su posición antes de cortar la barra y agujerear las pastillas para introducir las termocuplas.

La primera parte de la irradiación se realiza en el reactor Halden BWR hasta alcanzar unos 38 MWd/kgUO₂. La barra denominada AN4 se re-instrumenta e irradia en el PWR Biblis con una potencia promedio de 256 W/cm pero con picos de hasta 400 W/cm (muy elevadas para este tipo de reactores) por unas 72 horas más. En la figura V.20 se observa la respuesta térmica de la barra AN4 así como el cálculo de DIONISIO, lo que muestra un acuerdo excelente. Sin embargo, no sucede igual para la respuesta de FGR y presión (figuras V.21), en donde la escasa liberación predicha en comparación con la obtenida experimentalmente mantiene la presión muy por debajo de los valores medidos.

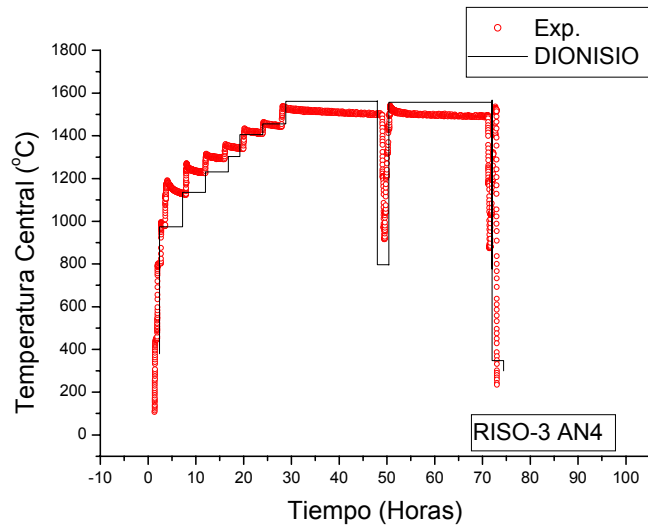


Figura V.20: Temperatura central vs tiempo de reingreso en el reactor para AN4.

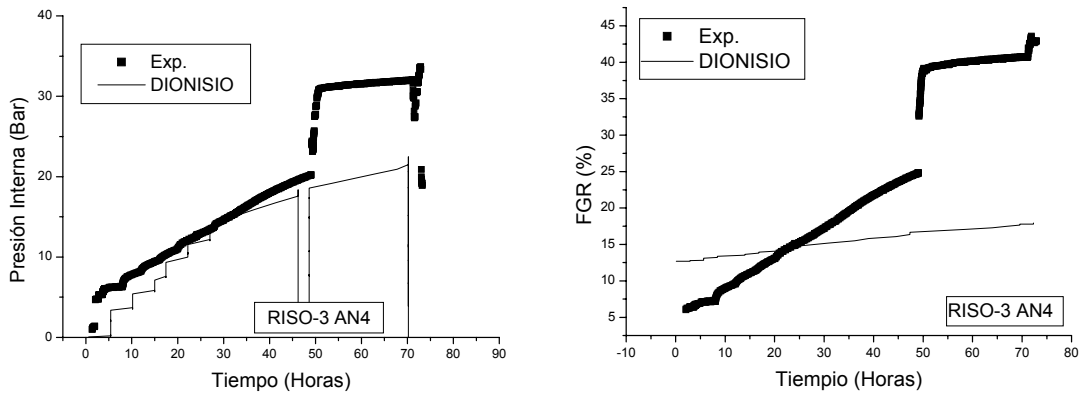


Figura V.21: Presión Interna vs tiempo y FGR vs. Tiempo de reingreso en el reactor para AN4.

Experimento OSIRIS^[10]

El experimento OSIRIS se realizó en reactores PWR sobre barras del tipo comercial (FRAMATOME). En este apartado utilizamos una de las barras instrumentadas y analizadas post irradiación para señalar un modo de trabajo con DIONISIO diferente al mostrado anteriormente. La barra G07 posee 380 cm de longitud y el experimento provee la temperatura externa y condiciones de potencia para 18 zonas distintas a lo largo de la vaina. Con esos datos se arman 18 entradas distintas de DIONISIO y se corren para aunar los resultados y reproducir los datos experimentales sobre la barra completa.

Por otro lado una decimonovena corrida contiene una suerte de historia promedio a partir de la cual se obtienen los valores generales de la barra, expuestos en la tabla V.7. La figura V.22 presenta la deformación radial experimental y calculada con DIONISIO, en donde se observa una cierta sobreestimación de dicha deformación en el código sobre todo en la zona menos exigida de la barra.

La figura V.23 presenta el tamaño de la capa de óxido medida comparada con el obtenido numéricamente para las diferentes condiciones a lo largo del elemento, mostrando cómo DIONISIO está dentro de los valores experimentales.

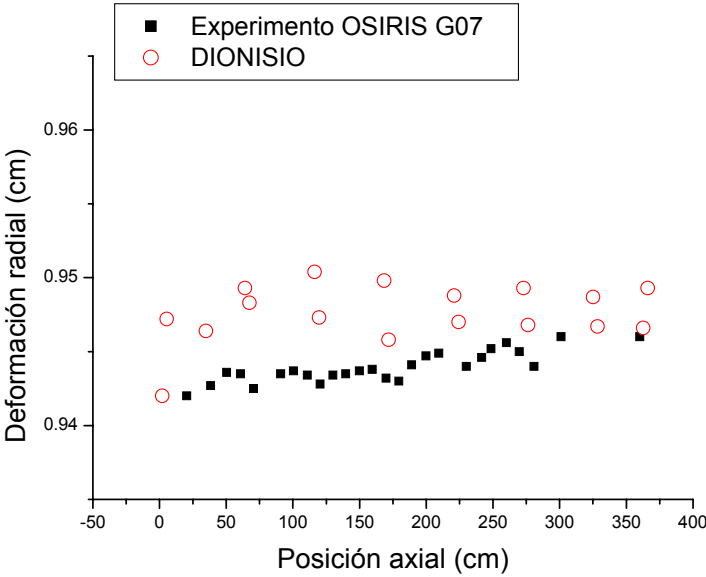


Figura V.22: Tamaño de la deformación radial en función de la posición axial sobre la barra G07.

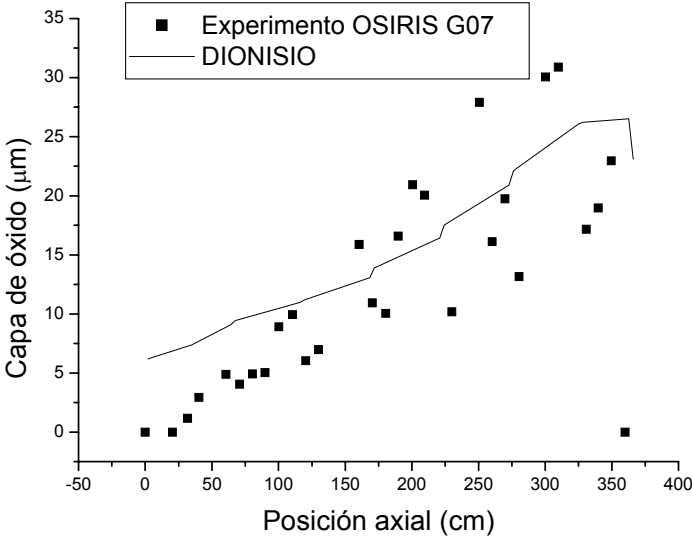


Figura V.23: Tamaño de la capa de óxido en función de la posición axial sobre la barra G07.

Tabla V.7: Comparación de resultados experimentales con los predichos por DIONISIO para el experimento OSIRIS, barra G07.

	Exp.	DIONISIO
Quemado MWd/KgU	38,67	37,73
Volumen de gas final cc	438,8	438
% He	0,977	0,99
% Xe	0,020	0,0018
% Kr	0,0021	0,0002
% FGR	0,49	0,1
P interna (bar)	35,7	59
Volumen interno libre (cc)	12,3	15,59
Cont. de H en la vaina (pp)	350	203
Capa óxido promedio (μm)	29	18,3
Gap final promedio (μm)	11	10,5

5. Discusión

Los resultados arrojados por DIONISIO 1.0 son en general adecuados y dentro de los intervalos de error aceptables para un código de esta naturaleza. Su participación en el experimento FUMEX I, que abarca altos rangos de comportamiento y exigencias, permite posicionarlo a la par, de manera general, de códigos similares. Tanto para condiciones normales de operación como para rangos de quemado no superiores a los 30 MWd/KgU el código responde con precisión. Esa situación se vio ratificada con el excelente comportamiento de DIONISIO en el experimento ciego en el que participó. Estas condiciones lo convierten en una herramienta validada para estudiar el comportamiento de barras combustibles en reactores PHWR así como bajos quemados en PWR/BWR. Una mejora en los modelos de liberación para alto quemado permitiría extender el rango de confiabilidad de sus predicciones.

Básicamente la simplificación de una historia de potencia redundante en una disminución de los pasos involucrados en la resolución del problema. Sin embargo una agregación de pasos, además de la extensión del cálculo, no significa que el mismo posea mayor precisión. Por otro lado, las historias reales poseen tiempos “muertos” debido a la detención del reactor que deben extraerse para una corrida numérica. El programa ArmaHP permite realizar ese trabajo de acuerdo a los parámetros ingresados por el usuario. Una de las opciones principales de ese programa es promediar valores de la historia cuando los valores no superen un cierto umbral. Esto quiere decir que el programa promedia escalones que no superen el valor a elección del usuario.

En el caso del experimento de la figura V.9, al estar interesados en la respuesta de presiones y gases liberados, no resulta tan determinante analizar las rampas (ya que como se explica en el cuerpo de la tesis, DIONISIO no cuenta con modelos que den respuesta a esa variable en relación a la liberación) por lo que se las puede saltar. Cosa que no sucede en los experimentos FUMEX I (figura V.2 y V.3) en donde se representa a la historia con menor

promedio o en el caso del experimento ciego (figuras V.12 y V13) en donde es esencial tener una representación fiel para obtener la mayor cantidad de datos posibles.

La utilización de DIONISIO para simular el comportamiento general de una barra completa se ve demostrada en el experimento OSIRIS, ampliando de esa manera las posibilidades del código. Es destacable además que DIONISIO da respuesta a todos los parámetros que analizan los diferentes experimentos contra los cuales se ha contrastado y a todos los solicitados por los experimentos FUMEX.

Debemos destacar que los casos correspondientes al FUMEX II aún se encuentran en etapa de verificación de resultados y comparación de datos entre códigos por lo que no se ha publicado en forma completa todo su contenido y resultados. Se espera que en el transcurso del año 2007 dicha comunicación esté completa.

Bibliografía

- [1] International Atomic Energy Agency, *Fuel Modelling at Extended Burnup*, IAEA–TECDOC–998, IAEA (1998).
- [2] C. Paraschiv. IAEA/OECD-NEA Fuel Performance Database. (2001).
- [3] Viorel-Ioan ARISMESCU. NEA-1596 IFPE/AECL-BUNDLE Chalk River ONTARIO, (2000).
- [4] Database for Contact Experiments Irradiates at CEA GRENOBLE. Prepared by J A TURNBULL (1998, Revision 1 issued Jan 2003 following comments by D Elenkov).
- [5] IFPE/IFA-507-TF3-TF5. NEA-1729/01. (2004)
- [6] E. Kolstad. A Study of the Thermal Behaviour of LWR Fuel Designs under Transient Power Conditions. HWR-120, (1984).
- [7] FGR and Fuel Swelling during power transient at medium burn-up (SILOE reactor) NEA-1696 IFPE/REGATE L10.3 IFPE/REGATE L10.3. Compiled by: J.A. Turnbull CEA Cadarache DEN/DEC, APR-2004)
- [8] Fuel Performance Data from 3rd Risoe Fission Gas Release. NEA-1493 IFPE/RISOE-III. IFPE/RISOE-III, Risoe National Laboratory, Denmark OCT-1995.
- [9] The third RISO fission gas projects. Bump test AN4 (CB7-2R). REP-FGP3-AN4. RISO Material Department (2000).
- [10] Database for EDF/FRAMATOME/CEA PWR fuel rods. Report FF06E2BV/G07/1067. Revised by J. A. Turnbull, (2003).
- [11] A. Soba, A. Denis. Simulation of PHWR fuel rods behavior with the code DIONISIO 1.0. Technical Meeting on Pressurised Heavy Water Reactor (PHWR) Fuel Modelling. Mumbai, India, (2006)

VI. PLACA/DPLACA: CÓDIGO PARA LA SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE UN COMBUSTIBLE TIPO PLACA MONOLÍTICO/DISPERSO.

1. Introducción

El objetivo principal de esta tesis fue desde un principio la construcción de un código para simular el comportamiento del combustible en reactores de potencia bajo condiciones normales de operación. Sin embargo, en parte debido a la importancia que los reactores de investigación poseen en el Departamento de Combustibles Nucleares de la CNEA, y en parte por la similitud que existe entre los modelos aplicados en uno y otro caso, construir un código para combustibles tipo placa se convirtió en un tópico importante de este trabajo. Importante por la cantidad de horas de trabajo que conllevó su diseño, armado y validación, y también por la calidad y cantidad de resultados obtenidos con el mismo.

El proyecto se gestó en dos partes bien diferenciadas. En una primera instancia, se abordó la simulación de un combustible monolítico de UO_2 con sección rectangular manteniendo los modelos utilizados en DIONISIO. Este trabajo inicial consistió en rediseñar el código de partida para trabajar en geometría cartesiana. Poco después, el auge de los combustibles monolíticos basados en compuestos de uranio-molibdeno llevó a cambiar los modelos para responder a este tipo de material así como también utilizar condiciones de entrada acordes a las características de los reactores de investigación. Por último, el paso a combustibles dispersos requirió la inclusión y generación de nuevos modelos especialmente diseñados para tal fin. Cabe señalar (ver capítulo I, sección 2) que este es el tipo de combustible de uso más generalizado y suele consistir en partículas dispersas en matriz de aluminio. Como se explicó anteriormente en la búsqueda de mayores densidades de uranio se comienza a trabajar con una aleación de uranio-molibdeno, la cual, ventajosa desde el punto de vista de la densidad, tiene el inconveniente de formar una capa de reacción entre la partícula y la matriz que deteriora su comportamiento termomecánico. Este problema se encuentra en pleno desarrollo internacional por lo que los resultados que se obtienen en este trabajo representan una significativa contribución al tema.

De este modo se conformaron dos códigos que son en cierta forma uno: PLACA para combustibles monolíticos y DPLACA para combustibles dispersos. Esta experiencia si bien retrasó la construcción final de DIONISIO, permitió ampliar la herramienta de simulación a los dos sectores relevantes del desarrollo y conocimiento de la tecnología nuclear en CNEA. Los resultados de PLACA/DPLACA son excelentes y su comparación con predicciones experimentales y numéricas realizadas por grupos locales y extranjeros continúa siendo exitosa.

Este capítulo se ha diagramado de la siguiente forma: La próxima sección es una descripción de las características del código, las herramientas computacionales utilizadas y las simplificaciones realizadas. La sección siguiente presenta los modelos incluidos en ambos códigos. La descripción será breve cuando dichos modelos sean similares a los utilizados en DIONISIO y más extensa cuando sean característicos del nuevo código. La sección 4 es una pequeña reseña de resultados utilizados para validar las predicciones del código al

compararlas con experimentos. Al igual que en el caso de DIONISIO, la validación es continua y la retroalimentación constante.

2. Modelado numérico y datos experimentales

El código PLACA utiliza el método de elementos finitos en coordenadas cartesianas, suponiendo deformación plana. Subdivide el dominio con elementos cuadrangulares con interpolación lineal y posee dos visiones que corresponden a dos cortes (figura VI.1): uno en dirección $y-z$ y otro en dirección $x-y$ por lo que se obtiene una representación quasi-tridimensional del sistema. Debido a la forma en que opera la refrigeración de la placa combustible, la distribución de temperatura no es simétrica respecto del plano central $x-y$, de modo que el corte $y-z$ que pasa por el plano medio geométrico de la placa, utiliza la simetría existente en la dirección y para trabajar con la mitad del dominio. En cambio la visión $x-y$ sólo necesita trabajar sobre un cuarto del dominio por las dos simetrías presentes.

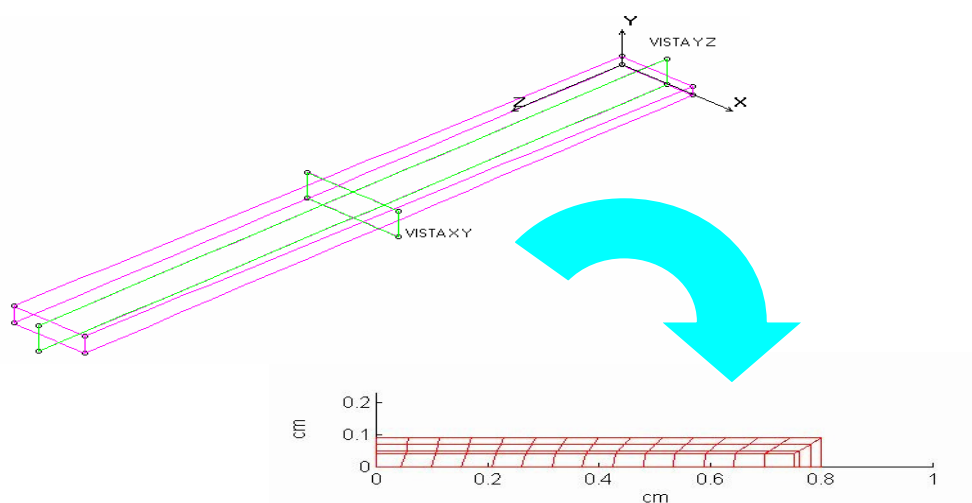


Figura VI.1: Dos visiones de PLACA/DPLACA: $x-y$ e $y-z$.

El código posee un generador de mallas embebido que requiere las dimensiones de la placa combustible como datos para discretizar enteramente el dominio. Además recibe como parámetros de entrada el tipo de combustible, la velocidad de circulación del agua de refrigeración, su caudal y la historia de flujo neutrónico o de potencia lineal (potencia por unidad de longitud de la placa) a la que es sometido el elemento combustible. Esa historia se divide en rampas de potencia y en períodos estacionarios (figura VI.2). Las rampas se subdividen, a su vez, en un número de escalones a elección del programador.

El primer cálculo sobre el dominio es la distribución de temperatura a partir de la potencia lineal o del flujo de neutrones aplicado y de la cantidad de U^{235} presente en el combustible. Una vez determinado el perfil térmico, se calcula la distribución de tensiones y deformaciones. El problema termo-elasto-plástico se resuelve mediante un algoritmo del tipo predictor-corrector.

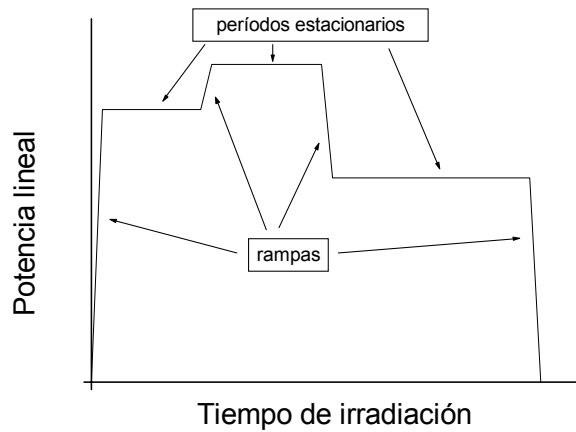


Figura VI.2: Historia de potencia idealizada donde se muestran los diferentes estadios a los que se somete el combustible.

Si el combustible es disperso el módulo de Young, el de Poisson, la tensión de fluencia y los coeficientes de dilatación térmica se determinan mediante modelos que se obtienen de la literatura, que contemplan la fracción en volumen de cada material^[1]. Asimismo, se deben determinar parámetros relacionados con la forma de las partículas combustibles (esféricas o no). En particular, para simular el crecimiento del intermetálico en el sistema UMo-Al, se propone un modelo de interdifusión de Al y de UMo a través de la capa^[2]. Dentro de cada elemento finito las condiciones de temperatura e historia de quemado se suponen uniformes. En cada uno de ellos se elige un volumen representativo del material, conformado por una partícula de UMo, la capa de interacción, la matriz de aluminio y una capa ocupada por poros (figura VI.3), todas ellas según las proporciones en volumen del material. La porosidad inicial disminuye a lo largo del quemado (proceso conocido como *densificación*) a la vez que se acumulan las burbujas de gases de fisión. Los resultados obtenidos en cada volumen representativo se extienden a todo el elemento finito.

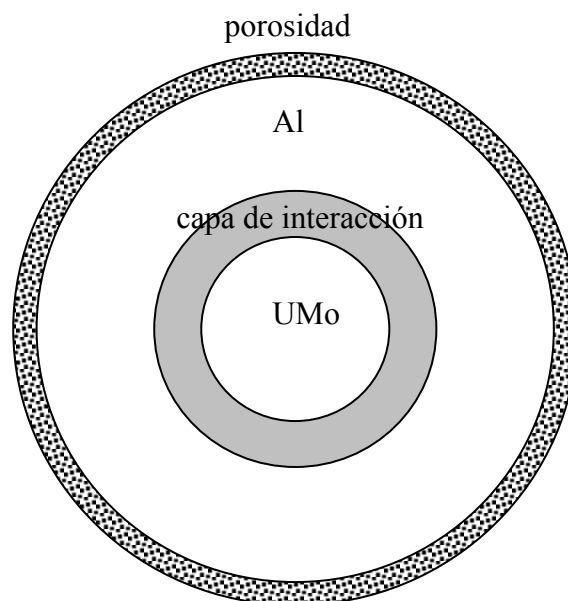


Figura VI.3: Volumen elemental utilizado en el cálculo de interdifusión.

El crecimiento de intermetálicos y de la capa de óxido sobre la vaina y el hinchado son procesos que ocurren mientras el combustible se quema en el reactor y modifican la fracción en volumen de los diferentes materiales del combustible. El tamaño de estas capas, observadas y medidas en diferentes experimentos, depende de la temperatura de trabajo, de la composición inicial del combustible y del material que constituye la vaina^[3, 4]. Por la baja conductividad térmica del óxido y del intermetálico, su presencia acelera los procesos de hinchado y degradación del combustible. Por lo tanto, cada cierto tiempo de quemado, aún en condiciones de potencia constante, el código debe recalculer la distribución térmica y de tensiones del sistema. Por otra parte, algunos parámetros físicos se modifican debido a efectos de la radiación sobre los materiales y deben ser también actualizados.

En la figura VI.4 se muestra un diagrama de flujo que ilustra el modo en que opera el código.

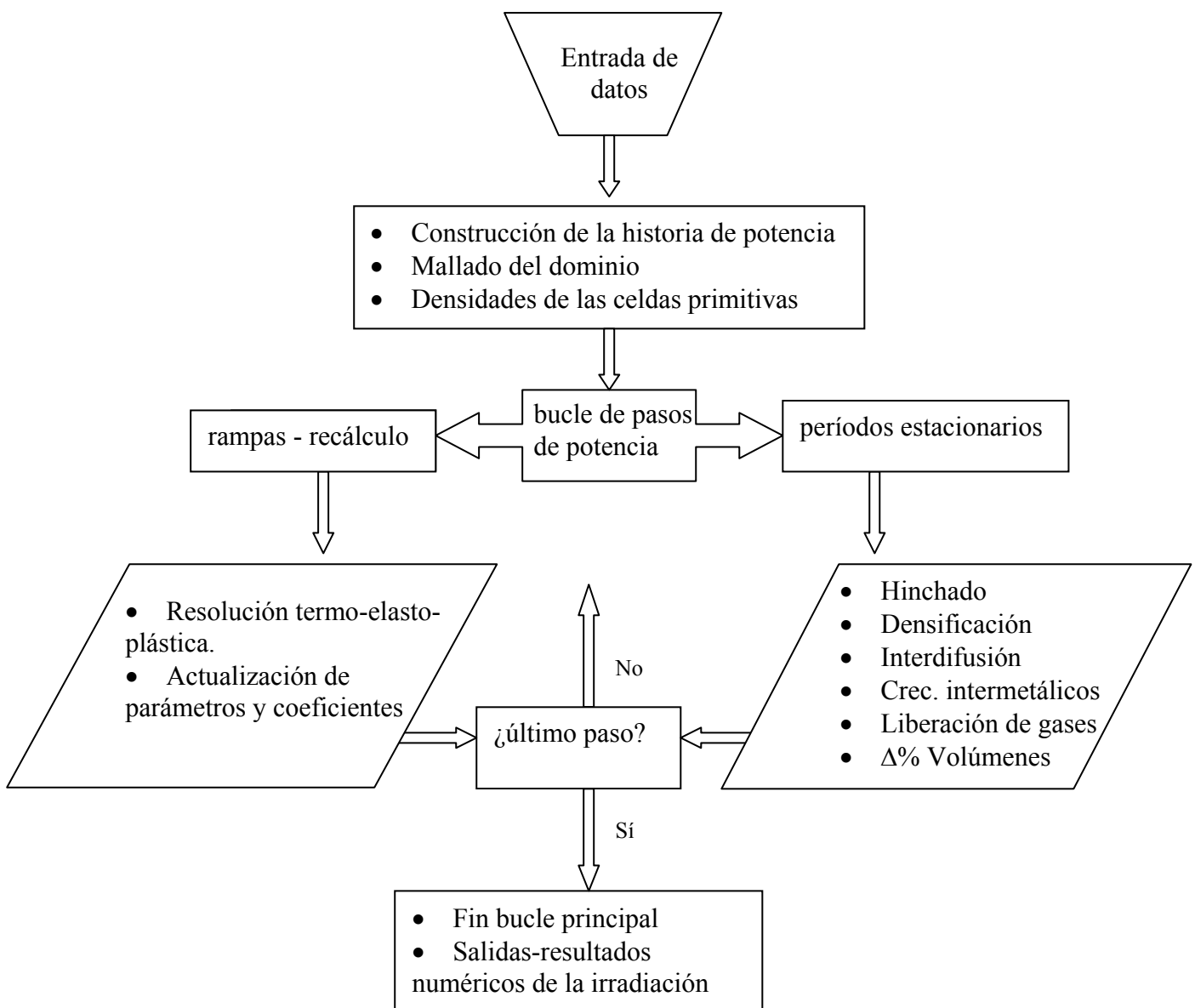


Figura VI.4: Diagrama de flujo del código PLACA/DPLACA

3. Modelos incluidos en PLACA

Materiales involucrados: Cada material dentro de PLACA está caracterizado por sus constantes físicas. La vaina puede ser elegida de aluminio o de Zircaloy. El combustible puede ser de dos tipos: monolítico o disperso. El caso monolítico considera un material único, metálico o cerámico según sea el tipo de aleación utilizada. El material disperso exige el uso de reglas de mezcla. La Tabla VI.1 presenta las leyes de mezcla utilizadas para tratar el compuesto; el subíndice m representa a la matriz y p a la partícula de material fisil. V_j es la fracción en volumen de la fase j ($j=m, p$). En algunos casos se proveen dos reglas de mezcla, que constituyen las cotas superior e inferior a los valores obtenidos experimentalmente. En el caso U-(x%wt)Mo las cotas superiores dan las respuestas más adecuadas para los análisis desarrollados en este trabajo^[5,6].

Tabla VI.1 Constantes utilizadas en materiales compuestos.

	Cota superior	Cota inferior
Módulo de Young, E	$E_m V_m + E_p V_p$	$(E_m E_p) / (E_m V_m + E_p V_p)$
Módulo de Poisson, ν	$\nu_m V_m + \nu_p V_p$	----
Cte. Dilatación Térmica, α	$\alpha_m V_m + \alpha_p V_p$	$(\alpha_m \alpha_p) / (\alpha_m V_m + \alpha_p V_p)$
Tensión de Fluencia, σ_Y	$\sigma_{Ym} V_m + \sigma_{Yp} V_p$	-----

Distribución de temperatura: Una vez determinados los tipos de materiales que componen el sistema, el problema inicial es resolver el que atañe a la distribución de temperatura. Dado un flujo neutrónico, una composición de material fisil y un enriquecimiento, es posible hallar la potencia por unidad de volumen que se generara dentro del combustible placa. El calor producido por unidad de tiempo en un volumen elemental del combustible a una distancia z en la dirección longitudinal estará dada por la ley^[7]

$$H(z) = H_M \cos \frac{\pi z}{l_e}$$

donde H_M es la potencia volumétrica máxima y l_e es un parámetro geométrico del reactor que se denomina longitud extrapolada, mayor que la longitud física de la placa.

Para calcular la distribución de temperatura se resuelve la ecuación del calor estacionaria en un dominio bidimensional en coordenadas cartesianas. Para el corte x - y esta ecuación es

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_{x,j} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa_{y,j} \frac{\partial T}{\partial y} \right) + H_j = 0$$

y de forma análoga para el corte y - z . κ_j es la conductividad térmica para $j =$ núcleo, *gap*, vaina u óxido (en el caso de que existan). Los subíndices x , y o z indican la posibilidad de anisotropía de la conductividad. Para el caso de *gap* o vaina, H_j se considera nulo.

Las condiciones de contorno están dadas por la temperatura $T_s(z)$ en la superficie externa de la vaina (condición de Dirichlet) y $\nabla T=0$ (condición de Neumann) en el resto de la frontera.

Para determinar $T_s(z)$ suponemos que en estado estacionario, la extracción de calor se realiza exclusivamente a través de las caras paralelas al plano x - z . Si el espesor, ancho y

longitud de la placa son q , a y l , respectivamente, y el espesor del núcleo es s , con $s < q$, la potencia lineal producida en el núcleo de la placa está dada por

$$P(z) = asH(z) = P_M \cos\left(\frac{\pi z}{l_e}\right)$$

Si Q es el caudal de agua medido en l/s , c y ρ su calor específico y densidad, de la ecuación de balance de calor

$$P(z)dz = c \cdot \rho \cdot Q \cdot dT$$

se obtiene, integrando, la distribución de temperatura $T_a(z)$ en el agua que circula por el canal de refrigeración

$$T_a(z) = T_i + \frac{P_M l_e}{c\rho Q \pi} \left[\sin \frac{\pi z}{l_e} + \sin \frac{\pi l}{2l_e} \right] \quad \text{para} \quad -\frac{l}{2} \leq z \leq \frac{l}{2}$$

donde T_i es la temperatura del agua al ingreso. Se observa que $T_a(z)$ crece en forma monótona desde T_i en $z = -l/2$ hasta su valor máximo en $z = l/2$.

Sobre la superficie externa de la placa, en contacto con el refrigerante, se produce un salto térmico cuyo valor depende del régimen de flujo de agua (turbulento o laminar) y de los materiales involucrados. Dicho salto se obtiene de la ley de Newton

$$J(z) = h(T_s(z) - T_a(z))$$

donde h es el coeficiente de transferencia térmica de la superficie y $J(z)$ es el flujo de calor a través de cada una de las caras $x-z$. Todo el calor producido en el núcleo fluye a través de las dos superficies ubicadas en $y = -s/2$ y en $y = s/2$, cada una de ellas de área $a.l$. El flujo de calor en cada cara es un vector de dirección y , dado por

$$J(z) = \frac{P(z)}{2a}$$

por lo tanto,

$$T_s(z) = T_a(z) + \frac{P(z)}{2ah} = T_i + \frac{P_M l_e}{c\rho Q \pi} \left[\sin \frac{\pi z}{l_e} + \sin \frac{\pi l}{2l_e} \right] + \frac{P_M}{2ah} \cos \frac{\pi z}{l_e}$$

Para la simulación numérica es necesario considerar todas las fases que median entre el núcleo de la placa y el agua, que depende del diseño del combustible. Si la placa combustible contiene un *gap* entre el núcleo y la vaina (tal es el caso de ciertos combustibles monolíticos), éste estará ocupado por una mezcla de gases (los de fabricación más los productos de fisión) que estarán en contacto con el núcleo de la placa. En ausencia de *gap*, (como ocurre en los combustibles dispersos o monolíticos que se fabrican por colaminación) el núcleo está en contacto directo con la vaina. Esta puede estar cubierta o no de un óxido, dependiendo del material que la constituya, en la superficie de contacto con el agua. Si la vaina es de aluminio, es necesario tener en cuenta la existencia de una capa de óxido pues, por su baja conductividad térmica, aumenta la temperatura del dominio. Su crecimiento es función de la temperatura de trabajo y de la composición química del agua.

El cálculo térmico es altamente dependiente de los coeficientes de conductividad utilizados. Para el caso de combustible monolítico, ellos dependen, en general, sólo de la temperatura y de la porosidad, mientras que en el caso de un combustible disperso, dependen también de la mezcla y, fundamentalmente, de los productos de reacción generados en la interfase combustible-matriz.

En primer lugar, en el caso en que se registre crecimiento del producto de la reacción UMo-Al, la conductividad efectiva de la partícula recubierta por la capa, k_{ac} , se calcula a partir de la conductividad de la aleación que constituye la partícula, k_a , y de la del compuesto que forma la capa, k_c , del siguiente modo^[9]

$$\frac{1}{k_{ac}} = \frac{1 - \frac{\Delta(t)}{r_a(t)}}{k_a} + \frac{\frac{\Delta(t)}{r_a(t)}}{k_c}$$

donde $r_a(t)$ es el radio de la partícula de combustible más el espesor de la capa y $\Delta(t)$ representa al espesor de la capa de interacción que la recubre y la aísla de la matriz. Para obtener la conductividad efectiva del material disperso, k_d , existen diversos modelos empíricos como el desarrollado en CEA-Cadarache^[9]

$$k_d = \frac{-k_{ac} + 3Vk_{ac} + 2k_m - 3Vk_m + \sqrt{8k_{ac}k_m + (k_{ac} - 3Vk_{ac} - 2k_m + 3Vk_m)^2}}{4}$$

donde V es la suma de las fracciones en volumen de combustible y fase de reacción y k_m es la conductividad de la matriz de aluminio.

El efecto de la porosidad ingresa a la conductividad térmica a través de un factor de corrección válido para porosidades inferiores a 0.3^[10]

$$k_{dp} = k_d \exp(-2.14p(t))$$

donde $p(t)$ es la porosidad, cuya dependencia del tiempo se describe más adelante.

Modelos de crecimiento de capas de óxido sobre el aluminio: En PLACA es posible elegir entre cuatro modelos para el crecimiento de la capa de óxido sobre la vaina de aluminio en contacto con el refrigerante. Para vainas de Zircaloy, no se considera crecimiento de óxido debido a que a las temperaturas de trabajo en reactores de investigación su espesor es despreciable. Los modelos de Griess, de Krizt y de Pawel^[11] son válidos para pH del refrigerante de 5 y flujos de agua de hasta 12 m/s y para períodos relativamente cortos de tiempo (20 días). En la tabla VI.2 se listan sus principales características ($T_{r/v}$ temperatura en la interfaz refrigerante vaina en K, q es el flujo de calor en MW/m², x_0 representa el espesor inicial de óxido presente, t el tiempo).

Tabla VI.2: Tres modelos para el crecimiento de óxido sobre aluminio.

	Griess	Kritz	Pawel
c	$1.253810^{+5} \exp(-5913/T_{r/v})$	$8.686 q^{1.28535} \exp(-2416.5/T_{r/v})$	$6.38810^{+7} \exp(-9154/(T_{r/v} + 1.056q))$
x(μm)	$(x_0^{1.28535} + 1.28535 c t)^{0.778}$	$(x_0^{1.28535} + 1.28535 c t)^{0.778}$	$(x_0^{1.351} + 1.351 c t)^{0.74}$

El cuarto modelo es el propuesto por Kim^[11] quien introduce una dependencia de las variables con el pH, otra con la velocidad del refrigerante a través de considerar la solubilidad del óxido en agua y que la conductividad del óxido sigue una ley no lineal dependiendo del espesor. El modelo es válido para un rango de velocidades de entre 3 y 28 m/s y un pH de entre 5.1 y 7.

$$X = 2B \left[\left(\frac{x_0}{2B} \right)^{p+1} + (p+1)ct \right]^{\frac{1}{p+1}}$$

$$B = 0.4264 + \frac{3.2134}{1 + \exp\left(-\frac{v_c - 13.3905}{3.5994}\right)}$$

$$p = 0.119 + 9.223 \exp(-1.46710^8 Cs)$$

$$Cs = \exp\left(-\left(\frac{1211.16}{T_{r/v}} + 13.79\right)(1.81 - 0.14 pH)\right)$$

finalmente la constante c posee la expresión:

$$c = 1.9510^5 \exp\left(\frac{-6071}{T_{r/v} + \frac{0.37qX}{k_{ox}}}\right)$$

El problema elasto-plástico, el hinchado y la dilatación térmica: Las tensiones que soporta la placa, la dilatación térmica y el hinchado producen en ellas deformaciones. Para su análisis el vector deformación total $\{e\}$ se descompone en términos de las diferentes contribuciones:

$$\{e\} = \{e^E\} + \{e^P\} + \{e^{th}\} + \{e^{sw}\}$$

donde $\{e^E\} + \{e^P\}$ representa a las deformaciones elasto-plásticas, $\{e^{th}\}$ a las debidas a la dilatación térmica y $\{e^{sw}\}$ al hinchado. Las componentes de $\{e^E\}$ se relacionan con las de la tensión mediante la ley de Hooke en forma matricial^[12]:

$$\{\sigma\} = [D]\{e^E\}$$

[D] es la matriz del material y contiene sus constantes propias. El problema se resuelve en cada una de las fases que componen el sistema.

Tomando como ejemplo el corte x - y y suponiendo que el problema se describe como de deformación plana, el vector deformación total del sistema se relaciona con las funciones desplazamiento $u(x, y)$ y $v(x, y)$ según las direcciones x e y respectivamente, a través del conjunto de ecuaciones^[12,13]

$$e_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad e_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad e_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}$$

de modo que el vector deformación total $\{e\}$ se indica mediante sus componentes no nulas en la forma

$$\{e\}^T = [e_{xx} \quad e_{yy} \quad e_{xy}]$$

Indicamos con llaves los vectores columna y con corchetes los vectores fila; T indica el traspuesto. En el esquema de deformación plana las componentes no nulas de la tensión son

$$\{\sigma\}^T = [\sigma_{xx} \quad \sigma_{yy} \quad \sigma_{zz} \quad \sigma_{xy}]$$

Las incógnitas del problema son las funciones desplazamiento $u(x, y)$ y $v(x, y)$. Este conjunto de ecuaciones resultan relevantes ya que a través de ellas se acoplan los fenómenos termomecánicos: el hinchado y la dilatación térmica, junto con la deformación elástica y plástica.

Deformación elasto-plástica

Con el aumento progresivo de la temperatura y la distribución de tensiones sobre la placa alguno o varios materiales componentes pueden ingresar en rango de deformación no lineal. El vector de las contribución elastoplástica se expresa como:

$$\{e^E\}_j^T + \{e^P\}_j^T = [e_{xx}^E \quad e_{yy}^E \quad e_{xy}^E]_j + [e_{xx}^P \quad e_{yy}^P \quad e_{xy}^P]_j$$

donde el subíndice j indica al material. La parte elástica se relaciona con la tensión mediante una matriz simétrica D de la forma usual en deformación plana^[14]. El incremento plástico sólo será distinto de cero al superar el límite de fluencia. En este rango, cada material se supone perfectamente plástico con una superficie de fluencia de Von Misses y una regla de flujo de Levy Prandtl-Reuss asociada, de modo que:

$$F = \sigma_{eq} - \sigma_Y$$

donde σ_Y es la tensión de fluencia dada en la tabla VI.1^[14], que puede obtenerse de un gráfico de tensión-deformación y σ_{eq} es la tensión equivalente. La deformación plástica se determina en forma proporcional a la derivada de la función F con respecto a la tensión.

Dilatación térmica

En régimen estacionario la placa sufre un cambio de volumen respecto de las dimensiones originales debido a la dilatación térmica. La distribución no uniforme de temperatura da lugar a una dilatación térmica diferente en cada isoterma del sistema. Además, durante las rampas de potencia, se producen dilataciones o contracciones térmicas de los materiales que se suponen instantáneas. El vector deformación térmica sólo tiene componentes normales, no de corte.

$$\{e^{th}\}_j^T = [e_{xx}^{th} \quad e_{yy}^{th} \quad e_{xy}^{th}]_j = \alpha_j \Delta T [1 \quad 1 \quad 0]$$

donde α_j es el coeficiente de dilatación térmica del material j y ΔT es la variación de temperatura.

Hinchado y Densificación

El hinchado o *swelling* debido a los productos de fisión afecta al compuesto de uranio y, en el caso de combustibles dispersos de UMo también al intermetálico^[15]. Los modelos de hinchado dependen del tipo de combustible utilizado. Existen modelos para combustibles monolíticos y dispersos. En general un modelo de hinchado contiene varios términos que

corresponden a las contribuciones de los productos de fisión sólidos y gaseosos^[9, 16,17] los que sumados proveen el hinchado total. PLACA permite seleccionar entre diversos modelos de hinchado propuestos en la literatura. Entre ellos, algunos son formulaciones empíricas basadas en datos post-irradiación^[1], otros están desarrollados a partir de primeros principios^[18].

En particular, para evaluar la magnitud del hinchado debido a los productos de reacción en aluminuros se acepta la relación empírica^[5]: $4 \times 10^{-23} \dot{f} t$, donde \dot{f} es la tasa de fisiones y se expresa en fisiones/(m³seg).

Konovalov^[19] distingue entre el hinchado por productos sólidos, que posee una pendiente constante, y el producido por elementos gaseosos. Para este último menciona dos mecanismos: el conducido por burbujas que se nutren de productos gaseosos de fisión como el xenón (GD) y el que se nutre de la absorción de vacancias por los poros (BD). Mientras que el mecanismo GD permanece controlado en condiciones normales de operación, el mecanismo BD puede generar, para altas temperaturas, expansión sin límite y producir hinchado catastrófico. Las expresiones para ambos mecanismos son:

$$S_{GD} = 0.25B \left[b_{Xe} + 0.172 \sqrt{\frac{0.25B}{C_b} \left(\frac{k_B T}{\gamma} \right)^{1.5}} \right]$$

donde B es el quemado en fisiones por cm³, b_{Xe} es la constante de Van der Waals del Xe, C_b es la concentración de burbujas y γ es la tensión superficial. Todas las constantes se evalúan suponiendo que el Xe es el gas generado más abundante.

$$S_{BD} = \sqrt{\frac{KD_v}{\alpha_r}} \rho_D (Z_i - Z_v) \tau$$

donde K es la velocidad de generación de vacancias, α_r es el coeficiente de recombinación y D_v es la difusión de vacancias. ρ_D es la densidad estacionaria de dislocaciones móviles, τ es el tiempo de irradiación y $Z_i - Z_v$ es la diferencia efectiva entre creación de intersticiales y absorción de vacancias por dislocaciones.

Como todo el proceso es activado por temperatura, ésta resulta entonces la variable determinante para generar un hinchado descontrolado (figura VI.5). Existe una temperatura crítica en donde el hinchado gaseoso pasa de ser gobernado por el estable GD al descontrolado DB. Si se considera que la temperatura interviene en la activación de la difusión de vacancias y gases de fisión, así como en la cantidad de energía superficial generada, y, además, dichos parámetros energéticos poseen una correlación directa con la temperatura de fundición del compuesto combustible (estimada para el U10%wtMo en 1.520 K), puede calcularse la temperatura crítica de activación descontrolada en aproximadamente 220 °C^[19].

Los productos de fisión, altamente energéticos, destruyen progresivamente los poros de fabricación del combustible. La disminución de la porosidad inicial, p_0 , se conoce como densificación y depende de la tasa de fisiones del combustible.^[19, 20]

En general se observa experimentalmente que la densificación compensa al hinchado en los primeros tiempos de la historia de potencia. El vector deformación correspondiente se compone de la suma de las diferentes contribuciones de hinchado y densificación y tampoco tiene componente de corte

$$\{e^{sw}\}_j^T = [e_{xx}^{sw} \quad e_{yy}^{sw} \quad e_{xy}^{sw}]_j = e_j^{sw} [1 \quad 1 \quad 0]$$

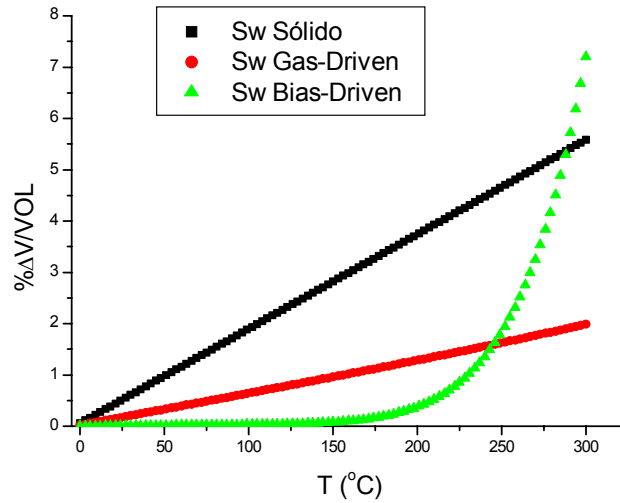


Figura VI.5: Contribuciones al hinchado en el modelo de Konovalov. Nótese el aumento descontrolado del hinchado por vacancias al aumentar la temperatura.

Liberación de gases de fisión: El modelo utilizado es una adaptación a reactores de investigación del propuesto para caracterizar liberación de gases de fisión en combustibles óxidos^[20, 21] ya descrito en el **capítulo II.9** y propone también analizar la resolución de una ecuación de difusión en un grano del material combustible, supuesto esférico, considerando la presencia de fuentes y sumideros en cada elemento finito con los que se discretiza el material fisil. La ecuación diferencial se resuelve para cada elemento en función de la temperatura e historia de ese elemento y el gas acumulado se promedia en toda la placa.

Crecimiento de la capa de interacción en el sistema UMo-Al: La modelización de la interacción UMo-Al requiere del conocimiento de los parámetros que gobiernan el crecimiento de la capa de intermetálico que se forma entre ambos materiales. Para esto, se están llevando a cabo en diversos laboratorios^[4,15,17] experimentos que involucran tanto pares de difusión UMo-Al de geometría plana como así también partículas de UMo dispersas en Al. El crecimiento de la capa de interacción alrededor de las partículas se plantea en DPLACA en términos de un problema de difusión de dos especies en sentidos opuestos a través de la capa, con dos interfaces móviles (problema de Stefan) representadas por las dos superficies límites de la capa de reacción: aleación UMo/capa ($\xi_{a/c}$) y capa/matriz de Al ($\xi_{c/m}$)^[2]. Se ha visto experimentalmente que el uranio y el molibdeno conservan en la capa la misma relación en peso que en la aleación de origen; por lo tanto, para el problema de difusión son consideradas como una única especie. El problema así planteado consiste en dos ecuaciones de difusión para dos perfiles de concentración, el de Al y el de U(Mo)

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{D_i}{r^n} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^n \frac{\partial C_i}{\partial r} \right)$$

donde i refiere a cada especie difusora y n toma el valor 0 ó 2 según se trate de coordenadas cartesianas o esféricas respectivamente; D_i es el coeficiente de difusión de cada especie, supuesto constante.

El modelo propuesto considera que el proceso está controlado por la difusión de las especies, esto es, que las reacciones en cada interfase ocurren en forma instantánea. Esto determina que el consumo de la aleación está gobernado por la velocidad a la que los átomos de aluminio alcanzan la interfase UMo/capa. En forma similar, el desplazamiento de la interfase capa/Al depende sólo de la llegada de los átomos de U, asociados a los de Mo, hasta ella. Las ecuaciones de frontera móvil quedan así expresadas^[2]:

$$\frac{d\xi_{a/c}}{dt} (-C_{c/a}^{Al}) = D_c^{Al} \left. \frac{\partial C_c^{Al}}{\partial r} \right|_{\xi_{a/c}}$$

$$\frac{d\xi_{c/m}}{dt} C_{c/m}^U = -D_c^U \left. \frac{\partial C_c^U}{\partial r} \right|_{\xi_{c/m}}$$

En estas expresiones $C_c^U(r,t)$ y $C_c^{Al}(r,t)$ son las concentraciones de ambas especies en la capa. En las fronteras ellas adoptan los valores $C_{c/m}^U$ y $C_{c/a}^{Al}$, respectivamente; D_c^U y D_c^{Al} son los coeficientes de interdifusión de cada especie en la capa de reacción.

En cada paso temporal, conociendo la temperatura del elemento y el radio de la partícula combustible, se resuelve el problema de interdifusión mencionada y se evalúa tanto el consumo de la partícula como el de la matriz y se acumula el ancho de capa de interacción generado en el paso. Además, se calcula la evolución del anillo de porosidad alrededor de la capa. Con esa información se procede a calcular los porcentajes de volumen de combustible, matriz y capa de interacción generados^[23,24]. Para hallar los valores correspondientes al total del combustible disperso, se realiza un promedio sobre todos los elementos finitos en los que se dividió el dominio.

Si las partículas no son esféricas, calcular los volúmenes de los productos de reacción requiere utilizar factores de forma que dependen de la relación área/volumen de las partículas, cuya geometría debe ser ingresada como dato en DPLACA. El programa cuenta con seis opciones de factores de forma dados por la relación entre cinco figuras regulares: cuadrado, pentágono, hexágono, heptágono y octógono y el correspondiente círculo equivalente. Para combustibles con partículas de UMo irregulares se emplea una elipse equivalente.

Para validar el modelo se reprodujeron diversos experimentos llevados a cabo en Ryu et al^[4] con pares de difusión, en los cuales se localiza el plano de Matano de modo que el movimiento de cada interfase puede referirse al mismo. A partir de este modelo se determinó numéricamente el crecimiento de la capa de interacción U-Mo/Al. Los experimentos y el análisis numérico corresponden a tratamientos de 5 y 40 hs a 550°C y son comparadas en la Tabla VI.3. X_1 y X_2 representa la distancia desde la interface U-Mo/capa de interacción y capa de interacción/Al con el plano de Matano, el cual coincide con la superficie original U-Mo/Al, ξ_0 , i.e. $X_1 = \xi_0 - \xi_{a/c}$ y $X_2 = \xi_{c/m} - \xi_0$. Se obtiene un buen acuerdo entre los datos.

La figura VI.6 presenta la cinética simulada del movimiento de las interfaces. Los cálculos fueron llevados a cabo con los datos correspondientes al tratamiento térmico de 40

hs. Se superponen los puntos experimentales medidos. En el punto medido después de 5 hs se observa un apartamiento pequeño con respecto a la curva calculada. Esto se explica al considerar que el crecimiento de la capa está gobernado al comienzo por la cinética de la reacción más que por el proceso de difusión a través de ella, que es de mayor rango. Esto significa que la cinética no obedece al inicio una ley parabólica aunque dicho efecto es poco importante para tiempos largos.

Tabla VI.3: Comparación entre los valores experimentales y numéricos del ancho de la capa de interacción para tratamientos térmicos de 5 y 40 hs a 550 ° C.

Tiempo de tratamiento (h)	D_U ($\mu\text{m}^2/\text{s}$)	D_{Al} ($\mu\text{m}^2/\text{s}$)	X_1 (μm)		X_2 (μm)		Ancho de la capa(μm)	
			Exp.	Num.	Exp.	Num.	Exp.	Num.
5	14,1731	14,0432	115	98,13	415	354,6	530	452,73
40	29,9431	29,3210	400	403,38	1500	1472,6	1900	1876

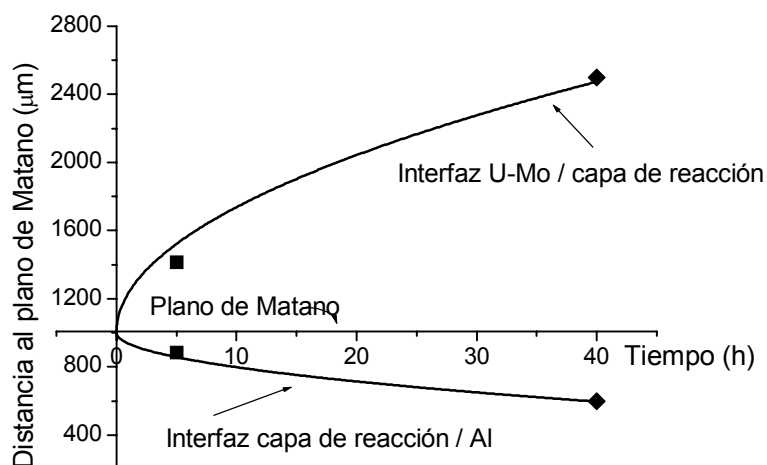


Figura VI.6: Evolución de las interfaces en los pares de difusión de U-Mo/Al tratados a 550°C durante 40 horas. Los puntos representan los resultados experimentales [2].

En Ryu et al [4] se presentan experimentos realizados con esferas de UMo en matriz de aluminio, en donde los tratamientos térmicos producen la reducción del tamaño de las partículas debido al crecimiento de la capa de interacción alrededor de cada partícula (figura VI.7). También parte de esa capa crece hacia el aluminio. La difusión de U y Al del problema se resuelve en coordenadas esféricas y se compara con resultados experimentales.

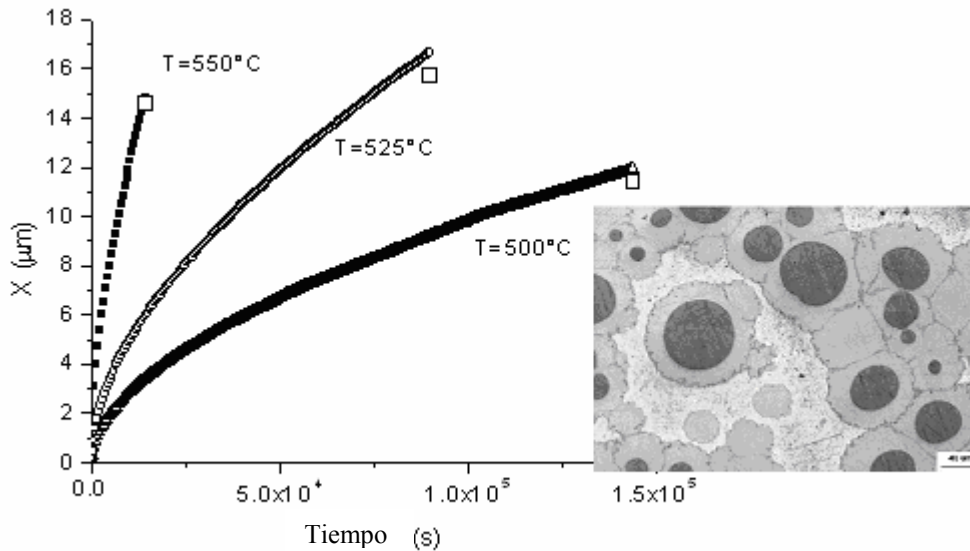


Figura VI.7: Evolución del espesor de las capas de interacción en partículas esféricas para tres diferentes tratamientos térmicos y comparación entre los espesores finales obtenidos y los medidos experimentalmente. (Se presenta una micrografía del estado final alcanzado para 525 °C tomada de ref [4])

4. Validación

Experimento FUTURE

El experimento FUTURE^[9] consistió en la irradiación de placas de U-7%wtMo disperso en Al con una densidad de uranio de 8,5g/cm³ envainadas en aluminio. El compuesto disperso se construyó con polvos de UMo obtenidos por atomización (partículas esféricas), por lo que la porosidad de fabricación resultó relativamente baja (1,1%). Las placas fueron irradiadas durante 40 días a una potencia lineal de aproximadamente 1,2x10⁴ W/cm. La temperatura del refrigerante al ingreso fue de 40°C.

En la figura VI.8 se observan los resultados de la simulación con DPLACA para la distribución de temperaturas en la superficie metálica exterior de la vaina, sobre la capa de óxido y en el refrigerante a lo largo de la dirección longitudinal del combustible. A modo de comparación se presenta un resultado experimental^[9] medido en la zona de mayor exigencia térmica, donde la capa de óxido alcanza su máximo espesor. La temperatura máxima calculada sobre la capa de óxido en contacto con el refrigerante está en el rango de los 120°C, que coincide con la condición medida durante el experimento.

En la figura VI.9 se observan los porcentajes en volumen de combustible, intermetálico y matriz predichos numéricamente, según una vista x-y del programa. La predicción se realiza para la duración total del experimento y se compara con las medidas practicadas al final del mismo en la zona más exigida de la placa, cercana a su mitad geométrica. La Tabla VI.4 presenta los datos de ensayos post-irradiación (PIE) comparados con los predichos por DPLACA para el crecimiento de intermetálico, porcentaje en volumen de compuestos, hinchado, ancho de la capa de óxido y deformaciones de los elementos, entre los que puede observarse gran coincidencia.

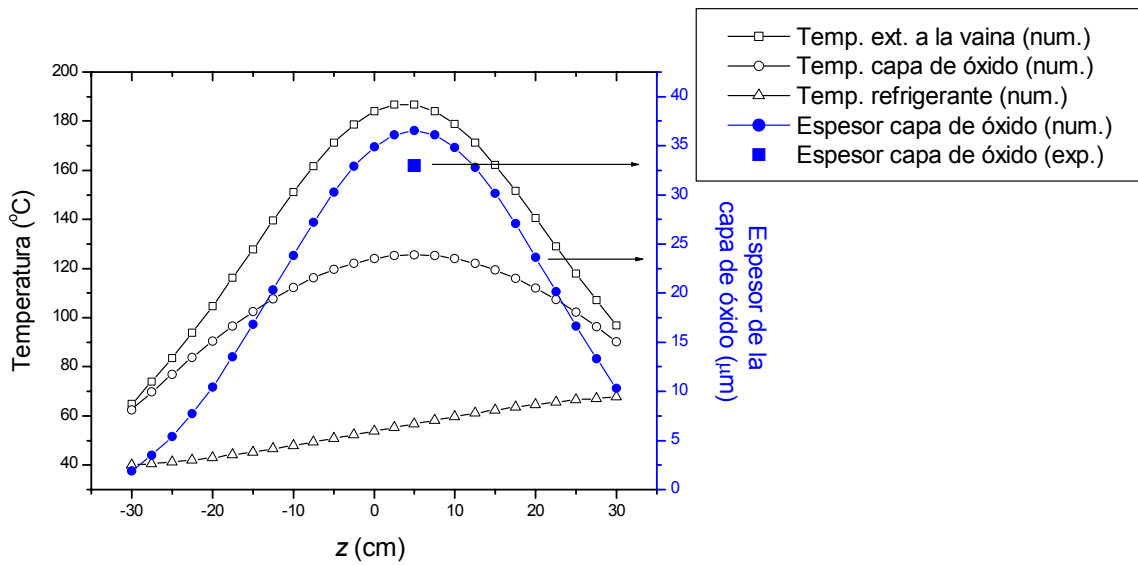


Figura VI.8: Distribución de temperaturas en la superficie de la vaina, sobre la capa de óxido y en el canal de refrigeración, calculadas con DPLACA. Sobre el eje de la derecha se presenta el espesor de la capa de óxido a lo largo de la dirección z comparado con el resultado experimental^[9].

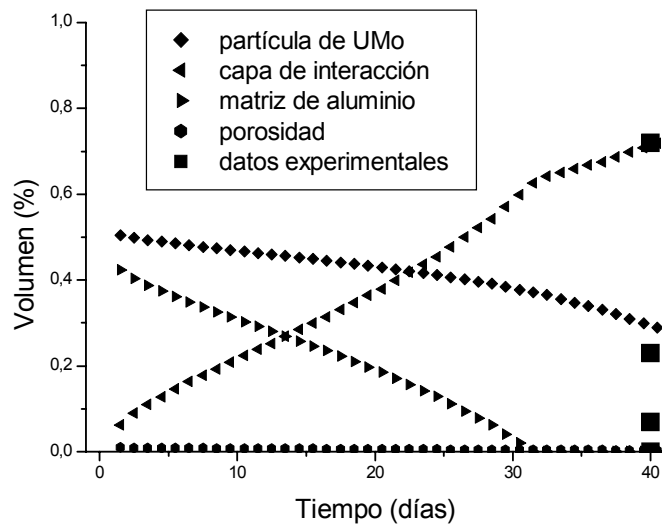


Figura VI.9: Porcentajes en volumen de partícula de UMo, intermetálico, matriz de Al y porosidad en función del tiempo y comparación con datos post-irradiación para la zona media de la placa.

Tabla VI.4: Comparación de los resultados post-irradiación del experimento *FUTURE* con los de *DPLACA*.

	datos PIE	DPLACA
Espesor de la capa de interacción (μm)	11	10,73
Volumen partícula de UMo (%)	0,71	0,717
Volumen intermetálico (%)	0,23	0,288
Volumen matriz de Al (%)	0,06	0,00
Porosidad (%)	0,00	0,0032

Al comparar las predicciones del modelo de interdifusión propuesto con las medidas post-irradiación se observa que están en buen acuerdo. El modelo da una leve subestimación del porcentaje de partícula combustible consumida y sobreestima en forma igualmente leve el de matriz de Al.

En la figura VI.10 se presenta la predicción del modelo de interdifusión para el cálculo del crecimiento de las capas de interacción bajo irradiación, y la consiguiente disminución del radio de las partículas y deterioro de la matriz de Al. Se grafica la posición de las interfases en todo el tiempo del experimento *FUTURE* y el ancho de la capa de interacción, la cual se compara con el resultado experimental. Se predice un valor numérico de $10,73 \mu\text{m}$ a fin de vida, mientras que el reportado experimentalmente es de $11 \mu\text{m}$.

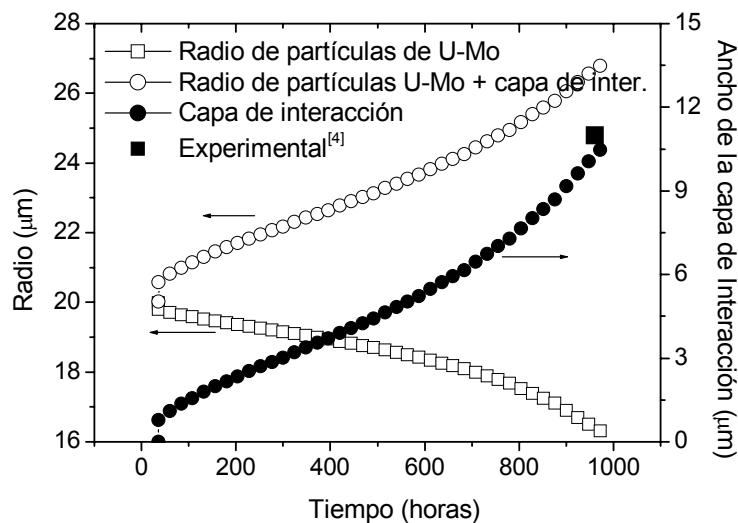


Figura VI.10: Dependencia temporal de la posición de las interfaces partícula/capa de interacción y capa/matriz y ancho de la capa de interacción bajo irradiación.

Los mecanismos que más contribuyen al hinchado son la formación de una capa de reacción de baja densidad y la creación de productos de fisión, particularmente los gases, que forman burbujas. Ambos procesos están controlados por difusión, por lo que son fuertemente dependientes de la temperatura. El hinchado debido a productos sólidos de fisión se considera atómico. Se observa que, comparando placas que han alcanzado un quemado similar ($\text{at}\%^{235}\text{U}$ consumido), aquellas sometidas a menor exigencia térmica sufrieron un hinchado sensiblemente menor. El experimento *FUTURE* se caracterizó por ser de alta exigencia térmica, por lo que tuvo que ser interrumpido antes de completarse debido a la gran deformación de las placas por hinchado. La figura VI.11 es un registro de los diferentes

porcentajes en volumen de los compuestos a fin de vida (40 días de quemado) y corresponde a una visión y - z de toda la placa. Allí puede verse cómo el aluminio prácticamente ha desaparecido en la zona de mayor crecimiento del intermetálico, que corresponde a la mayor temperatura en la dirección longitudinal. La desaparición de la porosidad de fabricación, en cambio, al ser un fenómeno dependiente de la tasa de fisiones, sigue una ley semejante a la distribución de quemado a lo largo de la placa, aunque en forma inversa (figura VI.12). También se observa experimentalmente el cambio de velocidad de crecimiento de los productos de reacción al consumirse el aluminio, situación que también se comprueba numéricamente.

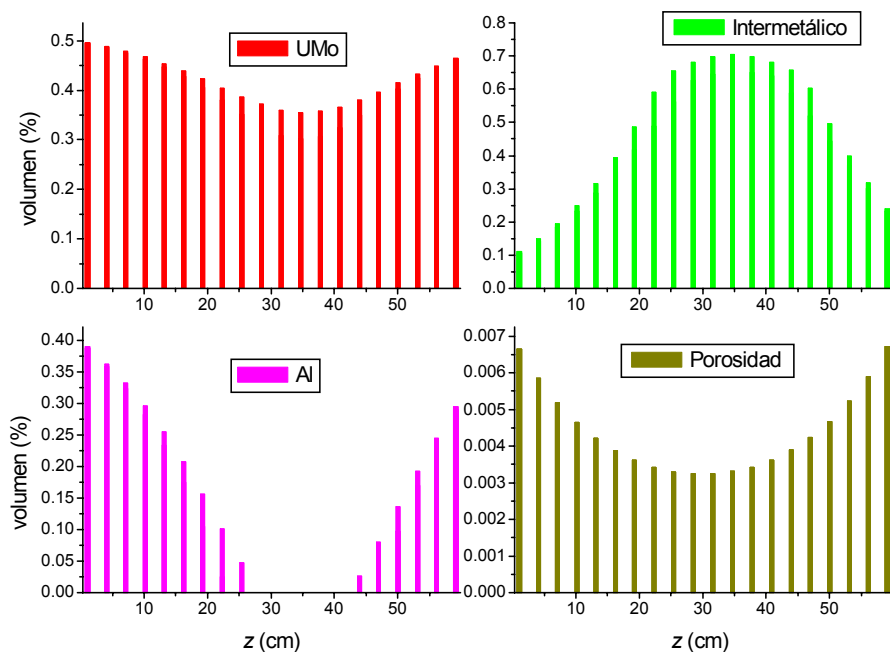


Figura VI.11: Simulación con DPLACA, según una visión y - z , del combustible del experimento *FUTURE*.

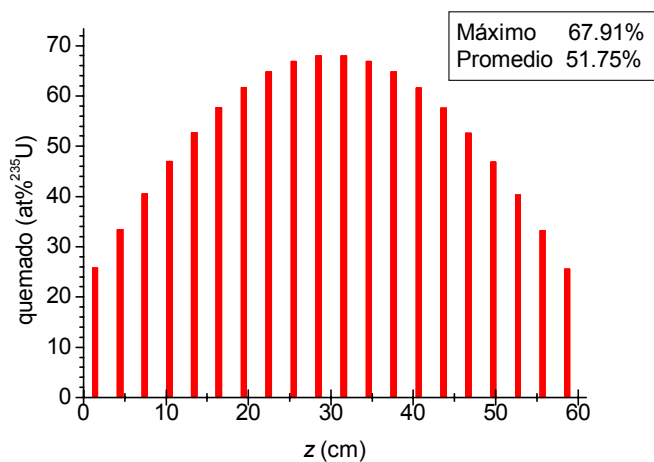


Figura VI.12: Simulación de la distribución del quemado en función de la posición longitudinal en la placa para el combustible del experimento *FUTURE*.

Experimento IRIS

El experimento IRIS 1 se realizó en el reactor OSIRIS^[24] con combustible construido con polvos triturados por lo que las partículas de combustible poseen una geometría irregular y, en consecuencia, la porosidad de fabricación es alta (alrededor de 13%). Las placas fueron construidas con más de 50% en volumen de partículas de aleación de U con 7 y 9 wt%Mo, respectivamente, con una densidad de uranio de alrededor de 8.3 g/cm³. El experimento alcanzó un quemado promedio del 47% y de 67% en su pico máximo. La figura VI.13 muestra la simulación con DPLACA a través de la visión y-z de la evolución de los porcentajes en volumen de cada fase componente y su comparación con los valores medidos al final de la irradiación^[4] en donde se observa un muy buen acuerdo.

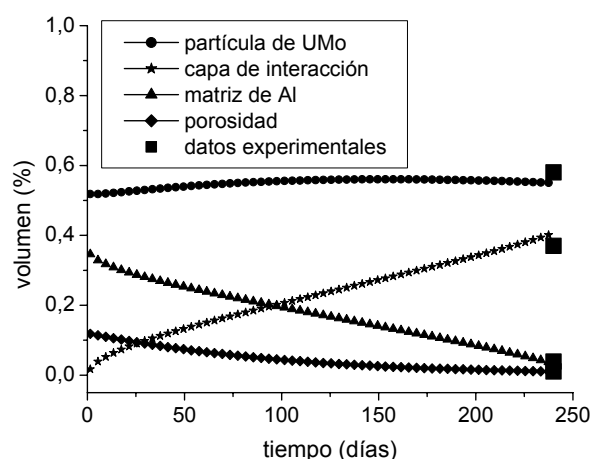


Figura VI.13: Experimento IRIS: simulación de los porcentajes en volumen de las diferentes fases en función del tiempo de quemado comparados con datos post-irradiación.

La Tabla VI.5 presenta los datos de medidas post-irradiación comparados con los numéricos de espesor de capa de interacción, porcentajes en volumen de los diferentes compuestos, incremento de espesor de óxido, hinchado y espesor de la placa en su conjunto. DPLACA tiene en cuenta la forma prismática de la partícula combustible introduciendo un factor de forma (cuadrado) para este experimento.

Tabla VI.5: Datos del experimento IRIS obtenidos en análisis post-irradiación comparados con los predichos por DPLACA.

	PIE	DPLACA
Espesor de la capa de interacción. (μm)	4 – 6	3,67
Volumen de partícula de UMo (%)	0,58	0,5524
Volumen de intermetálico (%)	0,37	0,3957
Volumen de matriz de Al (%)	0,039	0,0418
Volumen de poros (%)	0,011	0,0099
Incremento del espesor de la placa (μm)	77 (5,9%)	64
Espesor de óxido (μm)	16	27
Hinchado (%)	10	11,55

En la figura VI.14 se observa el hinchado total de la placa y las diferentes contribuciones debidas a las partículas de combustible, al intermetálico y a la densificación. La simulación muestra que el hinchado que provocan los productos de fisión sólidos y

gaseosos se compensa en los primeros días de irradiación, con la reducción de porosidad (densificación), observándose cómo la resultante total comienza a crecer a partir de los 75 días de quemado.

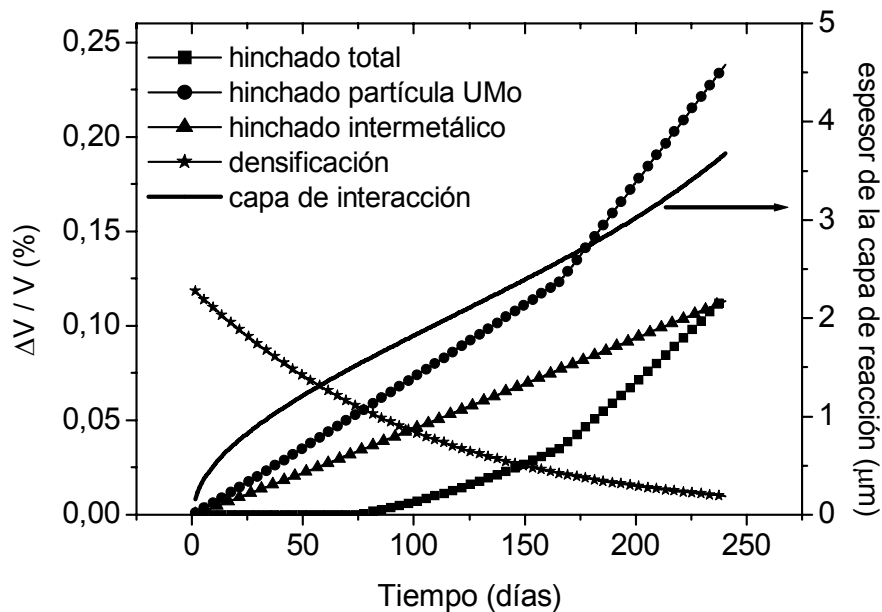


Figura VI.14: Experimento IRIS: hinchado total y diferentes contribuciones al mismo. A la izquierda se grafica la evolución de la capa de interacción con el tiempo.

Experimento AECL

La Comisión de Energía Atómica de Canadá (AECL) realizó una serie de experimentos en el reactor de investigación NRU a partir del año 2003 con mini barras de combustible disperso UMo con dos proporciones en peso de molibdeno, 7 y 10%. El experimento consistía en cuatro mini barras de cada porcentaje en peso con vainas de aluminio, todos con una densidad de 4.5 g cm^{-3} de uranio, que se irradiaron a una potencia lineal nominal de 100 KW/cm hasta alcanzar un quemado de 20% de átomos de U^{235} . En ese punto se publicaron los resultados medidos en el Chalk River Laboratory, que se toman este trabajo para comparar con DPLACA (tabla VI.6). Al tratarse de mini barras cilíndricas, los resultados experimentales son obtenidos en tres regiones, (central, media y periférica), por lo que fueron promediados para compararlos con los datos por DPLACA en base al promedio de temperatura radial. Cabe destacar que el hinchado medido se explica por el crecimiento en la capa de interacción, fuertemente dependiente de la temperatura, como se observa por la variación con la posición radial de la partícula de combustible en la mini barra.

Los análisis por microsonda de porciones del material irradiado muestran el proceso de interdifusión de UMo y Al y la distribución en peso de los elementos involucrados. Dichos datos se comparan con los resultados predichos por DPLACA para el diámetro final alcanzado por la partícula de UMo, el radio de la zona de interacción interior a la partícula de UMo y la zona en que dicha capa se extendió hacia la matriz de aluminio. Entre ambos conjuntos se observa una coincidencia cualitativa.

Tabla VI.6: Datos experimentales comparados con los calculados en PLACA

	Temp. Promedio (°C)	Hinchado (%)	Interm. Prom. (%)
U-7Mo Exp	250	~6	44,33
U-7Mo Num	247	~4,3	~49
U-10Mo Exp	250	~5,5	34,667
U-10Mo Num	240	~4,0	~37,0

Experimento RERTR-3

En el experimento RERTR-3 se irradiaron 47 mini placas de dimensiones: 2,2758x0,5524x0,1524 cm para la placa completa y de 2,1996x0,4762x0,0762cm para el compuesto de UMo. Las mismas se sometieron a condiciones consideradas agresivas para un reactor de experimentación. Se alcanzaron quemados de entre 25 y 40 % de U²³⁵. Basadas en los experimentos RERTR-1 y -2 se contruyeron placas con UMoXwt%Mo con X entre 6 y 10, con una carga de aproximadamente 50% en volumen de partículas, que proporciona una densidad media de uranio de 8,5g/cm³

Los resultados PIE de esos experimentos mostraron un comportamiento aceptable con un hinchado relativamente bajo. Sin embargo, las elevadas temperaturas que alcanzaron los experimentos resultaron en espesores de capas de interacción grandes; de hecho, tan extensas que en las porciones centrales de algunas placas (las que se encontraban en la zona de mayor exigencia del reactor) no se halló rastro de matriz de Al. En general se observa que las aleaciones con mayor porcentaje de Mo reaccionan menos que las de menor cantidad.

Tabla VI.7: Resultados de miniplacas en el RERTR-3

	Burnup %U235	Peak Heat flux (W/cm ²)	Peak fuel temperature (C)	Fracción de volumen de la reacción	Incremento del espesor de la placa (µm)
Rango Experimental	0,2 – 0,4	150 – 400	110-250	0,075-0,4	20 - 80
A06 U10Mo	21,71 (Pro) 30 (Max)	328 (BOL) 342 (EOL)	157 (BOL) 161 (EOL)	0,10 (Pro) 0,14 (Max)	31
A10 U10Mo	24,59 (Pro) 31,8 (Max)	380 (BOL) 400 (EOL)	179 (BOL) 186 (EOL)	0,15 (Pro) 0,23 (Max)	52
C13 U6Mo	23,12 (Pro) 29,9 (Max)	394 (BOL) 421 (EOL)	191 (BOL) 198 (EOL)	0,21 (Pro) 0,33 (Max)	66
R04 U6Mo (esféricas)	25 (Pro) 33 (Max)	408 (BOL) 441 (EOL)	204 (BOL) 215 (EOL)	0,28 (Pro) 0,48 (Max)	82
S03 U6Mo (esféricas)	26 (Pro) 34 (Max)	406 (BOL) 439 (EOL)	191 (BOL) 200 (EOL)	0,33 (Pro) 0,56 (Max)	68
V03 U10Mo (esféricas)	25 (Pro) 32 (Max)	394 (BOL) 423 (EOL)	181 (BOL) 190 (EOL)	0,26 (Pro) 0,42 (Max)	59
V07 U10Mo (esféricas)	25 (Pro) 32,8 (Max)	394 (BOL) 423 (EOL)	181 (BOL) 190 (EOL)	0,26 (Pro) 0,42 (Max)	58

En la tabla VI.7 se resumen los resultados para siete de esas mini placas. Los datos experimentales obtenidos sólo contemplan los rangos medidos de cada magnitud. Las mini placas se envainaron dentro de una placa de dimensiones estándar para un reactor de experimentación por lo que la irradiación de cada uno fue diferente. Como no se conoce la

posición dentro de las placas de cada una de las mini placas se las somete a una historia de irradiación promedio para todas. Sin embargo es posible hallar que los resultados numéricos concuerdan con los valores más altos de los rangos experimentales. Además puede notarse el hecho comprobable experimentalmente de que las placas con menor contenido de molibdeno presentan capas de reacción mayores y por lo tanto mayor porcentaje en volumen de compuesto de reacción.

En la figura VI.15 se presenta el quemado a lo largo de la placa y su valor medio, así como el porcentaje en volumen de aluminio. Se observa cómo el mismo se consume en mayor medida en la zona central debido a la mayor temperatura. La conductividad del núcleo de la placa pasa de 0,74 W/cm/C nominal al principio de la irradiación, a 0,13 para una capa de interacción de 34% (flujo constante a 350 W/cm²)

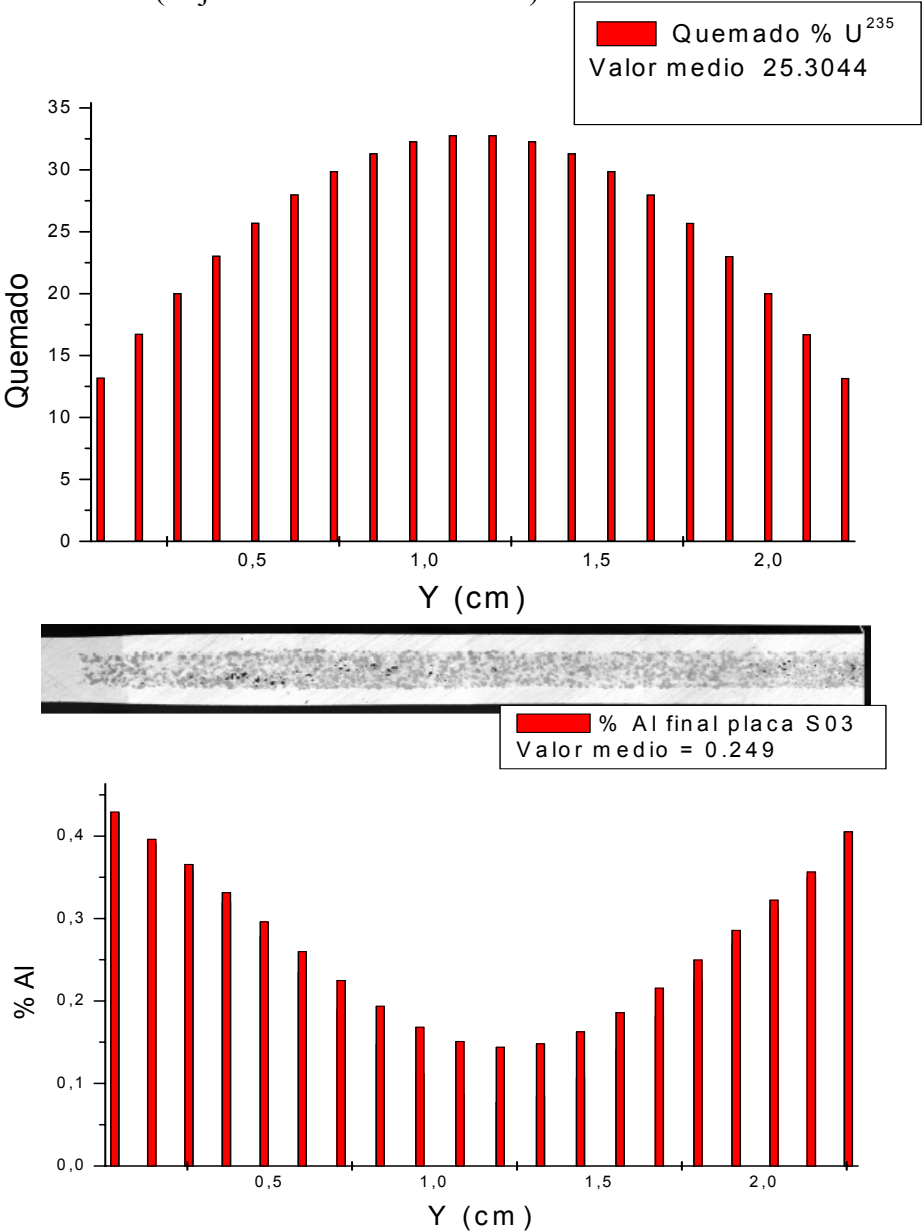


Figura VI.15: Quemado medio y % final en volumen de aluminio para la mini placa S03.

5. Discusión

Muchos de los modelos incluidos en PLACA son tomados con mínimas modificaciones, de DIONISIO. Otros, como en el caso del modelo interdifusional, fue desarrollado expresamente para su inclusión en el código. La utilización de modelos ampliamente testeados es una de las razones de los excelentes resultados obtenidos con DPLACA. Cabe destacar que comparaciones realizadas con códigos similares desarrollados por otros países posiciona a PLACA/DPLACA en un lugar privilegiado ya que da amplia respuesta no sólo a las problemáticas térmicas y a las relacionadas con el hinchado de los combustibles, sino que además provee una respuesta mecánica completa del problema.

Bibliografía

- [1] M.K. Meyer, G.L. Hofman, Properties of U-Mo Alloy dispersion fuel. IAEA Technical Committee on the Development of High Density U-Mo Dispersion Fuels, Viena, Austria, (2003).
- [2] A. Soba, A. Denis, An interdiffusional model for prediction of the interaction layer growth in the system Uranium-Molybdenum / Aluminum. *Journal of Nuclear Materials* (En prensa).
- [3] A. Leenaers, S. van den Berghe, E. Koonen, C. Jarousse, F. Huet, M. Trotabas, M. Boyard, S. Guillot, L. Sannen, M. Verwerft, Post-irradiation examination of uranium-7 wt% molybdenum atomized dispersion fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 335 39-47, (2004).
- [4] H.J. Ryu, Y.S. Han, J.M. Park, S.D. Park, C.K. Kim. Reaction layer growth and reaction heat of U-Mo/Al dispersion fuels using centrifugally atomized powders. *Journal of Nuclear Materials*, 321, 210-220 (2003).
- [5] S.L. Hayes, M.K. Meyer, G.L. Hofman, J.L. Snelgrove. U-Mo/Al dispersion fuel modelling. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Viena, Austria, (2004).
- [6] L.P. Kollar. Approximate analysis of the temperature induced stresses and deformations of composite shells. *Journal of Composite Materials*, vol 28, 5, (1994).
- [7] A.R. Foster, R.L. Wrigth Jr.. Basic Nuclear Engineering. Allyn and Bacon Series in Mechanical Engineering and Applied Mechanics, 4th Ed., Boston, (1983).
- [8] Y.S. Kim, G.L. Hofman, N.A. Hanan, J.L. Snelgrove. Prediction model for oxide thickness on aluminum alloy cladding during irradiation. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Chicago, USA, (2003).
- [9] V. Marelle, F. Huet, Thermo-Mechanical modelling of U-Mo fuels with MAIA. RRFM, Munchen, Germany, March (2004).
- [10] M.E. Cunningham, K.L. Peddicord. Heat conduction in spheres packed in an infinite regular cubical array. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 24, pp 1081-1088, (1981).
- [11] Y. S. Kim, G.L. Hofman, N.A. Hanan, J.L. Snelgrove. Prediction model for oxide thickness on aluminum alloy cladding during irradiation. RERTR 2003, Chicago (2003).
- [12] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press, (1959).
- [13] K.J. Bathe. *Finite element procedures*. Prentice Hall, (1996).
- [14] J.N. Reddy. *Finite element method*. Mac Graw-Hill, (1993).
- [15] G.L. Hofman. Crystal structure stability and fission gas swelling in intermetallic uranium compounds. *Journal of Nuclear Materials*, 140, 256-263 (1986).

- [16] A. Olson. The PLTEMP V2.1 code. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Chicago, USA, (2003).
- [17] K. Kim, J. Park, Ch. Kim, G.L. Hofman, M.K. Meyer. Irradiation behavior of atomized U-10w% Mo alloys aluminium matrix dispersion fuel meat at low temperature. Journal of Nuclear Engineering and Design, 211, 229-235 (2002).
- [18] I.I. Konovalov. Basic properties of fuel determining its behavior under irradiation. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Las Vegas, USA, Octubre (2000).
- [19] A. Denis, R. Piotrkowski, Simulation of isothermal fission gas release, Journal of Nuclear Materials 229, 149–154 (1996).
- [20] A. Denis, R. Piotrkowski. A fission gas release model. Water Reactor Fuel Element Modelling at High Burnup and Experimental Support, IAEA-TECDOC-957, IAEA 455–465 (1997).
- [21] J.A. Turnbull, R. White, C. Wise, The diffusion coefficient of fission gas atoms in UO₂, IAEA TC 659/3.5, 174–181, (1987).
- [22] G.L. Hofman, M.K. Meyer. Progress in irradiation performance of experimental uranium-molybdenum dispersion fuels. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Bariloche, Argentina, Noviembre (2002).
- [23] F. Huet, V. Marelle, J. Noiro, P. Sacristan, P. Lemoine. Full-sized plates irradiation with high UMo fuel loading. Final results of IRIS 1 Experiments. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Chicago, USA, (2003).

A modo de conclusión

Comprender el funcionamiento del núcleo de un reactor requiere el dominio de la termohidráulica para conectar el diseño mecánico con la ingeniería total del reactor, de la neutrónica para entender cuál es el mejor elemento combustible desde el punto de vista de la reactividad para mantener y controlar las reacciones de fisión, y de la física para poder predecir y entender el comportamiento de los materiales ante las exigencias neutrónicas e hidráulicas. Por otro lado la cantidad de fenómenos físicos y químicos que tienen lugar en el quemado de un combustible nuclear, los que afectan tanto al material fisil como a la vaina que lo contiene, y las interrelaciones de estos fenómenos con parámetros de diseño de elementos combustibles, convierten la construcción de un código de simulación en una tarea multidisciplinaria. No sólo se requiere de una ductilidad avanzada en el manejo de la simulación numérica, desde el conocimiento de compiladores y lenguajes hasta la codificación de algoritmos, sino que se debe atender las problemáticas que ingresan en los rangos de la ingeniería, de la física y de la química. Por otro lado, cada uno de estos fenómenos es simulado en forma independiente y la interrelación de todos los modelos encierra otro tipo de complicaciones que se suman a las ya mencionadas. Obtener entonces un programa estable, con sus salidas controladas sólo por parámetros de entrada, que permita el funcionamiento armónico de todos los modelos incluidos en forma acoplada, es un desafío que no obstante, fue ampliamente cubierto en los códigos presentados a lo largo de este trabajo.

DIONISIO 1.0 ha mostrado un comportamiento más que aceptable en la simulación del comportamiento de combustibles en reactores LWR. Especialmente buena es su predicción en PHWR y PWR hasta un quemado de hasta 30 MWD/KgU. desde donde comienza a notarse la limitación de sus modelos en rangos de alto quemado. El problema de PCMI ha sido resuelto satisfactoriamente mediante la introducción de multiplicadores de Lagrange en los nodos contactor/receptor, lo que produjo respuestas acertadas y precisas en la problemática del contacto vaina-pastilla, señalando en posición y magnitud la aparición de ridges primarios y secundarios sobre la vaina.

El modelo de fractura de la vaina es un aporte novedoso a este tipo de códigos ya que facilita el seguimiento de fallas y accidentes en el elemento. Carente de una casuística abultada, se encuentra en etapa de testeo continuo. Cuando se disponga de una serie de experimentos sobre comportamiento de vainas bajo atmósferas controladas se podrá en el futuro analizar las predicciones del modelo. Aún así, su incorporación extiende el margen de aplicabilidad de un código de esta naturaleza al poder incluir la posibilidad de estudiar comportamientos locales de los materiales ante circunstancias extremas.

Si bien DIONISIO resuelve una porción acotada de una barra combustible, la contemplación de la termohidráulica del reactor para determinar la condición de contorno sobre la barra combustible y el uso de programas subsidiarios como los descritos en el apéndice 1, permiten, a través de la recopilación de la información de un conjunto de corridas particulares, obtener una salida integral de una barra completa. Esto es verificado en el experimento OSIRIS y expande el campo de aplicación del código.

Los experimentos FUMEX I y II se llevaron a cabo mientras DIONISIO estaba en gestación y el código no participó efectivamente en ellos. Es bueno destacar que DIONISIO ha sido propuesto por el organismo mundial patrocinante para participar representando a la Argentina en el experimento FUMEX III, que todavía se encuentra en etapa de diagramación. Antes de ello, se está incluyendo en el código un modelo de alto quemado para subsanar las limitaciones ya discutidas en el capítulo V.

Los resultados preliminares obtenidos utilizando los códigos PLACA y DPLACA presentan gran concordancia con los valores experimentales y con los arrojados por otros códigos similares. El testeo del desempeño del programa es una tarea continua y, dada la estructura del código, el reemplazo o inclusión de nuevos modelos es sencilla.

El modelo interdifusional incluido en el código DPLACA, que resuelve un problema de Stefan doble por cada elemento finito, provee al código de una herramienta sumamente realista ya que la distribución de productos de reacción, consumo de partículas combustibles y matriz, es altamente dependiente de la posición longitudinal del elemento debido a la exigencia de la irradiación y a la consiguiente distribución de temperatura, tal como sucede en los experimentos. Asimismo, la visión x - y permite un análisis detallado en cualquier plano del combustible, en particular los que se consideran más críticos. Además, la superposición de ambas visiones, la x - y y la y - z , posibilita un análisis general del conjunto.

Los dos puntos de vista del programa hacen posible que se utilice para analizar el quemado en general, a lo largo de una placa completa o en una posición localizada a determinar por el usuario. Esto permite realizar un estudio integral del comportamiento de un combustible tipo placa generando salidas promediadas o particulares en regiones de interés con condiciones predeterminadas. Para ello, resulta esencial el acoplamiento del código con las condiciones termohidráulicas del reactor que proveen en una primera aproximación cómo serán las condiciones de contorno para todo el combustible.

Ambos códigos son sometidos a comparaciones constantes con otros códigos similares, así como con los datos provenientes de reactores de investigación en operación. Si bien la información experimental es relativamente abundante para combustibles dispersos, la versión monolítica de PLACA todavía se encuentra a la espera de los próximos resultados experimentales de placas de este tipo, actualmente en proceso de irradiación.

El número de validaciones a las que PLACA/DPLACA y DIONISIO están siendo sometidos a diario es creciente y contribuyen a una retroalimentación constante de sus modelos. Prácticamente es posible decir que la versión 2.0 de DIONISIO se construye sobre la 1.0 sin solución de continuidad (lo mismo ocurre con PLACA) y la constante investigación y trabajo que se introduce en los códigos definitivamente muestran que esta página no es más que la conclusión de un trabajo académico, ya que el trabajo profesional continuará por muchos años más.

APÉNDICE I: códigos asociados

Armado de Historia de Potencia idealizada ArmaHp.for

Para el armado de la potencia idealizada se utiliza un código (en verdad un conjunto de códigos ya que cada experimento requiere de un programa particular, si bien partiendo del mismo algoritmo) que toma los datos de entrada en forma cruda, los cuales se proveen en dos formatos mayoritariamente: o bien en intervalo de tiempo-potencia lineal o bien quemado-potencia lineal. En el primer formato se presenta en una columna el intervalo de tiempo (usualmente en días) durante el cual el elemento está sometido a una determinada potencia (en general en kW/m). En el segundo se provee el intervalo de quemado que el combustible consume a una determinada potencia. En este último caso se debe realizar una conversión a tiempo en días.

Por otro lado, en general no se provee un solo grupo de valores tiempo-potencia o quemado-potencia sino un conjunto de ellos, tomados sobre diferentes barras ubicadas en diferentes posiciones del reactor. Si bien estos datos en general son similares, es posible que sea necesario realizar un promedio o se desee correr DIONISIO sobre la potencia más alta o la más baja. Para ello el programa **ArmaHP** decide según elección del usuario sobre qué historia cruda realizar la historia final.

Como ya hemos mostrado durante este trabajo, la historia cruda puede contar con muchos pasos y discontinuidades dadas por la instrumentación que recopila la información, además de mínimas variaciones sobre la potencia lineal. **ArmaHP** realiza un planchado de la historia cruda de acuerdo a parámetros que el usuario selecciona, como la cantidad mínima en W/cm que el programa tome como inalteración. Por ejemplo, una elección recomendada es 10 W/cm. Sobre esa elección, cada vez que los datos leídos de historia de potencia real no presenten una variación mayor a 10 W/cm en su magnitud, **ArmaHP** los tomará como invariantes generando una potencia promediada para el paso ideal.

Otro importante aporte de este programa está en seleccionar el número de escalones entre los que se divide una rampa de potencia; el parámetro por defecto es 50 W/cm, pero en caso de requerir un seguimiento más detallado, (como en el ejemplo IFA-507, capítulo V) se puede seleccionar uno menor.

La salida de **ArmaHP** es la historia de potencia como es leída por DIONISIO y tiene el formato:

Paso	Condición	Potencia inicial (del paso)	Potencia final (del paso)	Duración (del paso)	Cantidad de pasos en que se divide la rampa o cantidad de recálculos
INTEGER contador	INTEGER 1=rampa 2=estacionario	REAL	REAL (Es igual al inicial en caso de un paso estacionario)	REAL	REAL número de intervalos entre los que se divide una rampa o número de veces que el programa debe recalcular durante

					un estacionario
--	--	--	--	--	-----------------

2. Estimación del quemado durante una historia de potencia: Quemado.for

Dada una historia de potencia completa, se incluye en el archivo de entrada de DIONISIO. Sin embargo, es conveniente antes de realizar una corrida del código saber de antemano si no se ha cometido un error en el armado de dicha historia. Para ello se diseñó la herramienta **Quemado**. En este código se calcula el quemado final que alcanzará el combustible al ser sometido a una historia de potencia simplificada como la que se ha construido (estableciendo los parámetros de diseño como enriquecimiento, dimensiones, densidad, porosidad, etc.). En este cálculo no se consideran cambios termoquímicos ni térmicos sobre el dominio, solamente se calcula el quemado mediante la fórmula:

$$Quemado(MWd / KgUO_2) = \frac{3.7085 \times 10^{-22} \int dt}{(1 - \text{porosidad}) \rho}$$

De este modo, dada una densidad de potencia lineal se calculan las fisiones por unidad de volumen (f) necesarias para producir las, dt es el intervalo temporal al que se encuentra la pastilla a esa potencia mientras que la porosidad y la densidad son datos de entrada característicos del combustible. El factor $3,7085 \times 10^{-22}$ es la cantidad de Megawattios/día que produce cada fisión y ρ es la densidad teórica del UO_2 .

Quemado funciona con el mismo archivo de entrada de DIONISIO, ENTRADA.DIO y utiliza algunas de las subrutinas principales del código así como las funciones que definen los parámetros del combustible.

3. Termo hidráulica del canal: Terhidra.for

Como vimos en el capítulo II para el estudio termo hidráulico de elementos combustibles y de los canales asociados se define un canal básico cuya geometría dependerá de la posición de las barras (figura II.3), sobre el cual se calculaba el balance de energía dada por el intercambio de calor a partir de la potencia lineal sobre el elemento y otros parámetros característicos.

El código **Terhidra** resuelve el canal básico con datos de entrada particulares del archivo *ENTRADA.DIO* destinados a los cálculos termohidráulicos del reactor pero fuera del cuerpo principal del programa. Se ingresa la velocidad del refrigerante, la temperatura de entrada, y una potencia lineal que el usuario determina para el cálculo auxiliar. De este modo a la salida de **Terhidra** se obtienen perfiles de temperaturas axiales para el canal, la superficie de la vaina, la interfase óxido-Zircaloy (en el caso en que esta se considere), el interior de la vaina, la superficie externa de la pastilla y diversas isoterms sobre la misma. Por otro lado el programa también provee un perfil radial de la temperatura para el centro del canal.

Este cálculo auxiliar permite reconocer si los datos de entrada utilizados para una dada potencia lineal, generarán perfiles de temperaturas coherentes, posibles o irreales, así como seleccionar una porción particular de la barra para analizar detalladamente utilizando el código DIONISIO.

4. Versionado y compiladores sobre los que funcionan DIONISIO y PLACA

La primera versión de DIONISIO(0) se culminó en el año 2001 y el programa contaba con modelos termoelastoplásticos, un modelo de producción de gases de fisión, hinchado y

densificación y un modelo de creep para la vaina. La interacción pastilla vaina se trataba en forma rudimentaria.

La versión actual DIONISIO 1.0 se encuentra en una etapa de consolidación. Se agregaron diferentes modelos que hacen a la reestructuración de la vaina, retención de gases en la pastilla, crecimiento de la capa de óxido sobre la vaina, análisis de termo hidráulica del canal, fisuración de la pastilla, producción de sustancias corrosivas dentro del elemento, creep y crecimiento por irradiación para la vaina. El problema de PCMI fue resuelto por un método robusto y se agregó la posibilidad de crecimiento de fisuras sobre la vaina.

En un futuro próximo se agregarán modelos de alto quemado.

PLACA/DPLACA se encuentra en su versión 1.0. Básicamente se está trabajando en introducir modelos para dar respuesta a otro tipo de compuesto de uranio en el disperso como siliciuros, además del UMo.

Las versiones de ambos códigos corren sobre compiladores

FORTRAN Visual WorkBench V 1.00

Compaq Visual Fortran Professional Edition 6.6.0

g77 bajo versión FORCE 2.0.8 en windows