



**INSTITUTO DE
TECNOLOGIA**

PROF. JORGE A. SABATO

**UNIVERSIDAD NACIONAL
DE GENERAL SAN MARTIN**

**COMISION NACIONAL
DE ENERGIA ATOMICA**

**MAESTRIA EN
CIENCIA Y
TECNOLOGIA
DE MATERIALES**

SIMULACIÓN DE FENÓMENOS TERMOMECAÑICOS EN UNA BARRA COMBUSTIBLE DE UN REACTOR DE POTENCIA EN OPERACIÓN

Alejandro Soba

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SAN MARTIN
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
“Prof. Jorge A. Sabato”**

**Simulación de fenómenos termomecánicos en una
barra combustible de un reactor de potencia en
operación. (*)**

Por Lic. Alejandro Soba

Director

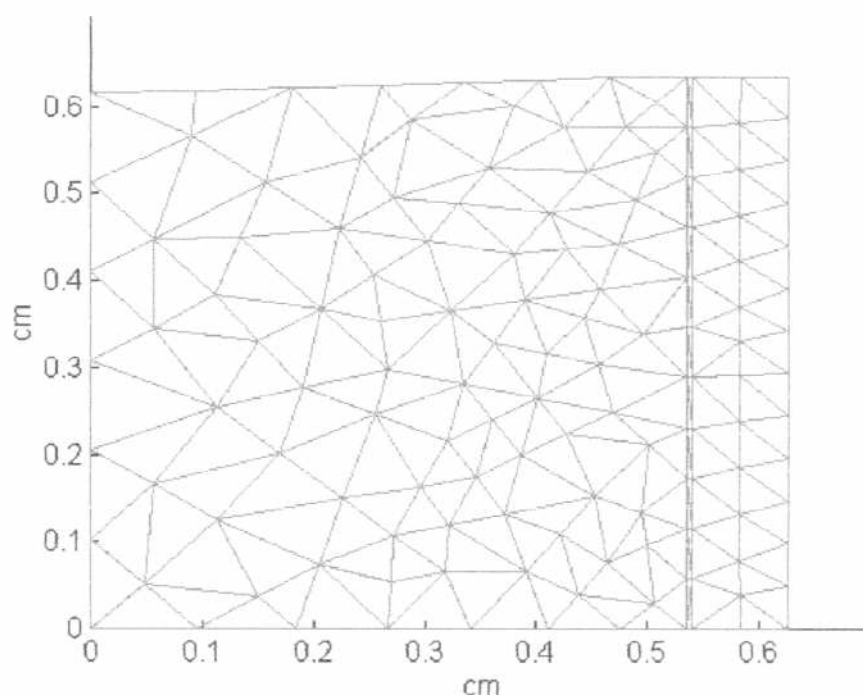
Dra. Alicia Denis



(*) Tesis para optar al título de *Magister en Ciencia y Tecnología de Materiales*

República Argentina

2002



Acerca de agradecimientos y dedicatorias:

He notado, a lo largo de estos años transcurridos en el ámbito de la actividad académica, que es muy común y aparentemente esta bien visto que cada tesista, a la hora de escribir su tesis, comience a hacerlo por esta sección. De alguna manera se me ha explicado con solicitud y apremio, y un poco de autojustificación y reproche al observar mi rostro escéptico y cínico, que uno intenta a través de estas páginas devolver un poco de todo lo que se la ha dado; expresar memoriosos sentimientos de estimación y agrado; hacer explícito en alguna medida y humildemente el reconocimiento personal y sincero al aporte, en muchos casos desinteresado, de algunas personas al trabajo que se explayará a continuación. En otros casos, cuando las palabras melosas y los lugares comunes se derramaban del papel como la miel de una tostada caliente, se me ha dicho que no estaba mal agradecer a los amigos, dedicar un trabajo a sus parientes o simplemente mencionar a las personas que queremos o que han sido mentoras intelectuales de nuestro camino, pues ellas nos han acompañado en alguna medida en la realización y hechura del mismo.

He escuchado atentamente cada una de estas razones y he analizado su validez y rigor de verdad. He intentado quitarme los prejuicios y el cinismo que me es característico para emitir un juicio. Y después de todo eso, no he arribado a ninguna conclusión que pusiera fin al dilema. Pensé en simplemente comenzar con el índice y la introducción o quizás algún dibujo bonito. Pero ya que es dado poner una página o dos en blanco para cubierta y protección, ¿por qué no escribir el motivo por el que no se dedica este trabajo a nadie ni se agradece en particular a ninguna persona, ni siquiera a las que se han ganado y con creccs, ese lugar?

En primer lugar, en relación con la dedicatoria, simplemente encuentro que dedicar una tesis de maestría a alguien que en verdad se ama, es falsear el amor y la tesis. Porque nadie en su sano juicio dedicaría un trabajo frío y apagado como este, "*Simulación de quemado de combustibles...etc., etc.*", a alguien por el que se tiene sentimientos tan puros y firmes como el amor y la amistad. Y si no se lo ama, ¿para qué dedicarle algo que nos costó tanto esfuerzo a nosotros y dinero a los contribuyentes?

En segundo lugar, con respecto a los agradecimientos, diría una amiga mía que "Gracias hacen lo monos", o mejor expresado, tengo bien guardado en mi cabeza los nombres y los lugares, las fechas y las acciones, de quienes en verdad merecen un agradecimiento y no

lavaré el favor mencionándolos en esta limitada portada. Otros serán los lugares y los momentos para el agradecimiento, otras serán las acciones y las formas. Con algunos serán cervezas frías, con otros cafeses largos y conversados. Y sólo con unos pocos mi aprecio y mi amistad hasta que el último latido de mi corazón deje de generar ecos, mucho después (eso espero) de que esta tesis haya caído en el más ignoto de los estantes de un depósito de libros.

Alejandro Soba.

Abstract

This work summarizes the present status of a computer code 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 and densification are modeled. The modular structure of the code allows for the incorporation of models to simulate different phenomena and material properties. Collapsible rods can be also simulated.

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. Pressure increase, swelling and densification are coupled with the stress field.

Good results are obtained for the simulation of the irradiation tests of the first argentine prototypes of MOX fuels, where the bamboo effect is clearly observed, and of the FUMEX series for the fuel centreline temperature, the inside rod pressure and the fractional gas release.

Resumen

Se presenta el estado de avance en el desarrollo de un código de cálculo que simula algunos de los fenómenos fundamentales que ocurren en un elemento combustible de un reactor de potencia durante su quemado: 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 y densificación.

La dilatación térmica da origen a deformaciones elástica y plástica, que describen en forma adecuada el efecto bambú. Se supone que la simetría es axial y se emplean elementos finitos cilíndricos para discretizar el problema. Para calcular el inventario de gases de fisión, se emplea un modelo de difusión que supone granos esféricos y se utiliza también el método de elementos finitos.

Una vez obtenida la distribución de temperatura en el dominio de interés, se procede a resolver las interacciones elastoplásticas instantáneas para pasar posteriormente a las situaciones dependientes del tiempo como la fluencia, el crecimiento por irradiación y el relacionado con los gases de fisión. Para ello se toma cada elemento finito del dominio y se resuelve el problema de difusión de los gases en un grano representativo de cada uno, multiplicando después por la cantidad de granos dentro del volumen del elemento. La presión, incrementada por los gases liberados, interactúa con el campo de tensiones. Se incluyen en el análisis la densificación y el hinchado debido a productos de fisión sólidos y gaseosos.

El código se empleó para simular experimentos, en particular los experimentos MOX y los de la serie FUMEX. Se obtuvo un buen acuerdo en el cálculo de la temperatura central, la presión interna de la barra y la fracción de gases liberados.

INDICE.

I. INTRODUCCIÓN.....	1
II. DESCRIPCION DE LOS MODELOS FISICOS INVOLUCRADOS.....	4
II.1 Introducción	4
II.2 Distribución de temperaturas.....	7
II.3 Elasticidad	9
II.4 Dilatación térmica.....	12
II.5 Deformación plástica	14
II.6 Creep o fluencia.....	17
II.7 Crecimiento por irradiación.....	21
II.8 Modelo de liberación de gases de fisión.....	23
II.9 Hinchado o Swelling.....	28
II.10 Densificación.....	29
II.11 Modelo de mezclado de gases o gas mixing.....	31
II.12 El gap.....	34
II.13 Conclusión.....	36
III. HERRAMIENTAS MATEMATICAS DE CALCULO = M.E.F.....	37
III.1 Introducción.....	37
III.2 Pasos básicos. Ejemplo: Ecuación del calor.....	37
III.3 El problema elástico	46
III.4 La ecuación temporal de difusión.....	49
III.5 Convergencia y errores.....	53
IV. DESCRIPCION DEL CODIGO DIONISIO.EXE; HERRAMINTAS VISUALES ENTRADA.EXE, LUMIERE.EXE	56
IV.1 Aspectos básicos.....	56
IV.2 Pre Proceso.....	57
IV.3 Proceso.....	62
IV.4 Post-Proceso	67
V. LOS EXPERIMENTOS MOX Y LOS CASOS FUMEX.....	71
V.1 Introducción.....	71
V.2 Combustibles de óxidos mixtos.....	71
V.3 Experimentos FUMEX.....	77
V.4 Conclusión.....	99
VI. DISCUSION.....	100
BIBLIOGRAFIA.....	103

INDICE DE GRAFICOS.

<i>Figura II.1 (Una pastilla inmersa en su vaina...)</i>	5
<i>Figura II.2 (Esquema de la distribución...)</i>	6
<i>Figura II.3 (Representación esquemática de media pastilla...)</i>	7
<i>Figura II.4 (Distribución de temperaturas típica...)</i>	9
<i>Figura II.5 (Distribución de tensiones...)</i>	10
<i>Figura II.6 (Coeficiente de dilatación...)</i>	13
<i>Figura II.7 (Tensión equivalente en función de la deformación...)</i>	15
<i>Figura II.8 (Proceso de carga y descarga...)</i>	16
<i>Figura II.9 (Tipos de creep según la velocidad...)</i>	17
<i>Figura II.10 (Creep sobre dos elementos de un tubo de...)</i>	19
<i>Figura II.11 (El gráfico representa el creep sobre dos elementos de una pastilla de...)</i>	20
<i>Figura II.12 (Comparación entre modelos de crecimiento por irradiación...)</i>	22
<i>Figura II.13 (a) Aspecto de la matriz en el umbral de percolación...)</i>	25
<i>Figura II.14 (Contribución total del hinchado y la densificación...)</i>	30
<i>Figura II.15 (Modelo de hinchado y densificación del MATPRO...)</i>	31
<i>Figura II.16 (Conductividad térmica de He, Kr y Xe...)</i>	32
<i>Figura II.17 (Conductividad de la mezcla...)</i>	33
<i>Figura II.18 (Representación gráfica del gap cerrado...)</i>	35
<i>Figura II.19 (Detalle de la salida del código DIONISIO en al región del gap...)</i>	35
<i>Figura III.1 (Dominio de interés discretizado por EF...)</i>	39
<i>Figura III.2 (Elemento triangular de revolución...)</i>	39
<i>Figura III.3 (La numeración de los nodos de...)</i>	40
<i>Figura III.4 (Funciones de forma bilineales...)</i>	41
<i>Figura III.5 (En el problema elástico cada nodo posee...)</i>	46
<i>Figura III.6 (Ejemplo de convergencia en el esquema de diferencias...)</i>	52
<i>Figura III.7 (Convergencia en el esquema de Crank...)</i>	52
<i>Figura IV.1 (Los nueve nodos que deben ingresar...)</i>	58
<i>Figura IV.2 (Inicio de la sección de funciones...)</i>	61
<i>Figura IV.3 (Diagrama de flujo de DIONISIO...)</i>	63
<i>Figura IV.4 (Diagrama de flujo del cálculo elastoplástico...)</i>	65
<i>Figura IV.5 (Diagrama de flujo del problema temporal...)</i>	67
<i>Figura V.1 (Historia de potencia. a)Irradiación estacionaria...)</i>	73
<i>Figura V.2 (Deformación diferencial de la vaina...)</i>	73
<i>Figura V.3 (Determinación experimental del diámetro...)</i>	74
<i>Figura V.4 (Detalle de la región externa de las dos barras irradiadas...)</i>	75
<i>Figura V.5 (Evolución de los radios de la pastilla e...)</i>	76
<i>Figura V.6 (Temperatura central en función del ancho del gap...)</i>	80
<i>Figura V.7 (Historia de potencia real junto a la simplificada...)</i>	88
<i>Figura V.8 (Resultados simulados del caso FUMEX1...)</i>	89
<i>Figura V.9 (Resultados simulados del caso FUMEX2...)</i>	90
<i>Figura V.10 (Resultados simulados del caso FUMEX3r1...)</i>	91

<i>Figura V.11 (Resultados simulados del caso FUME3r2...)</i>	92
<i>Figura V.12 (Resultados simulados del caso FUME3r3...)</i>	93
<i>Figura V.13 (Resultados simulados del caso FUMEX4a...)</i>	94
<i>Figura V.14 (Resultados simulados del caso FUMEX4b...)</i>	95
<i>Figura V.15 (Resultados simulados del caso FUMEX5...)</i>	96
<i>Figura V.16 (Resultados simulados del caso FUMEX6s...)</i>	97
<i>Figura V.17 (Resultados simulados del caso FUMEX6f...)</i>	98

INDICE DE TABLAS.

<i>Tabla II.1 Constantes involucradas en la ley de Norton</i>	18
<i>Tabla III.1 Grado de precisión de los resultados con EF a medida que crece el número de elementos finitos</i>	53
<i>Tabla IV.1 Datos de entrada del archivo de condiciones de contorno</i>	60
<i>Tabla IV.2 Ejemplo de un archivo con la historia de potencia</i>	61
<i>Tabla IV.3 Archivos de salida de DIONISIO</i>	69
<i>Tabla V.1 Valores experimentales y valores calculados en la deformación de las crestas en las vainas del Zircaloy</i>	77
<i>Tabla V.2 Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de DIONISIO para los casos simplificados del experimento FUMEX</i>	81
<i>Tabla V.3 Características geométricas y dominio discretizado de los casos FUMEX</i>	85
<i>Tabla V.4 Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de DIONISIO para los casos FUMEX</i>	87

I. INTRODUCCION.

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. La primera predicción dada por el resultado de dichas simulaciones es la fuente de los primeros ajustes y mejoras en diseños básicos de combustible y 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 este 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, o 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. Aun acelerando el envejecimiento de un dado elemento combustible, los experimentos pueden requerir meses y años para arrojar alguna conclusión valedera. Un código recrea varios años de historia en unos minutos ahorrando un valioso tiempo de reactor que puede ser utilizado en mejorar y preparar mejores y más estudiados experimentos.

Por último, Argentina es a través de la CNEA 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 y de desarrollo propio, además de los paquetes adquiridos en el extranjero.

No es novedoso el desarrollo de un código de estas características en CNEA. Existen antecedentes de excelentes resultados demostrados en numerosos experimentos y comparaciones internacionales. Me refiero al código BACO (Barra Combustible)[44] desarrollado en la argentina en la década del setenta y perfeccionado constantemente hasta la actualidad. Dicho código simula el desarrollo termomecánico y la liberación de gases de fisión de una barra combustible de parámetros variables. Se espera en DIONISIO emular dicho código utilizando herramientas numéricas y computaciones más modernas. Se incluye de este modo un tratamiento del dominio involucrado mediante elementos finitos, poderoso instrumento numérico de múltiples aplicaciones y grandes resultados en cualquier tipo de simulación. Por otro lado se busca obtener más versatilidad permitiendo una mejor interacción entre el usuario y el código, facilitando la modificación o adaptación del programa a las necesidades individuales de cada uno y el manejo de resultados. Para ello se proponen programas interactivos de visualización con las utilidades gráficas que ofrecen los nuevos sistemas operativos.

Uno de los aspectos mas críticos en el funcionamiento de un reactor y limitante en muchos casos en el diseño e implementación de elementos combustibles es el problema de la interacción vaina pastilla PCI (Pellet Cladding Interaction). Dicho problema se relaciona con la vida útil de un combustible y es un aspecto condicionante de la seguridad de la vaina. 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 [1,2]. El agregado de más elementos y la generalización de muchos de sus resultados a un elemento combustible completo se convirtieron en la segunda tarea del desarrollo que demostró sus aceptables resultados a lo largo de diferentes simulaciones comparadas con los experimentos e impulsó la idea de que se tenía entre manos un programa al que se podría convertir progresivamente en un código completo de simulación. Este propósito se vio facilitado por la forma modular que tomó el código desde su comienzo y el deseo de construir una herramienta accesible para cualquier interesado, así como el aprovechamiento óptimo de los diversos resultados que el programa produce.

Se ha dividido el siguiente trabajo en cuatro capítulos y una discusión final. El primer capítulo consiste en una breve descripción de los modelos que hemos utilizado para cada fenómeno interviniente en el cálculo general así como también la comparación de las simulaciones de dichos fenómenos con resultados de otros modelos conocidos en la literatura. El segundo capítulo describe las herramientas matemáticas de cálculo utilizada, el método de los elementos finitos. Se ha intentado describir esa herramienta pero desde la utilización que nosotros hacemos de la misma en DIONISIO, de este modo se podrá observar cómo se aborda la resolución de las ecuaciones diferenciales involucradas en nuestro problema. El tercer capítulo es un reducido manual de usuario de DIONISIO. Allí se desarrolla una descripción del funcionamiento del programa como diagrama de flujo, así como las cosas que pueden ser modificadas por el usuario, los archivos de entrada necesarios y los archivos de salida con sus diferentes aplicaciones. Se presentan también dos programas adicionales: ENTRADA y LUMIERE, desarrollados en lenguaje visual que facilitan la interacción del usuario con el código principal. El último capítulo contiene dos grandes grupos de simulaciones que realizamos con DIONISO con dos experimentos internacionalmente conocidos para testear y ajustar parámetros del código. Dichos resultados se presentan y se comparan con datos experimentales y con salidas obtenidas con otros códigos similares.

II. DESCRIPCION DE LOS MODELOS FISICOS INVOLUCRADOS.

II.1 Introducción.

Entre los numerosos fenómenos que tienen lugar durante la operación de un elemento combustible de un reactor de potencia, la interacción termomecánica entre la pastilla y la vaina (PCI) y la liberación de gases de fisión (FGR) figuran entre los que mayor atención han concitado. Estos fenómenos están interconectados y son mutuamente dependientes.

Por un lado, debido a la muy baja conductividad térmica del material combustible (UO_2), se establece en la pastilla un gradiente de temperatura muy abrupto. En el centro de la pastilla se alcanzan temperaturas considerablemente altas. Debido a la dilatación térmica y a las sollicitaciones mecánicas de la pastilla, ésta se deforma de manera no uniforme. Si la deformación de la pastilla es suficiente, puede producirse contacto con la vaina, particularmente en las zonas próximas a los extremos de las pastillas. El elemento combustible adquiere en ese caso la forma de una caña (efecto bambú). Las deformaciones de la pastilla y de la vaina pueden ser de tipo elástico o plástico y, para períodos suficientemente largos, puede también producirse fluencia.

Por otra parte, los productos de fisión se acumulan en el elemento combustible durante su quemado. Entre ellos, los productos gaseosos Xe y Kr representan aproximadamente el 30% del total. Su insolubilidad casi completa en la matriz del óxido es responsable de la formación de burbujas, tanto intra como intergranulares. Debido a su presencia, la conductividad térmica del combustible disminuye aún más, lo que se refleja en un ulterior incremento de la temperatura. Una fracción importante del gas generado se acumula en las burbujas intergranulares hasta que alcanzan un nivel de saturación y comienzan a liberar el gas en exceso, que se aloja en el plenum, en el “gap” entre las pastillas y la vaina y en los “dishings” de las pastillas. Su presencia aumenta la presión interna en el elemento combustible, incrementa el ancho del gap y disminuye su conductividad térmica[26,30].

Esencialmente el código DIONISIO describe y calcula la distribución de temperaturas en los tres materiales que componen el dominio: el UO_2 , el gap y la vaina; los cambios estructurales que se producen debido a la correspondiente expansión térmica; la deformación plástica de la vaina; la fluencia o creep del combustible y la vaina; el crecimiento de la vaina debido a la irradiación; el hinchado o swelling y la densificación del combustible y la mezcla de gases en el gap. El programa incluye también un modelo de generación de gases de fisión y un tratamiento de la interacción vaina pastilla (PCI).

El problema físico es obviamente tridimensional pero, dada la simetría cilíndrica del sistema, se emplean modelos que consideran sólo las coordenadas r y z . La eliminación de la coordenada θ permite una simplificación considerable del problema. Otra simplificación adicional está dada por la simetría axial de las pastillas la cual permite partirlas al medio según la dirección longitudinal (z) para trabajar sólo con una de sus mitades.

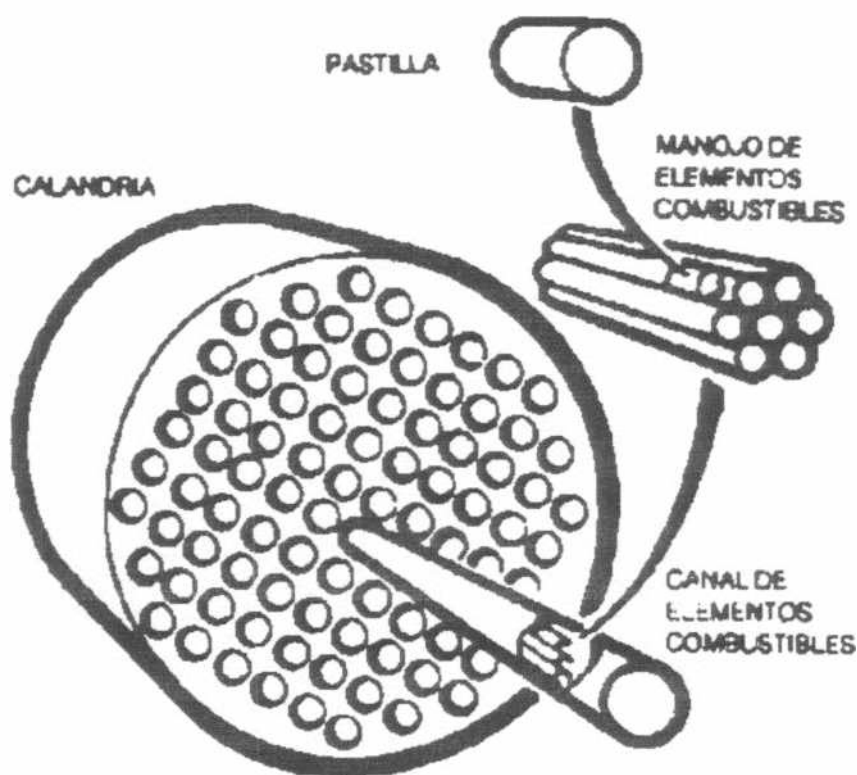


Figura II.1 Una pastilla inmersa en su vaina. La vaina pertenece a un elemento combustible que se introduce en la calandria de un reactor CANDU.

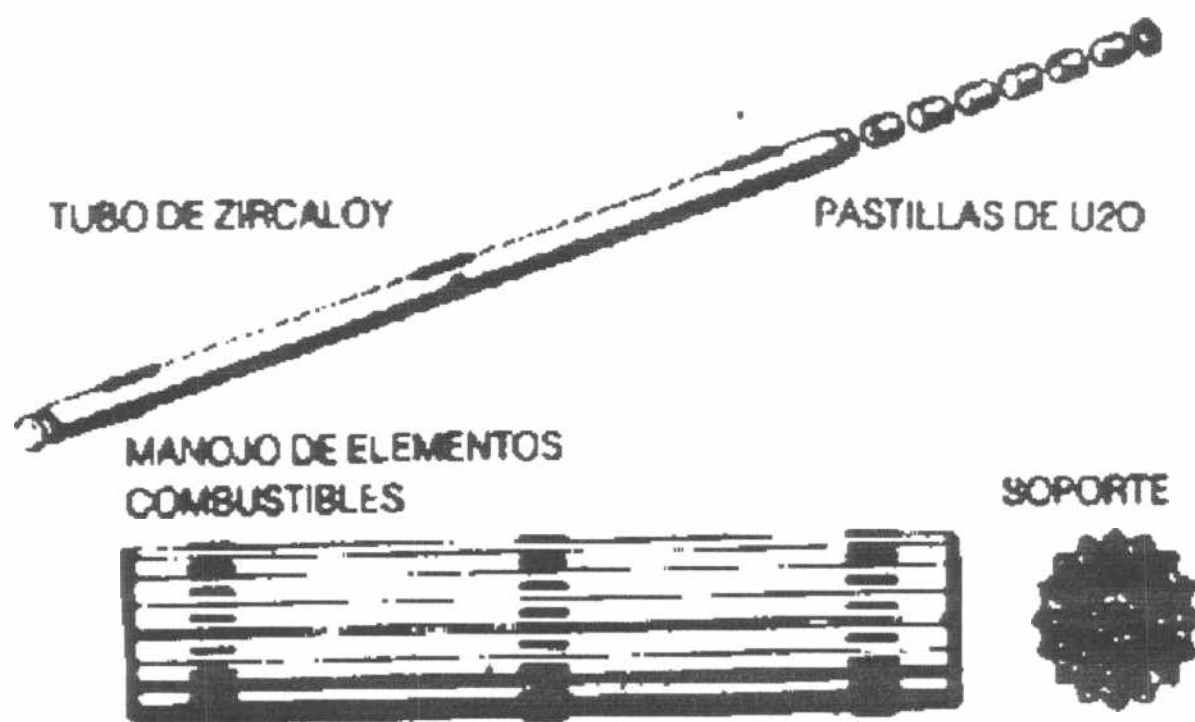


Figura II.2 Esquema de la distribución de pastillas en la vaina de Zircaloy y del elemento combustible del que esta última forma parte.

Un conjunto de pastillas contenidas en una vaina constituye una barra combustible y un conjunto de barras adecuadamente distribuidas espacialmente constituye un elemento combustible. El número de pastillas y sus dimensiones, así como la longitud de las barras y el espaciado entre ellas dependen del diseño del combustible. Como ejemplo, en la figura II.1 se muestra un elemento combustible del reactor tipo CANDU (Canadian Deuterium Uranium) de la central nuclear de Embalse. Esta distribución de pastillas dentro de un reactor es aparentemente uniforme ya que el flujo neutrónico no lo es a lo largo de todo el elemento dependiendo también de su ubicación en el núcleo, por lo que los elementos son intercambiados durante su vida para intentar paliar esa discontinuidad. En definitiva estas sencillas alusiones a la complejidad del problema se realizan para mostrar que simular media

pastilla involucra simplificaciones groseras e idealizaciones del sistema de alto orden. En primer lugar se está considerando una pastilla ideal que es alcanzada por la cantidad nominal de neutrones que generará la potencia de salida del reactor y que provocará el quemado correspondiente. Nuestros resultados son multiplicados por la cantidad de medias pastillas que posea el elemento combustible a resolver, pastillas que se consideran todas ideales y perfectas. Sin duda alguna la realidad no funciona de ese modo y cada resultado de un código como éste debe ser pesado a la luz de esas simplificaciones.

II.2 Distribución de temperatura.

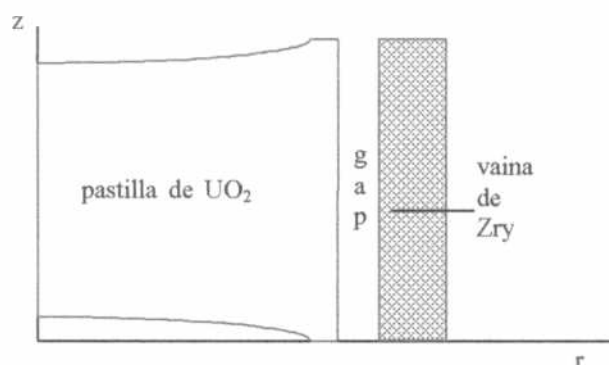


Figura II.3 Representación esquemática de media pastilla según un corte longitudinal.

La distribución de temperaturas del problema se determina resolviendo la ecuación del calor en un dominio bidimensional en coordenadas cilíndricas con simetría de revolución. Las condiciones de contorno están dadas por la temperatura T constante en la superficie externa de la vaina (condición de Dirichlet) y $\nabla T=0$ (condición de Neumann) en el resto de la frontera. El término independiente Q es la generación de calor por unidad de volumen y de tiempo. Una forma general de dicha ecuación es:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\kappa_r^h r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa_z^h \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q^h = 0$$

donde κ^h es la conductividad térmica para h = pastilla, gap o vaina. El subíndice indica la posibilidad de anisotropía de la conductividad.

Se emplearon para las conductividades térmicas κ^h las ecuaciones empíricas:

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

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

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

con T en K y κ en $W m^{-1} K^{-1}$ y el valor para el término independiente Q en $W m^{-3}$.

$$Q^h = \begin{cases} Q^{UO_2} & \text{potencia generada por la pastilla} \\ 0 & \text{para el gap y la vaina} \end{cases}$$

Con las condiciones de contorno:

$$T_{UO_2} = T_{gap} \quad \text{en } r = \text{radio exterior de la pastilla.}$$

$$T_{gap} = T_{vaina} \quad \text{en } r = \text{radio interior de la vaina.}$$

$$T_{vaina} = T_{plenum} \quad \text{en } r = \text{radio exterior de la vaina.}$$

$$\nabla T = 0 \quad \text{en los restantes límites del dominio.}$$

Al variar Q_{UO_2} , leída de la historia de potencia, se producen las variaciones en la temperatura en cada elemento finito y esas serán las entradas a los problemas subsiguientes del código.

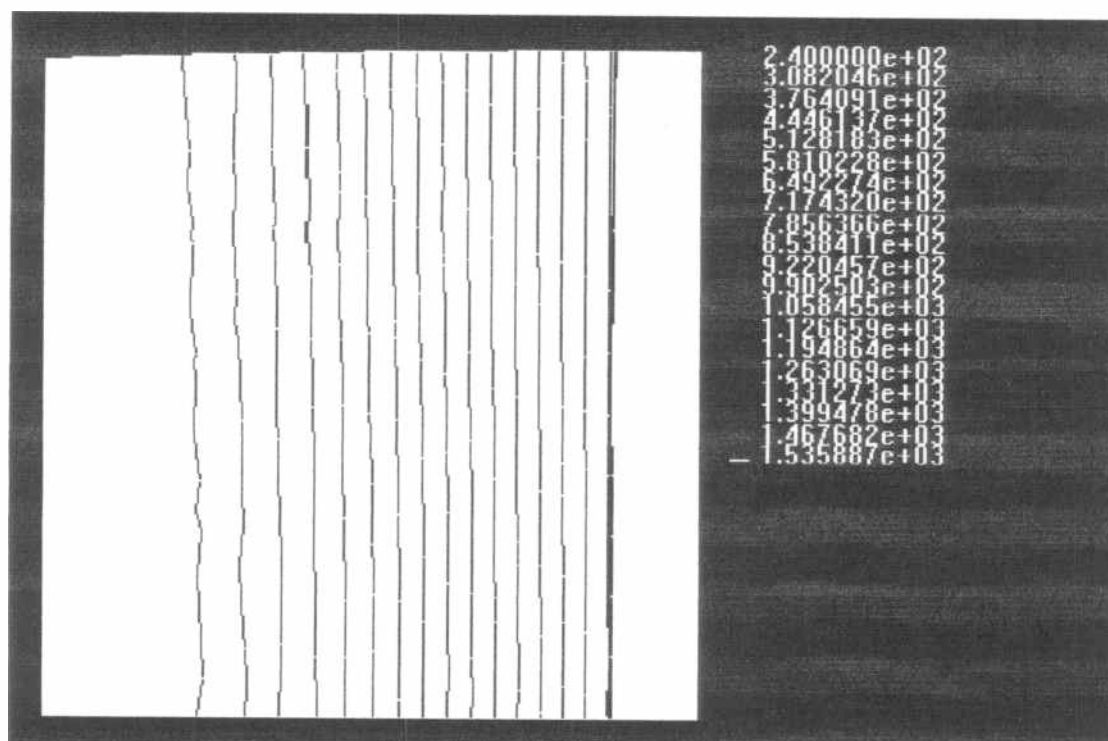


Figura II.4 Distribución de temperaturas típica de una pastilla entera. La condición de Dirichlet externa es $T=300^{\circ}\text{C}$ y una potencia lineal de 300 W/cm en el UO_2 .

II.3 Elasticidad.

En un sistema en coordenadas cilíndricas la distribución de tensiones σ_{ij} sobre un elemento de volumen toma la forma que se observa en la figura [31].

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

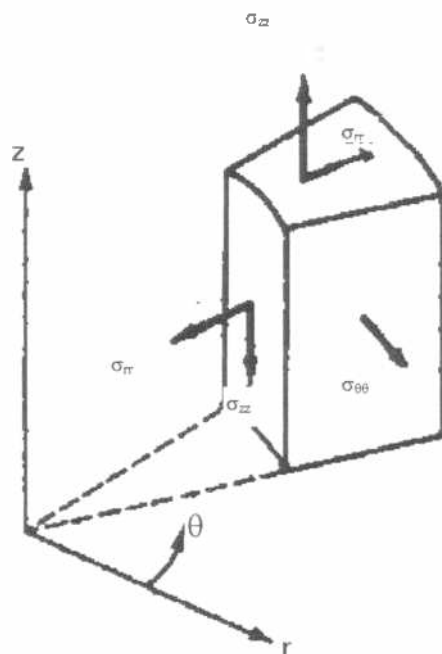


Figura II.5 Distribución de tensiones en un elemento de volumen en coordenadas cilíndricas

mientras que el término de deformaciones es

$$\{\epsilon\}^t = \{\epsilon_{rr} \ \epsilon_{\theta\theta} \ \epsilon_{zz} \ \epsilon_{r\theta} \ \epsilon_{z\theta} \ \epsilon_{rz}\}$$

La tensión se relaciona con la deformación mediante la ley de Hooke que toma la forma matricial:

$$\{\sigma\} = [D]\{\epsilon\}$$

donde D es la matriz de cada material.

$$[\rho] = \frac{E}{1+\mu} \begin{bmatrix} d & b & b & 0 & 0 & 0 \\ b & d & b & 0 & 0 & 0 \\ d & d & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$$

donde E = módulo de Young

μ = módulo de Poisson

$$d = (1 - \mu)/(1 - 2\mu)$$

$$b = \mu/(1 - 2\mu)$$

Por otro lado, de la teoría de elasticidad sabemos que el vector deformación total del sistema se relaciona con las funciones de desplazamiento u , v y w según las direcciones r , θ y z respectivamente a través del siguiente conjunto de ecuaciones [31]

$$e_{r\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta} + \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r}$$

$$e_{rz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r}$$

$$e_{\theta z} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \theta}$$

$$e_{rr} = \frac{\partial u}{\partial r}$$

$$e_{\theta\theta} = \frac{u}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \theta}$$

$$e_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

Puesto que las incógnitas del problema son justamente las funciones desplazamiento $u(r, \theta, z)$, $v(r, \theta, z)$ y $w(r, \theta, z)$ estas ecuaciones pasan a ser relevantes y serán la forma de vincular nuestros resultados con las variables tensión y deformación del sistemas.

Debido a la simetría cilíndrica del sistema podemos independizarnos de la variable θ por lo que las funciones desplazamiento toman la forma

$$u = f(r, z)$$

$$v = 0$$

$$w = g(r, z)$$

y sus relaciones con la deformación total serán ahora

$$e_{rr} = \frac{\partial u}{\partial r}$$

$$e_{\theta\theta} = \frac{u}{r}$$

$$e_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z}$$

$$e_{rz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r}$$

$$e_{r\theta} = 0$$

$$e_{z\theta} = 0$$

eliminándose de igual forma las columnas y las filas $r\theta$ y $z\theta$ de la matriz D del material y de los vectores $\{\varepsilon\}$ y $\{\sigma\}$. [22, 23, 27]

La ecuación matricial de Hooke es la base de la resolución del problema pues a través de ella se produce el acoplamiento de todos los fenómenos termomecánicos involucrados, como se verá en los siguientes apartados.

II.4 Dilatación térmica.

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

$$\{\varepsilon^{Th}\}_h = \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr}^{Th} & \varepsilon_{\theta\theta}^{Th} & \varepsilon_{zz}^{Th} & \varepsilon_{rz}^{Th} \end{bmatrix}_h = \alpha_h \Delta T \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

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]

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

La figura II.6 muestra la dependencia del coeficiente α_{UO_2} con la temperatura según la función empírica dada más arriba y la respuesta numérica de DIONISIO. Para ello se tomó el valor del coeficiente de dilatación en función de la temperatura de los elementos finitos a lo largo de una línea longitudinal que cruzaba la pastilla desde el centro ($r=0$) hasta el radio exterior.

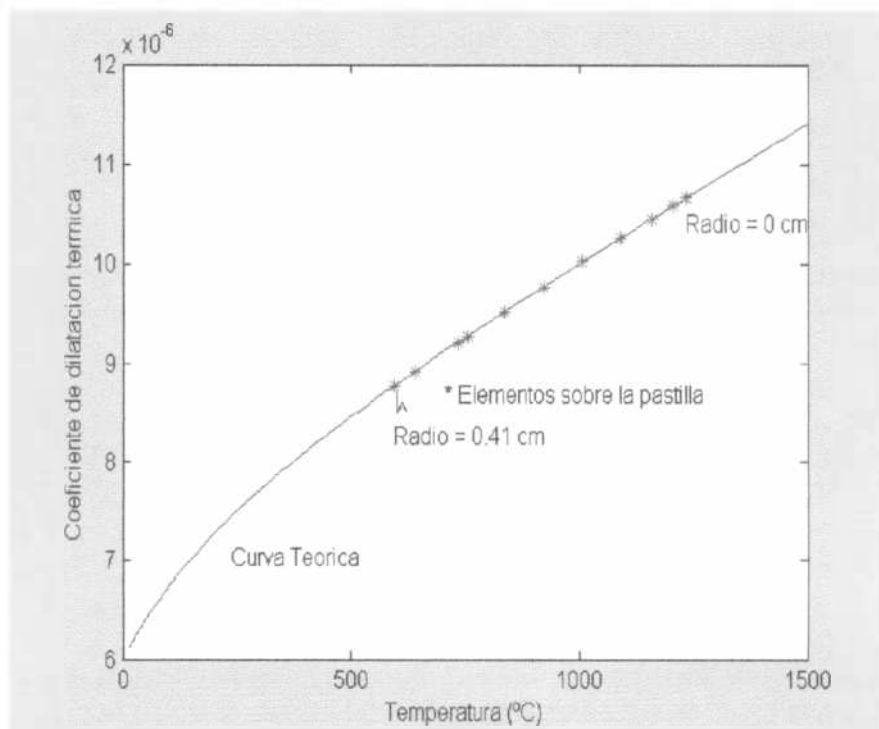


Figura II.6 Coeficiente de dilatación térmica del UO_2 en función de la temperatura de la pastilla. Los datos se comparan con la curva teórica de α .

II.5 Deformación plástica.

A partir de la teoría de plasticidad de Hill y de las reglas de flujo de Levy Prandtl-von Mises se tiene para la deformación plástica [4, 42]

$$\{\varepsilon^P\}_h^t = \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr}^P & \varepsilon_{\theta\theta}^P & \varepsilon_{zz}^P & \varepsilon_{rz}^P \end{bmatrix}_h$$

donde cada componente toma la forma

$$\varepsilon_{ii}^P = \frac{\varepsilon_{eq}}{\sigma_{eq}} \left[(\sigma_i - \sigma_j) + (\sigma_i - \sigma_k) \right] \quad \varepsilon_{ij}^P = \frac{3\sigma_{ij}}{\sigma_{eq}}$$

con $i=r,\theta,z$ y donde σ_{eq} y ε_{eq} son la tensión y la deformación equivalentes

$$\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{1}{2} \left((\sigma_i - \sigma_j)^2 + (\sigma_j - \sigma_k)^2 + (\sigma_k - \sigma_i)^2 \right)}$$

$$\varepsilon_{eq} = \sqrt{\frac{2}{9} \left((\varepsilon_i - \varepsilon_j)^2 + (\varepsilon_j - \varepsilon_k)^2 + (\varepsilon_k - \varepsilon_i)^2 \right)}$$

Ambas expresiones están relacionadas por una curva σ - ε , dada por el ensayo de tracción uniaxial de cada material. La forma funcional teórica de dicha curva utilizada en DIONISIO es

$$\varepsilon_{eq} = A \sigma_{eq}^n$$

donde A y n son constantes que dependen de cada material y eventualmente de la temperatura [42]. De acuerdo a resultados experimentales el UO_2 no presenta variaciones plásticas significativas a las temperaturas de operación típicas, por lo que la contribución plástica del mismo es despreciable. Para el Zry, en cambio, puede verse en la figura II.7 una comparación entre el ajuste teórico y el resultado obtenido con el código para la plasticidad del material

para un cálculo bidimensional. Puede notarse cómo la región plástica comienza a manifestarse después de que la tensión supera la tensión de fluencia, σ_Y .

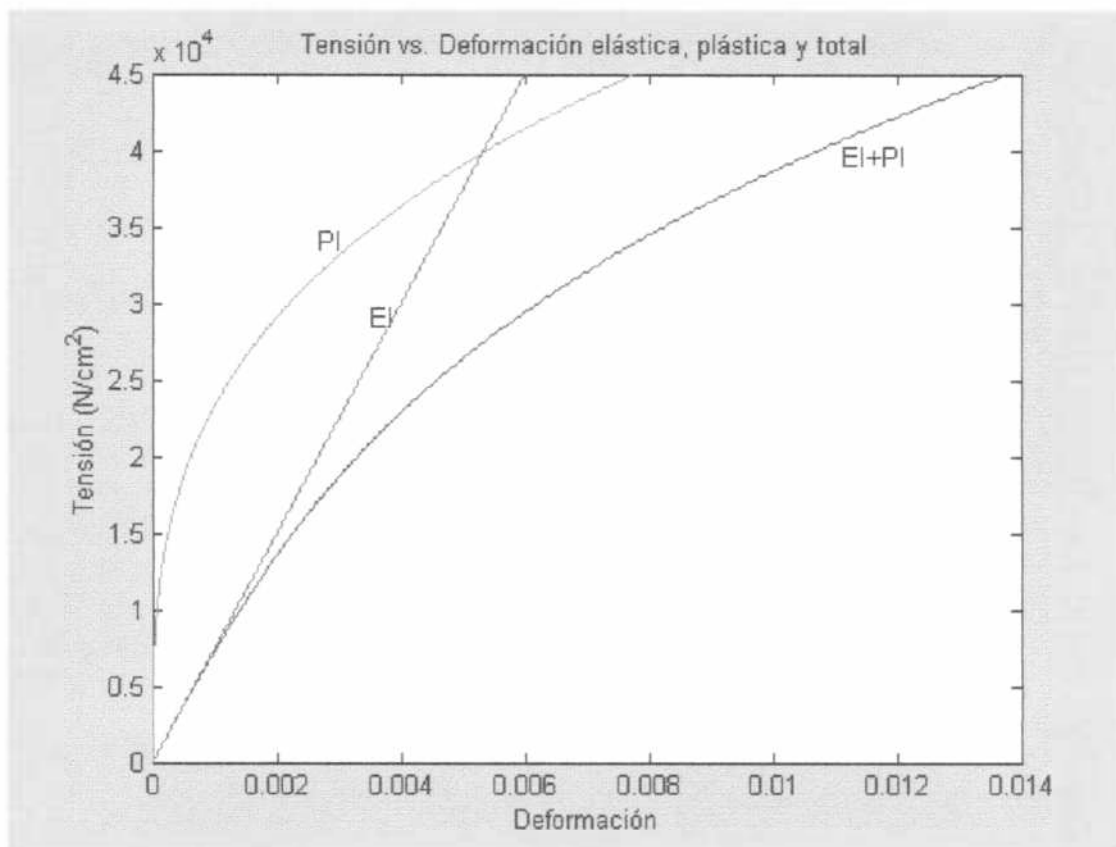


Figura II.7 Tensión equivalente en función de la deformación equivalente Elástica, Plástica y total del Zircaloy. La temperatura de 300 °C es típica de trabajo de la vaina. La tensión de fluencia se establece en 25000 N/cm^2 .

Cuando la tensión equivalente supera a la de fluencia, el material entra a la región no lineal del diagrama y comienza a considerarse la contribución plástica. En la figura II.8 se puede observar un proceso de carga y descarga típico dentro de la historia del quemado del material. Se aplica sobre el material inicialmente indeformado una tensión suficientemente grande como para producir deformación elástica y plástica. Al disminuir las fuerzas

aplicadas, la tensión disminuye en forma lineal de manera que el material recupera parte de la deformación elástica pero no la deformación plástica. (Si la tensión aplicada disminuyera a cero, la deformación elástica desaparecería totalmente, pero el material quedaría deformado plásticamente). Cuando comienza la carga nuevamente, el material vuelve a deformarse elásticamente hasta entrar otra vez en el rango plástico y continuar el ciclo de deformación permanente.

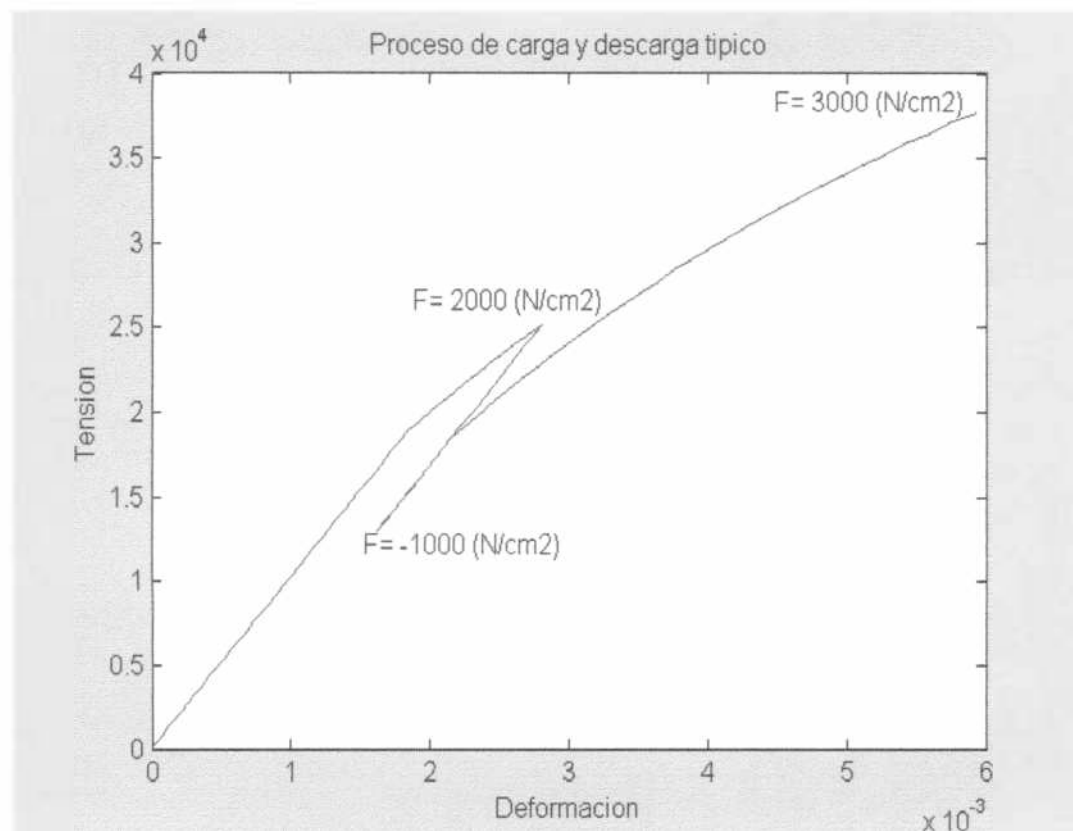


Figura II.8 Proceso de carga y descarga en una historia ficticia sobre la vaina.

II.6 Creep o fluencia.

El fenómeno de creep o fluencia afecta a materiales bajo cargas o tensiones constantes en períodos relativamente grandes de tiempo. La temperatura es fundamental en este proceso de tal modo que a altas temperaturas, todo material presenta fluencia. Un gráfico de la deformación en función del tiempo típico del fenómeno de termofluencia presenta cuatro etapas bien definidas [5]:

- 1) La deformación instantánea que corresponde al rango elasto-plástico.
- 2) La fluencia primaria, con una velocidad de deformación decreciente.
- 3) La fluencia secundaria con velocidad constante, lineal.
- 4) La fluencia terciaria, con una velocidad creciente hasta llegar a la ruptura.

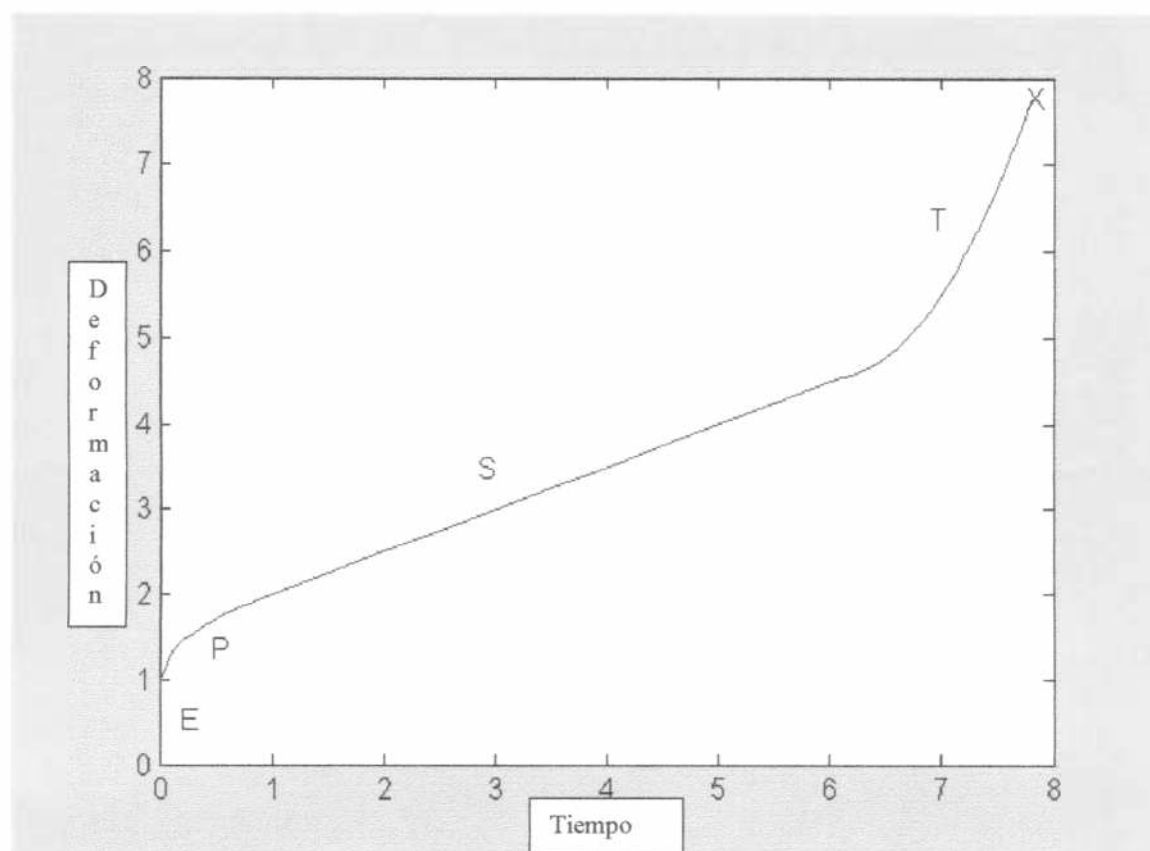


Figura II.9 Tipos de creep según la velocidad de deformación de/dt . E es la deformación elasto-plástica; P el creep primario de velocidad de deformación decreciente; S el creep secundario de velocidad de deformación constante y T el terciario de velocidad creciente hasta llegar a la ruptura.

La forma de la curva tiene como parámetro a la temperatura y existen múltiples relaciones empíricas que expresan $d\varepsilon/dt = f(\sigma, \varepsilon, t, T)$ en el estado estacionario. Para las regiones de estudio de nuestro interés, tomaremos la llamada ley de Norton [5,6] en donde

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = K\sigma^n \exp\left(-\frac{Q_{ac}}{k_B T}\right)$$

donde K y n son constantes que dependen del material, Q_{ac} es la energía de activación del sistema y k_B es la constante de Boltzman. El vector deformación de creep viene dado por:

$$\{\varepsilon^C\}_h^t = \left[\varepsilon_{rr}^C \ \varepsilon_{\theta\theta}^C \ \varepsilon_{zz}^C \ \varepsilon_{rz}^C \right]_h^t$$

Para introducir la fluencia dentro del sistema de ecuaciones general se utilizan otra vez las reglas de flujo de Levy Prandtl-von Mises esta vez teniendo en cuenta que se debe multiplicar por δt todo el conjunto de ecuaciones.

$$\delta \varepsilon_i^C = \frac{d\varepsilon^C}{dt} \delta t \left[(\sigma_i - \sigma_j) + (\sigma_i - \sigma_k) \right]$$

La tabla II.1 presenta los valores de las constantes K y n utilizadas en DIONISIO para cada material.[19]

	$K \text{ (N/cm}^2\text{)}^{-n} \text{ (d)}^{-1}$	N
UO ₂	1.88×10^{-41}	4.5
Zry	1×10^{-12}	3

TABLA II.1 Constantes involucradas en la ley de Norton

El gráfico a continuación muestra el cálculo analítico del creep sobre una vaina de Zircaloy sometida a una presión interna de 1000 N/cm^2 durante 17 días aproximadamente (410 horas). El primer par de curvas representa la tensión en función de la deformación y la deformación en función del tiempo para un elemento finito que se encuentra sobre el radio interno de la vaina mientras que el segundo par de curvas se refiere a un elemento sobre la pared exterior. Claramente se puede observar la presencia de una deformación elástica, un creep primario pequeño y el ingreso en el régimen estacionario de velocidad de deformación constante. La diferencia entre ambos elementos está dada por la intensidad y la calidad de deformaciones principales que actúan sobre los mismos. El elemento interior recibe una tensión principalmente radial y compresiva mientras que el exterior está sometido a una fuerte tensión angular (Hoop stress) que es de expansión.

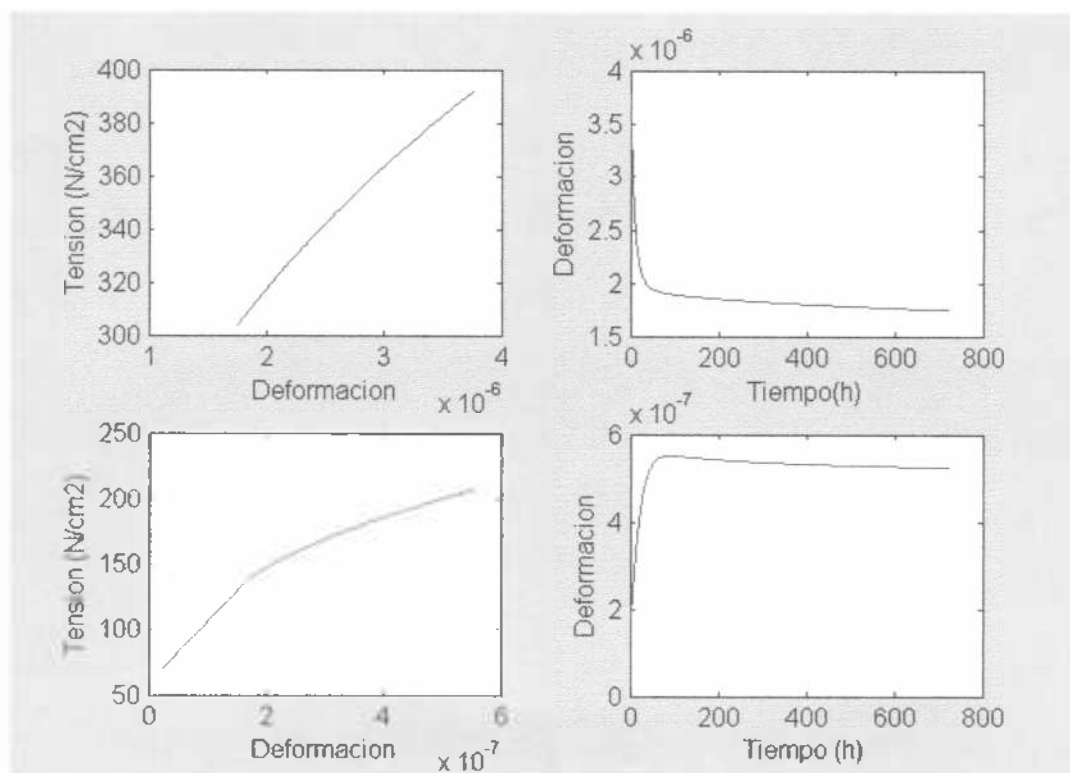


Figura II.10 Creep sobre dos elementos de un tubo de Zircaloy bajo una presión interior de 10 MPa. El primer par de curvas corresponde a un elemento interior mientras que el segundo par a un elemento sobre la pared externa del tubo.

De la misma forma se grafican en la figura II.11 la tensión en función de la deformación y la deformación en función del tiempo para dos elementos finitos de una pastilla de UO_2 sometida a una determinada potencia y con valores estándares de condiciones de contorno. Se puede observar cómo la deformación elástica determina el problema debido a su magnitud, para caer en un estado de deformación pequeño y estable. Es notable la diferencia de tensiones equivalentes que sufren los elementos. También que ambas curvas tienen la misma forma funcional a pesar de que la tensión angular en el elemento exterior es muy grande. La razón de esta similitud es que la tensión que genera la fuerte dilatación térmica del material es tan grande que el resultado general es de compresión siempre. El primer par de curvas corresponde a un elemento que se encuentra en el interior de la pastilla mientras que el segundo a uno sobre el radio exterior. Nótese la diferencia entre las tensiones soportadas por uno y otro elemento. Como en el caso de la vaina, aquí también se observa la gran deformación elástica primero que da lugar a una deformación muy pequeña y estable al transcurrir el tiempo.

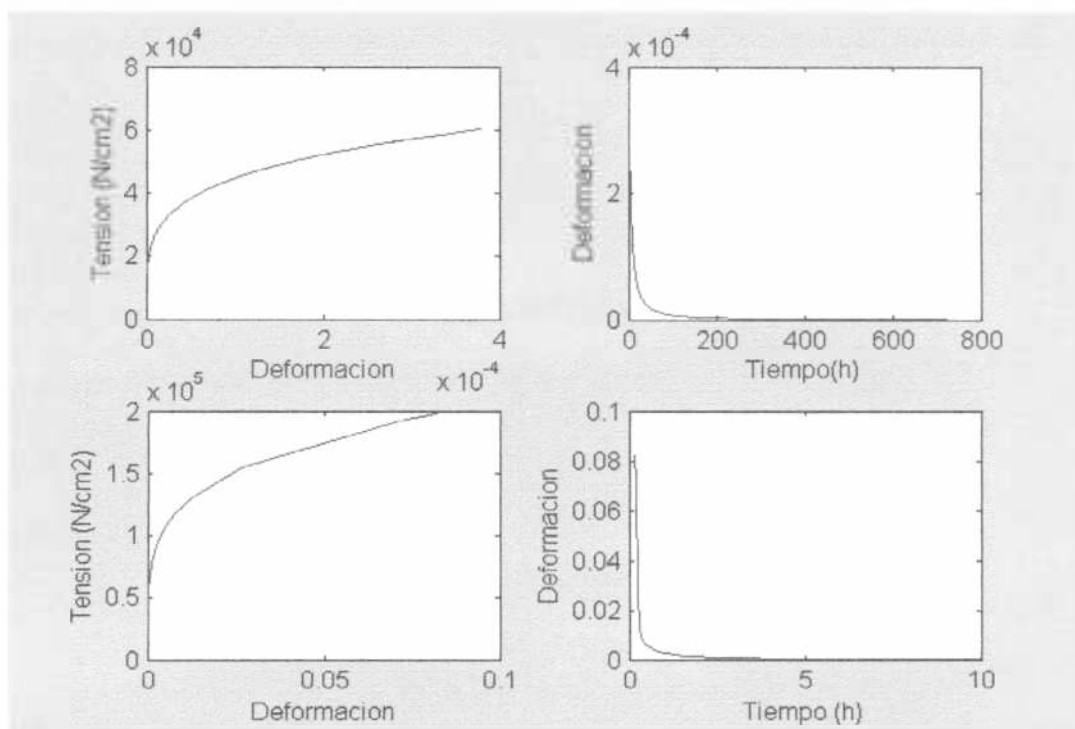


Figura II.11 El gráfico representa el creep sobre dos elementos de una pastilla de UO_2 debido a la distribución de tensiones que sufre el material por los fuertes gradientes de temperaturas generados.

II.7 Crecimiento por irradiación.

Uno de los efectos más significativos que la irradiación induce en los tubos de Zircaloy es el de la deformación del material. La misma ocurre en las tres direcciones pero es importante en la dirección axial debido al limitado espacio entre las vainas y las juntas del elemento combustible.

Modelos empíricos del crecimiento axial demuestran que esta elongación depende fuertemente del flujo de neutrones rápidos, la temperatura de la vaina y el tiempo, además de factores como la textura que no es tenida en cuenta en el código.

Una parametrización sencilla de esta deformación en las tres direcciones es tomada de la referencia [19]

$$d\varepsilon_z^{Ig} / dt = 4.942 \times 10^{-20} \phi$$

$$d\varepsilon_r^{Ig} / dt = -0.941 d\varepsilon_z^{Ig} / dt$$

$$d\varepsilon_\theta^{Ig} / dt = -0.059 d\varepsilon_z^{Ig} / dt$$

y donde ϕ = flujo de neutrones rápidos. El efecto es distribuido en forma matricial dentro de nuestro sistema multiplicando por δt , al igual que en el caso del creep.

$$\{\varepsilon^{Ig}\}_h^t = \begin{bmatrix} \varepsilon_{rr}^{Ig} & \varepsilon_{\theta\theta}^{Ig} & \varepsilon_{zz}^{Ig} & \varepsilon_{rz}^{Ig} \end{bmatrix}_h$$

$$\delta \varepsilon_{kk}^{Ig} = \frac{d\varepsilon_{kk}^{Ig}}{dt} \delta t$$

$$\delta \varepsilon_{kj}^{Ig} = 0$$

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

En la figura II.12 se grafican dos modelos de crecimiento por irradiación [8, 19] y los resultados simulados obtenidos con DIONISIO en una historia de potencia de aproximadamente 1200 días de duración (30000 horas). Los modelos son estándares en la literatura. Se debe tener en cuenta que los gráficos de ambos modelos fueron realizados a una temperatura constante e igual a la media de la historia de potencia y un flujo neutrónico fijo.

En cambio los datos de la simulación perciben variaciones ya que ni la temperatura ni el flujo neutrónico son constantes en el tiempo. No obstante ello, los resultados se encuentran dentro del rango de valores válidos.

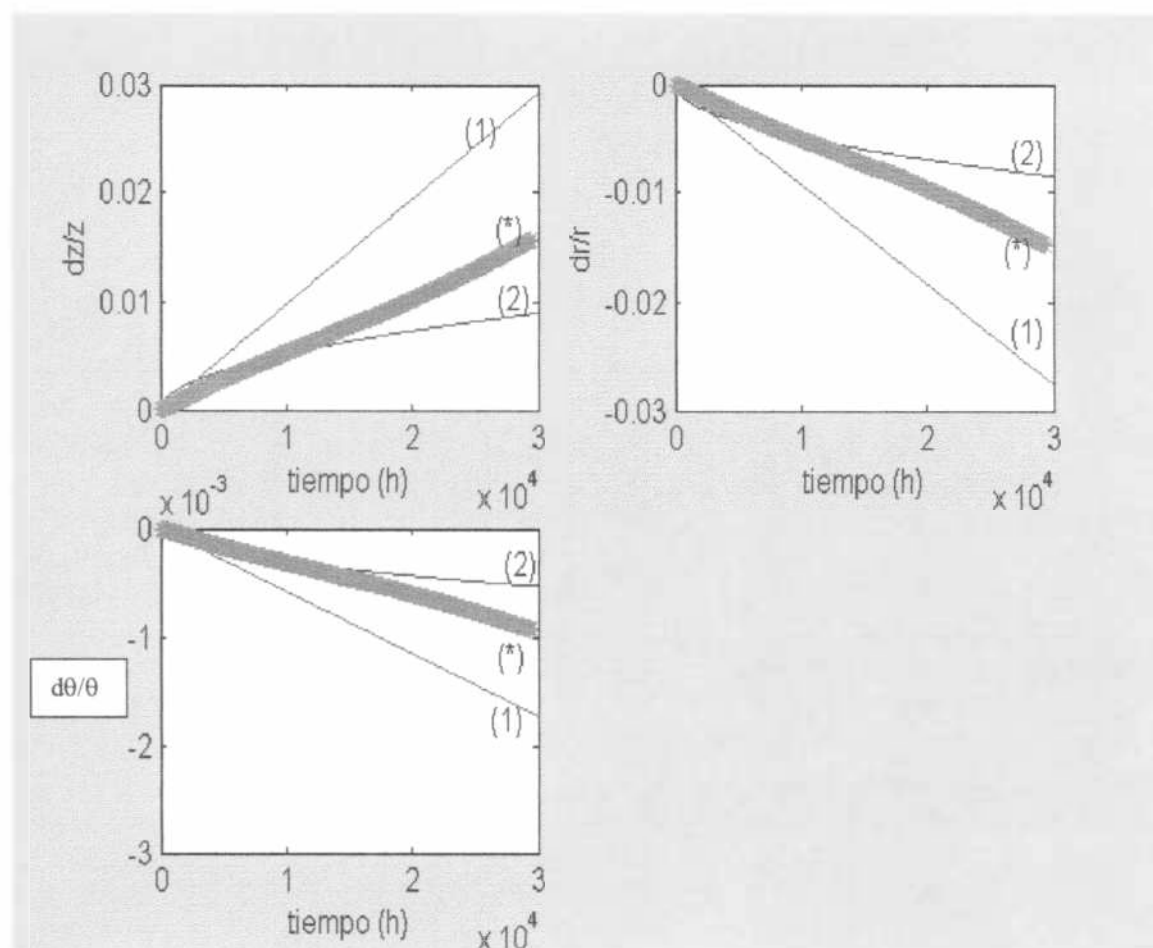


Figura II.12 Comparación entre modelos de crecimiento por irradiación. (1) modelo del BACO; (2) modelo del MATPRO; (*) Resultados de DIONISIO.

II.8 Modelo de liberación de gases de fisión.

El modelo de liberación de gases de fisión, que ya fuera presentado en trabajos previos, se basa en las siguientes hipótesis[9, 10]:

- ☆ 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 He y Kr por fisión de los átomos de U^{235} .
- ☆ 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.
- ☆ La velocidad del proceso está controlada por la difusión de los gases.
- ☆ Se considera que las burbujas intragranulares son inmóviles y que actúan como trampas para el gas que difunde.
- ☆ La irradiación puede causar la destrucción de ambos tipos de burbujas.
- ☆ Los átomos de gas contenidos en las burbujas intragranulares destruidas retoman al proceso de difusión. Debido a razones cinéticas, se establece una solubilidad dinámica, mucho mayor que la predicha por el diagrama de equilibrio.
- ☆ 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.
- ☆ 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.
- ☆ 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 (át/m^3), β es la tasa de generación de gas ($\text{át/m}^3\text{s}$), g y b son las probabilidades de captura y liberación de las trampas (át/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.[11]; el tamaño y concentración de las burbujas y los parámetros de atrape, g y b , se deben a White et al.[12]; la velocidad de crecimiento de los granos equiaxiados es la usada por Ito et al..[13]

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 [12].

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

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 $f_S=0.5$ [9,13,14]. 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 nuestro caso de interés, consideremos 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 [15]. Esto corresponde a una fracción de área cubierta $f_S = \pi\sqrt{3} / 12 = 0.453$. Ver figura II.13

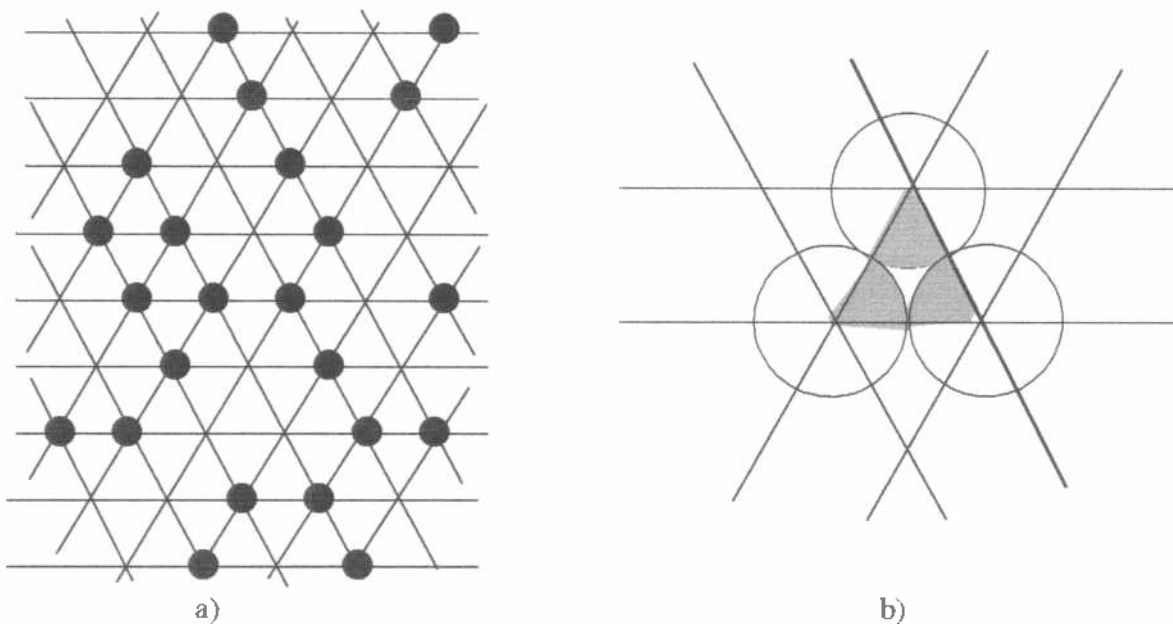


Figura II.13 a) Aspecto de la matriz en el umbral de percolación. b) Área de borde de grano ocupada por las burbujas si toda la matriz estuviese llena.

La función que representa la tasa de producción de gas, $\beta(r)$ [9], 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:

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

donde λ representa la profundidad de penetración de los átomos redisueltos, a es el radio del grano y la función $h(r)$ es tal que

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

donde N indica el número de átomos de gas por unidad de área del borde de grano.

Se puede elegir $h(r)$ como una función Gaussiana, pero por simplicidad se tomó una aproximación triangular [16]. La constante de proporcionalidad b' (1/s) representa la probabilidad de redisolución de las burbujas intergranulares y es uno de los parámetros del modelo.

Antes de la saturación, 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 :

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

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:

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

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. 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.

II.9 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:

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

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

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

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 grosera, suponemos que el hinchado provocado por los productos de fisión en la red está descrito por la relación empírica:[17]

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

II.10 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 podemos 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, 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

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

que es similar a la expresión usada en las Refs. [18, 19].

La fracción total de cambio de volumen debido a hinchado y densificación se obtiene como la suma de estas cuatro contribuciones. Esto da origen a un término extra de deformación

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

que se agrega a las contribuciones térmica, elástica, plástica y de creep.

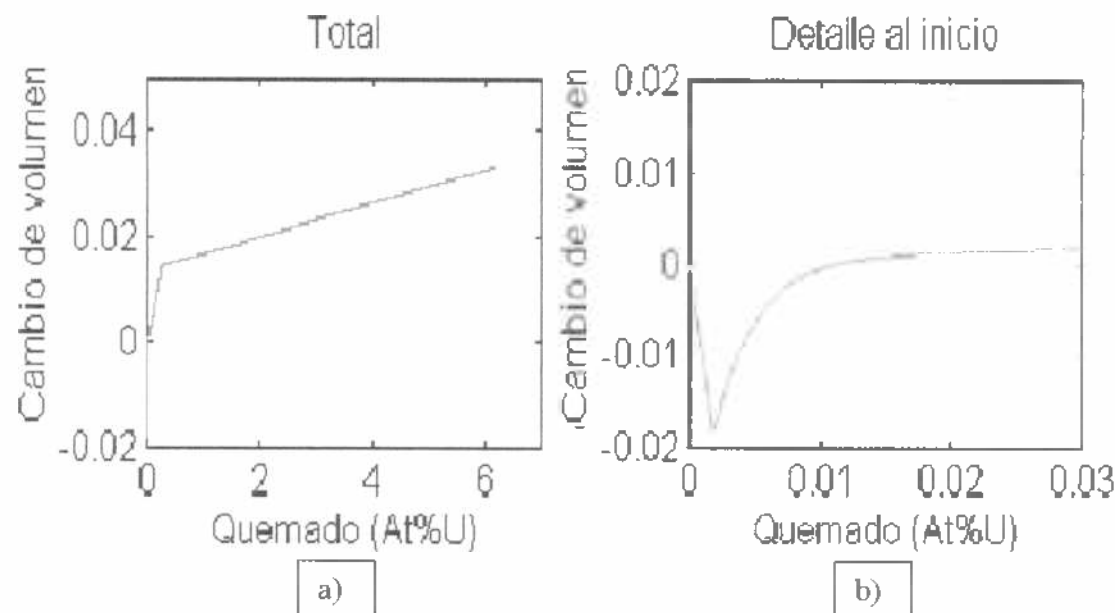


Figura II.14 Contribución total del hinchado y la densificación. El gráfico (b) muestra en detalle el inicio gobernado por la densificación.

En la figura II.14 se presenta el resultado simulado, en porcentaje de cambio de volumen, del swelling total en función del quemado medido en porcentaje de átomos de uranio quemado. El cambio relativo de volumen en el inicio de la historia de potencia está gobernado por la densificación que como vimos, alcanza un valor de saturación y se detiene. El hinchado recupera el tamaño y acrecienta el volumen de la pastilla con el tiempo. El quiebre que se observa en la figura II.14.a) indica que la contribución inicialmente más importante de las burbujas intergranulares alcanza su saturación, que coincide con el inicio de la liberación de gases. A partir de ese instante se hace evidente la contribución al hinchado de los productos de fisión disueltos en la red.

DIONISIO contempla todas las contribuciones al swelling y la densificación sumadas en un único parámetro, dado que todo el cálculo de estos fenómenos se realiza en la misma sección.

La figura II.15 representa una curva teórica de swelling y densificación y su correspondiente suma de contribuciones. El modelo es tomado del MATPRO [8] y se corresponde bien con los valores de la simulación obtenida con DIONISIO.

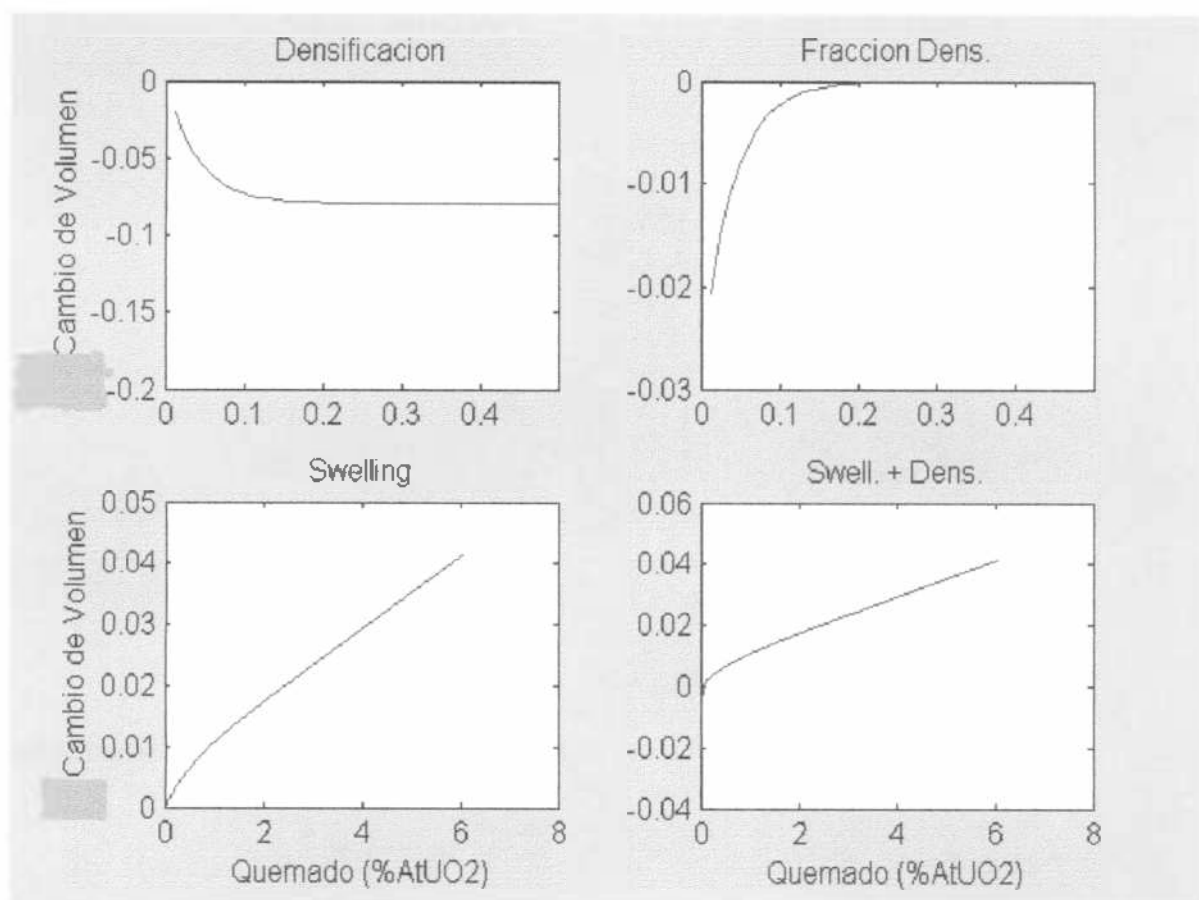


Figura II.15 Modelo de hinchado y densificación del MATPRO. La última figura es la suma de ambas contribuciones.

II.11 Modelo de mezclado de gases o gas mixing.

El factor que más influye en la distribución de temperaturas de nuestro sistema para una dada condición de contorno es la conductividad térmica del gas en el gap. La misma depende fuertemente de la composición del mismo. En la mayoría de las situaciones estudiadas el gas

de llenado es helio, pero a lo largo de la historia del quemado de la pastilla, los gases liberados pasan a formar parte de la composición del gap y modifican la conductividad del mismo. El gas liberado está compuesto mayoritariamente por xenón y kriptón, los cuales se distribuyen aproximadamente entre un 90% de xenón y un 10% de kriptón. Las conductividades están dadas por leyes de igual forma funcional para todos los gases [8,17]:

$$\kappa_{\text{He}} = 2.639 \times 10^{-3} T^{0.7085}$$

$$\kappa_{\text{Xe}} = 4.351 \times 10^{-5} T^{0.8616}$$

$$\kappa_{\text{Kr}} = 8.247 \times 10^{-5} T^{0.8363}$$

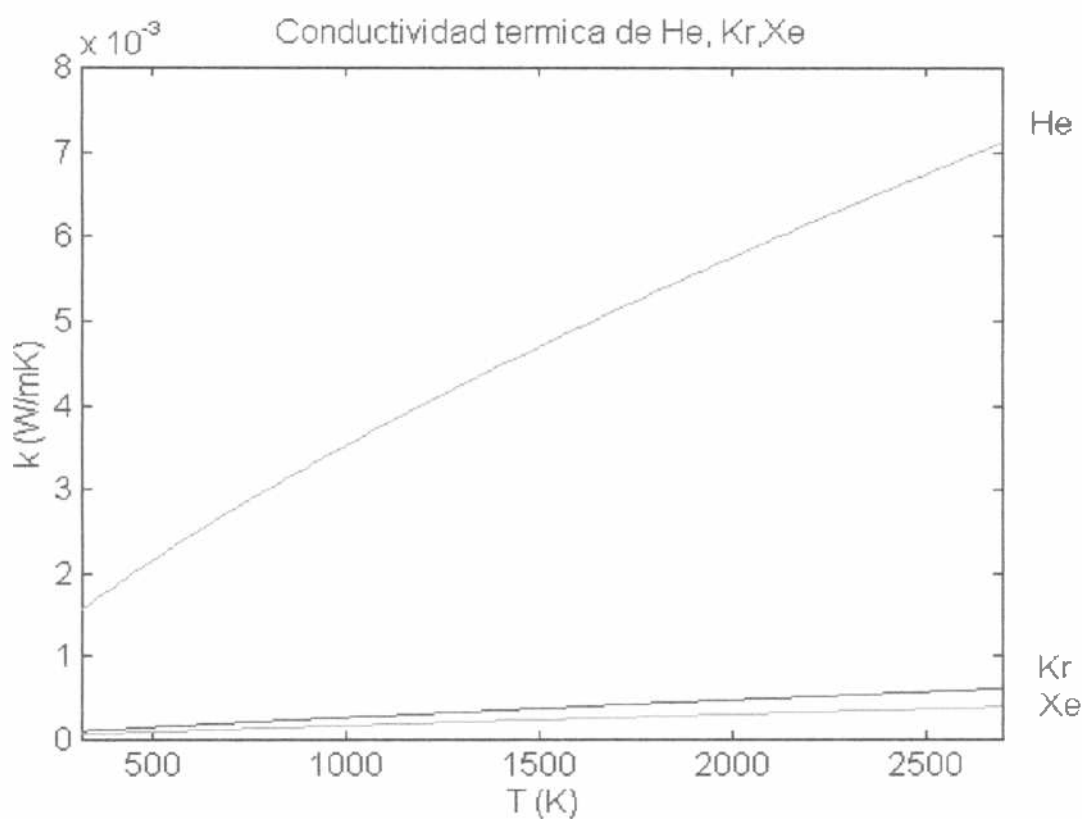


Figura II.16 Conductividades térmicas de He, Kr y Xe en función de la temperatura.

La conductividad de la mezcla de gases se calcula a partir de [8]:

$$\kappa_{mix} = \sum_{i=1}^n \frac{\kappa_i x_i}{x_i + \chi}$$

donde n es el número de componentes de la mezcla, κ_i y x_i son la conductividad térmica y la fracción molar de cada componente i y χ es una función del peso molecular, la fracción molar y la conductividad térmica de todos los componentes de la mezcla. Dado que las fracciones molares x_i varían a lo largo del quemado del combustible, la conductividad de la mezcla se debe evaluar en cada paso del cálculo.

En la figura II.17 puede apreciarse la conductividad obtenida en DIONISIO con diferentes proporciones de Kr y Xe liberadas a la mezcla.

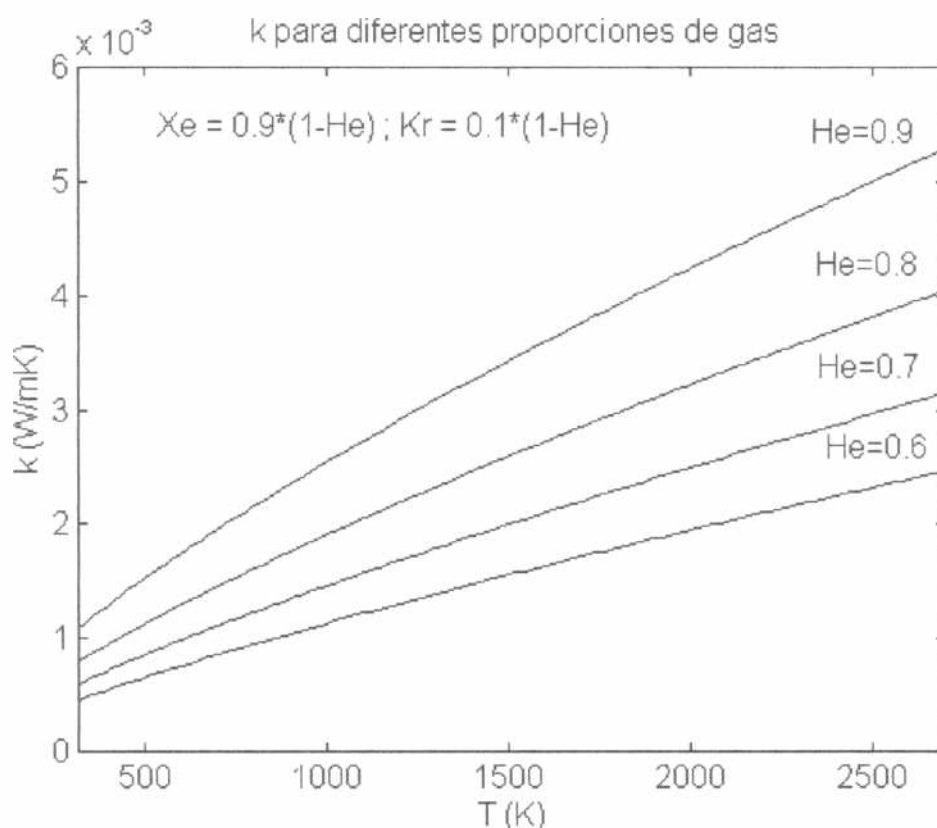


Figura II.17 Conductividad de la mezcla para diferentes proporciones de Xe y Kr. El modelo utilizado propone que del total de gas liberado a la mezcla un 90 % es Xe y un 10% Kr.

pequeña e incluso negativa. La simulación toma el gap cerrado y modifica las condiciones involucradas en consecuencia.

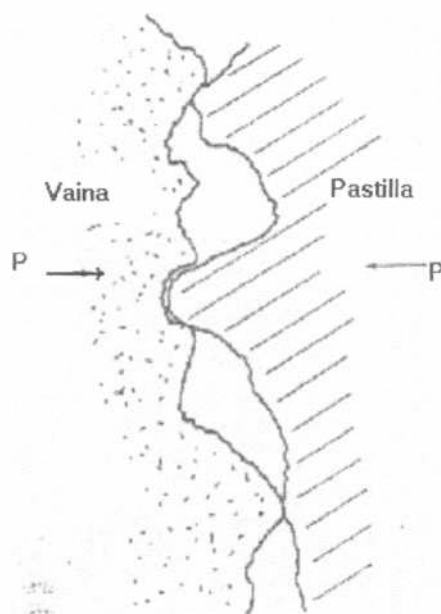


Figura II.18 Simulación gráfica del Gap cerrado.

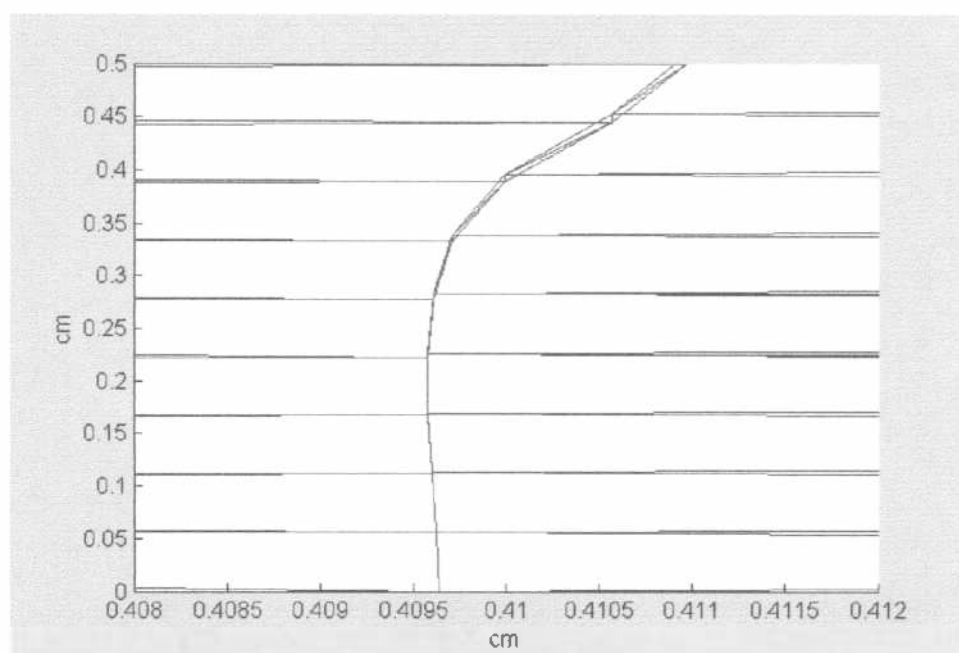


Figura II.19 Detalle de la salida del código Dionisio en la región del gap. "Cerrado" en este modelo significa que los elementos que conformaban el gap poseen un área muy pequeña.

II.13 Conclusión

En todo este capítulo se ha tratado de mostrar por separado cada componente a la que se aboca a resolver DIONISIO. Es claro que cada fenómeno idealmente simulado en forma individual sólo nos dice que la respuesta del código a dicho proceso físico concuerda con lo observado, pero nada nos dice de las complejas interrelaciones entre sucesos y en como afectan dichas interrelaciones los resultados finales. Pero es imprescindible realizar estas validaciones si se quiere comenzar a fusionar los diversos procesos físicos. No es posible emprender una tarea de simulación compleja si no se está seguro de que cada parte funciona correctamente. Este trabajo de validación ha servido en cada caso para comprender la naturaleza inherente a cada fenómeno estudiado así como la complejidad intrínseca a cada uno de ellos, su naturaleza y sus problemas numéricos a la hora de la simulación, lo cual resulta de una gran utilidad para analizar una posible falla del código general, pues según el tipo de falla es posible predecir en la gran mayoría de los casos, de que subrutina proviene el problema y qué parámetro es necesario modificar para resolverlo.

III. HERRAMIENTAS MATEMATICAS DE CALCULO = M.E.F.

III.1 Introducción.

El problema que resolvemos en DIONISIO involucra esencialmente a tres ecuaciones diferenciales acopladas. En primer lugar una ecuación de temperatura que determina la distribución térmica sobre el dominio compuesto por tres materiales. Con dicha distribución se resuelve la distribución de tensiones y deformaciones dada por las diferentes solicitaciones de cada material. Dichos materiales poseen constantes características diferentes y variables con el desarrollo del cálculo. Del mismo modo las condiciones de contorno que afectan a cada uno de ellos también se ven modificadas a lo largo del tiempo. La tercer ecuación se refiere a la liberación de gases de fisión del UO_2 y necesita de la distribución de temperatura del sistema y la distribución de tensiones como datos de entrada.

Debido a su complejidad el sistema de ecuaciones es abordado mediante métodos numéricos de resolución como el de los elementos finitos. En los apartados siguientes se ilustra la aplicación de dicho método a las ecuaciones que son resueltas por DIONISIO.

III.2 Pasos básicos. Ejemplo: Ecuación del calor.

Son numerosos los métodos que parten de la discretización del continuo en un número finito de partes cuyo comportamiento se especifica también mediante un número finito de parámetros. Los más destacados son por ejemplo el de las diferencias finitas (utilizado por ejemplo en el BACO) y los métodos variacionales; pero el avance de las capacidades de cómputo de las máquinas a las que pueden acceder los desarrolladores de software ha convertido al de los elementos finitos (EF) como uno de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales más utilizado debido a su versatilidad y dinamismo a pesar de su alto costo computacional.

Esencialmente el método usa una formulación integral para generar un sistema de ecuaciones algebraicas. Utiliza funciones llamadas de forma, continuas, para aproximar las cantidades desconocidas del problema. Los pasos de cualquier tratamiento típico de EF son los siguientes [24, 32]:

- i) Se discretiza la región. Se localizan y se numeran los nodos, se especifican las coordenadas y el tamaño de los elementos de acuerdo al grado de aproximación requerido. Una de las ventajas de los EF es permitir que el tamaño de los elementos varíe sobre un dominio determinado de tal forma que se pueden utilizar elementos mas pequeños en las regiones en donde la situación física requiera mayor precisión y elementos grandes en las regiones en donde los cambios no son significativos.
- ii) Se determina el orden de las funciones de aproximación que puede ser lineal, cuadrático, etc. Se debe escribir una ecuación por cada elemento que involucre a los nodos del mismo.
- iii) Se desarrolla el sistema de ecuaciones general integrando cada ecuación elemental con funciones de peso adecuadas para cada nodo desconocido. Posteriormente se ensambla ese sistema de ecuaciones
- iv) Se resuelve el sistema de ecuaciones.
- v) Se calculan las cantidades derivadas de los valores nodales obtenidos.

Para comprender el desarrollo de estos pasos correctamente, los aplicaremos a la resolución de la ecuación del calor, la primera de las ecuaciones diferenciales de nuestro problema.

i) Discretización del dominio

Nuestro sistema, como ya hemos mencionado, consiste en el continuo: Pastilla de combustible – Gap – Vaina de Zircaloy. Para discretizarlo utilizamos elementos triangulares lineales.

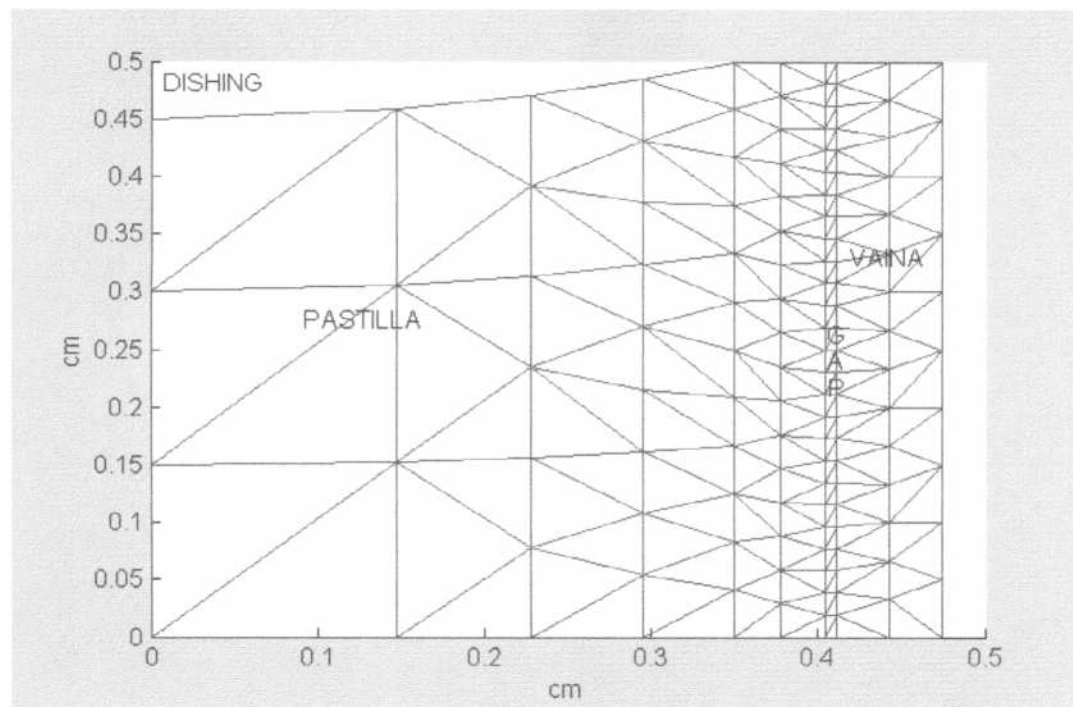


Figura III.1 Dominio de interés discretizado por EF

Recordemos que los elementos poseen simetría de revolución por lo que un elemento triangular debe verse como una suerte de toroide en forma de triángulo, como muestra a continuación la figura III.2 [7]

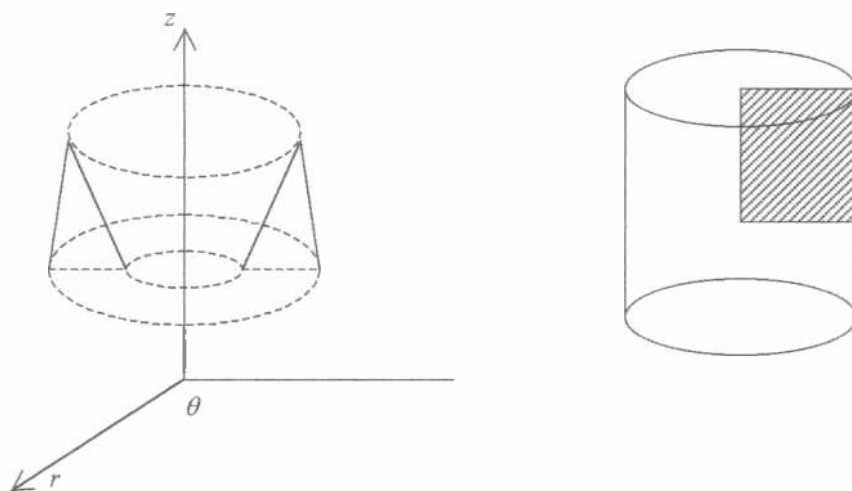


Figura III.2 Elemento triangular de revolución. Vista general del dominio cilíndrico discretizado.

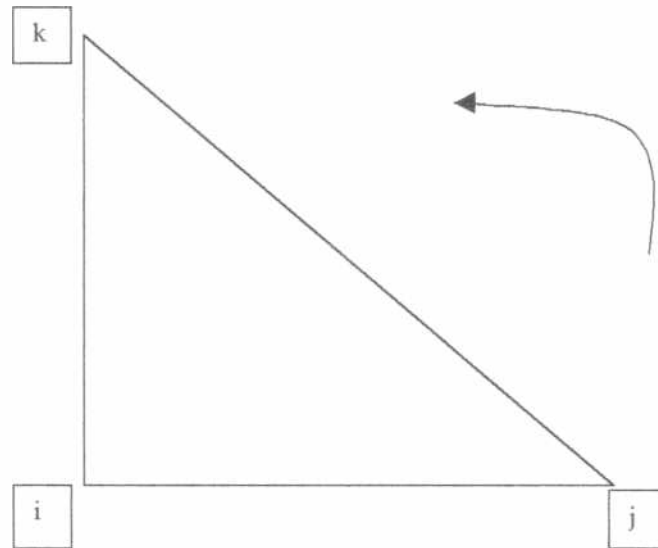


Figura III.3 La numeración de los nodos de un elemento debe respetar la orientación antihoraria.

ii) Utilizamos funciones de interpolación bilineales y continuas cuyos valores nodales ϕ_n son las incógnitas del problema y una vez conocidos nos permitirán, mediante interpolación, obtener el valor en cualquier punto del elemento finito. La expresión general de dichas funciones interpolantes es:

$$\phi = \alpha_1 + \alpha_2 r + \alpha_3 z$$

Cada nodo tiene asociado un par ordenado (r_n, z_n) con $n=i,j,k$, y los tres nodos que componen un elemento dan lugar a tres funciones de forma

$$N_n = \frac{1}{2A} [a_n + b_n r + c_n z]$$

con $n=i,j,k$ y

$$a_i = r_j z_k - r_k z_j$$

$$b_i = z_j - z_k$$

$$c_i = r_k - r_j$$

con sus índices cíclicos. A es el área de los elementos y se utiliza la notación $x-y$ para las coordenadas por comodidad. Las funciones de forma toman valores nodales definidos $N_i(r_i, z_i) = 1$; $N_i(r_j, z_j) = N_i(r_k, z_k) = 0$ en el caso i y de igual modo en los nodos restantes.

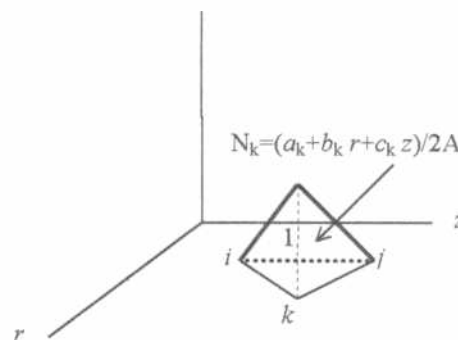
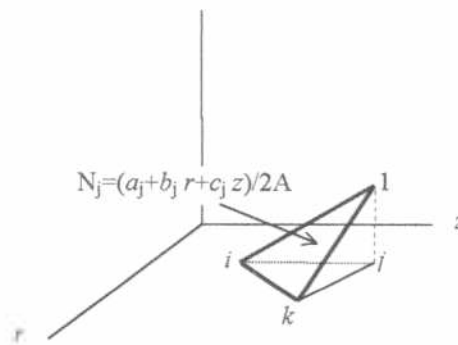
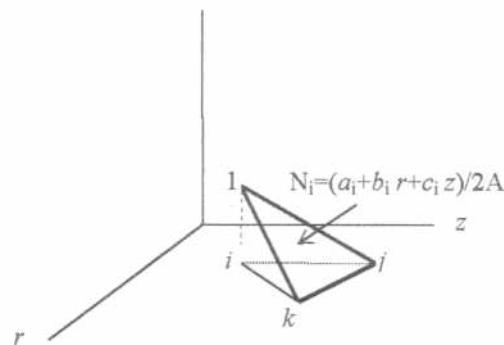


Figura III.4 Funciones de forma bilineales N_i , N_j y N_k sobre un elemento triangular.

Nótese que con sólo las coordenadas de los nodos elegidas arbitrariamente se ha construido un sistema de ecuaciones que recorre todo el dominio, vincula a todas las partes del mismo entre sí y todavía no hemos involucrado a la ecuación que queremos resolver, de la que se obtendrán los valores nodales ϕ_n .

iii) La ecuación del calor en dos dimensiones en coordenadas cilíndricas con simetría de revolución tiene la forma:

$$\frac{1}{r} k_r \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + k_z \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = Q$$

donde ψ es la temperatura, k_r y k_z son las conductividades en cada dirección significativa, y Q es el calor quemado por unidad de tiempo y de volumen. A la que hay que agregar las condiciones de contorno de Dirichlet y de Neumann

$$\psi|_{r=r_{ext}} = T_0$$

$$\nabla \psi = 0 \quad \text{en los tres bordes exteriores del sistema restantes.}$$

El armado del sistema de ecuaciones y la integración se lleva a cabo a partir de minimizar el residuo de la integral de la ecuación diferencial pesada con las funciones de forma para cada elemento (Método de Galerkin o de Rayleigh-Ritz)[23, 24].

$$\{R^{(e)}\} = - \int_V [N]^T \left(k_r \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 r} + k_z \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 z} + Q \right) dV$$

donde $[N]$ es el vector fila de las funciones de forma del elemento e y $\{R^{(e)}\}$ es el vector columna que contiene el residuo a minimizar del elemento finito e . Después de una integración por partes en donde se incluyen las condiciones de contorno del problema la ecuación adquiere su forma algebraica característica:

$$\{R^{(e)}\} = [K^{(e)}] \{\phi^{(e)}\} - \{f^{(e)}\}$$

donde

$$[K^{(e)}] = \int_V k_r \frac{\partial [N]^T}{\partial r} \frac{\partial [N]}{\partial r} + k_z \frac{\partial [N]^T}{\partial z} \frac{\partial [N]}{\partial z} dV$$

$$\{f^{(e)}\} = \int_A Q [N]^T dA$$

y $\{\phi^{(e)}\}$ es el vector cuyas componente son los valores ϕ_n de la solución en los nodos correspondientes al elemento e .

$$\{\phi^{(e)}\} = [\phi_i \quad \phi_j \quad \phi_k]$$

Para el caso de elementos triangulares con simetría de revolución las integrales toman la sencilla formulación matricial

$$\phi^{(e)} = [N_i \quad N_j \quad N_k] \{\phi^{(e)}\}$$

$$[B]^T = \left[\frac{\partial [N]^T}{\partial r} \quad \frac{\partial [N]^T}{\partial z} \right]$$

$$[B] = \frac{1}{2A} \begin{bmatrix} b_i & b_j & b_k \\ c_i & c_j & c_k \end{bmatrix}$$

$$[K^{(e)}] = \int_V [B]^T [D] [B] dV = [B]^T [D] [B] V = 2\pi R_{med} A [B]^T [D] [B]$$

$$[D] = \begin{bmatrix} k_r & 0 \\ 0 & k_z \end{bmatrix}$$

$$\{f_Q^{(e)}\} = \int_V Q [N]^T dA = \frac{2\pi QA}{12} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i \\ x_j \\ x_k \end{bmatrix}$$

La matriz $[K^{(e)}]$ se denomina matriz de rigidez del elemento e y el vector $\{f^{(e)}\}$ vector de fuerza asociada a la potencia Q .

De este modo la ecuación diferencial ha quedado reducida a un sistema de ecuaciones algebraicas para cada elemento. El paso siguiente es ensamblar todas las ecuaciones en un sistema general. Si observamos las ecuaciones elementales, la numeración de los nodos se realiza utilizando cíclicamente i,j,k en sentido antihorario. Obviamente cada nodo que pertenece a un elemento posee un número absoluto, que es el número que se le asignó en la discretización primaria del dominio. Ese número es el que se utiliza para dar ubicación a cada dato en la matriz general del sistema. Como cada nodo participa en general en la construcción de mas de un elemento, los sucesivos datos se sumaran en la matriz general hasta completar la lista de elementos del dominio. El sistema final:

$$[K]\{\phi\} = \{f\}$$

comprende una matriz de dimensión *Nodos x Nodos* y vectores de dimensión *Nodos*. La matriz de rigidez total es simétrica, cuadrada y convenientemente “poco ancha”.

iv) La resolución de un sistema de ecuaciones de dimensiones grandes reviste ciertas dificultades de orden computacional en donde la variable a minimizar es el tiempo de cómputo. En una primera versión del programa se utilizaba un método directo de resolución, el de diagonalización de Gauss. El mismo utilizaba los elementos de la diagonal como pivotes, convertía a cero los elementos no nulos de cada columna debajo de los elementos diagonales y calculaba cada valor nodal por retrosustitución. El método es confiable y exacto siempre que las matrices no posean elementos nulos en la diagonal, como es el caso de las

involucradas en este tipo de ecuaciones. El único inconveniente es que el tiempo de cálculo se elevaba mucho cuando aumentaba el número de nodos del dominio o comenzamos a trabajar con iteraciones no lineales que involucraban muchos pasos de resolución. Téngase en cuenta que la triangularización de una matriz tiene un costo computacional que va como $O(N^3)$ donde N es el número de incógnitas o filas de la matriz [7, 25].

Sabiendo que la matriz es simétrica, de elementos diagonales no nulos y que además la cantidad de no ceros debajo de la diagonal es relativamente baja (para elementos lineales hay un promedio de 6 elementos no nulos por fila independientemente del número de ecuaciones) se tiende a utilizar métodos directos que explotan esta forma particular de las matrices. Por ejemplo un almacenamiento de los valores tipo banda reduce el costo computacional a $O(Na^2)$ donde a es el ancho de banda del sistema.

En términos de la red de EF, el ancho de banda estará dado por la máxima diferencia de numeración entre dos nodos de un mismo elemento. Dado que obtener un valor menor de a tiene una importancia directa en el costo computacional, resulta importante minimizarlo renumerando los nodos adecuadamente. En problemas bidimensionales $a \approx N^{0.5}$ por lo que el costo de factorizar se reduce a $O(N^2)$.

La forma más eficiente para grandes sistemas de ecuaciones es el almacenamiento ralo (sparse), que requiere una redistribución nodal totalmente diferente. El sistema ralo construye un vector que contiene sólo los elementos no nulos de la matriz. Otro vector almacena las posiciones de cada elemento en la matriz de rigidez total. El cálculo requiere subrutinas especiales para realizar la resolución del sistema, subrutinas que fueron desarrolladas en la CNEA y son de uso libre. Las mismas se adaptaron a DIONISIO. El esfuerzo bien vale la pena pues el costo computacional se reduce a $O(N^{1.4})$ aproximadamente [24, 25].

v) Con los datos obtenidos para ϕ en cada nodo, que en el caso de la ecuación del calor es la temperatura en cada nodo, se puede realizar el análisis de dichos resultados de múltiples maneras. A través de gráficas y curvas pueden estudiarse las distribuciones de temperaturas sobre el dominio, etc. Los datos derivados en el caso de la temperatura pueden ser los gradientes por elemento o el cálculo de flujo. Para el problema mecánico, en donde los

valores obtenidos son los desplazamientos nodales, puede calcularse la tensión y la deformación del elemento, etc.

Estos cinco pasos ilustran, en el caso de la ecuación térmica, el desarrollo esquemático del método de EF, la resolución general y el análisis de resultados. Como se expondrá a continuación, su extensión a problemas de mayor complejidad y al caso elástico no rebierte mayor dificultad matemática.

III.3 El problema elástico.

Para el caso de la ecuación diferencial que gobierna al problema elástico, las incógnitas del problema se duplican, pues para cada nodo existen dos desplazamientos posibles, uno por cada dirección. Cada vector incógnita $\{U\}$ para cada nodo i tendrá dos componentes: U_{2i-1} en la dirección r y U_{2i} en la dirección z . De esta forma todas las dimensiones de las matrices del sistema se duplicarán, con la consiguiente magnificación del problema computacional.

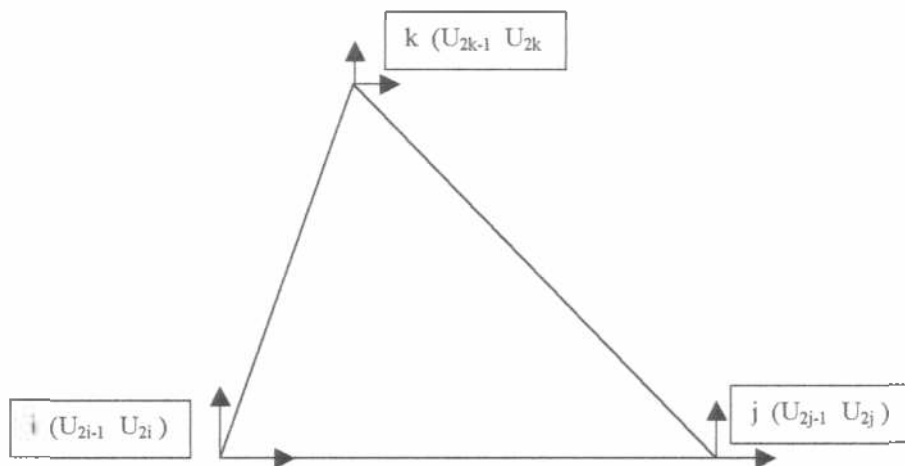


Figura III.5 En el problema elástico cada nodo posee dos variables incógnita, una por cada dirección asociada a la dimensiones del problema.

La deducción del sistema de ecuaciones en el caso de los desplazamientos es ligeramente diferente al caso térmico. La integral a minimizar en este caso va a ser la energía elástica del sistema:

$$\Lambda^{(e)} = \frac{1}{2} \int_{Vol} \{\sigma\}^T \{\epsilon^{(El)}\} dV$$

donde $\{\epsilon^{(El)}\}$ es el vector deformación elástica del elemento. Utilizando la ley de Hooke

$$\Lambda^{(e)} = \frac{1}{2} \int_V \{\epsilon^{(El)}\}^T [D] \{\epsilon^{(El)}\} dV$$

donde $[D]$ es la matriz del material. En el capítulo anterior habíamos calculado los vectores deformación correspondientes a cada una de las sollicitaciones involucradas en el sistema. La deformación total será

$$\{e\} = \{\epsilon^{(El)}\} + \{\epsilon^{Th}\} + \{\epsilon^{(P)}\} + \{\epsilon^{(C)}\} + \{\epsilon^{(Sw)}\} + \{\epsilon^{(Ig)}\}$$

donde $\{e\}$, $\{\epsilon^{(El)}\}$, $\{\epsilon^{Th}\}$, $\{\epsilon^{(P)}\}$, $\{\epsilon^{(C)}\}$, $\{\epsilon^{(Sw)}\}$ y $\{\epsilon^{(Ig)}\}$ son respectivamente las deformaciones total, elástica, por dilatación térmica, plástica, por creep, por hinchado y por crecimiento por irradiación. Despejando de esta última ecuación la deformación elástica e introduciéndola en la integral para la energía elástica obtenemos:

$$\Lambda^{(e)} = \frac{1}{2} \int_V \{e\}^T [D] \{e\} dV - \frac{1}{2} \sum_h \int_V \{\epsilon^{(h)}\}^T [D] \{\epsilon^{(h)}\} dV$$

con $h = P, C, Th, Sw, Ig$.

Por otro lado, las deformaciones totales $\{e\}$ están vinculadas a los desplazamientos nodales y las funciones de forma del elemento:

$$u = N_i U_{2i-1} + 0U_{2i} + N_j U_{2j-1} + 0U_{2j} + N_k U_{2k-1} + 0U_{2k}$$

$$v = 0U_{2i-1} + N_i U_{2i} + 0U_{2j-1} + N_j U_{2j} + 0U_{2k-1} + N_k U_{2k}$$

Usando notación matricial:

$$\begin{bmatrix} u(r, z) \\ v(r, z) \end{bmatrix} = [N] [U^{(e)}]$$

y aplicando las diferenciaciones a las funciones desplazamiento, obtenemos la relación con el vector deformación total:

$$\begin{bmatrix} e_{rr} \\ e_{\theta\theta} \\ e_{zz} \\ e_{rz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_i & 0 & b_j & 0 & b_k & 0 \\ \frac{2AN_i}{r} & 0 & \frac{2AN_j}{r} & 0 & \frac{2AN_k}{r} & 0 \\ 0 & c_i & 0 & c_j & 0 & c_k \\ c_i & b_i & c_j & b_j & c_k & b_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{2i-1} \\ U_{2i} \\ U_{2j-1} \\ U_{2j} \\ U_{2k-1} \\ U_{2k} \end{bmatrix}$$

donde N_i, N_j, N_k son las funciones de forma lineales. Reemplazando en las integrales de la energía y minimizando de igual modo que en el caso térmico, obtendremos la ecuación para la matriz de rigidez elemental:

$$[K^{(e)}] = 2\pi R_{med} A [B]^T [D] [B]$$

y un vector “fuerza” asociado a cada contribución a la deformación total del sistema de la forma:

$$\{f_h^{(e)}\} = \int_V [B]^T [D] \{e^h\} dV = 2\pi R_{med} A [B]^T [D] \{e^h\}$$

con $h = P, C, Th, Sw, Ig$.

Los términos elementales se ensamblan del modo ya explicado y se alcanza un sistema algebraico de ecuaciones de dimensión $2Nodos \times 2Nodos$.

$$[K]\{U\} = \sum_h \{f^h\}$$

El vector “fuerza” incluye también una componente relacionada con las fuerzas exteriores del sistema que en nuestro caso esta constituido por las presiones sobre cada una de las paredes que poseen dicha condición.

III.4 La ecuación temporal de Difusión.

La última ecuación diferencial a resolver en el programa es la ecuación de difusión de gas en un grano esférico con fuentes y sumideros. El modelo de gases de fisión fue desarrollado en forma independiente.[16] Uno de los desafíos que involucró este trabajo fue acoplar ambos modelos en un programa único.

La ecuación a resolver en cada grano tiene la forma de una ecuación de difusión unidimensional dependiente del tiempo enunciada previamente en II.8.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \beta$$

La integración por EF se produce en forma similar a la ecuación de difusión del calor. En este caso, por ser un problema con alta simetría, se resuelve en coordenadas esféricas pero con sólo la coordenada radial como variable relevante. Los elementos serán unidimensionales con funciones de forma lineales tal cual sucedió en los casos anteriores.

Integrando por partes la ecuación pesada con las funciones de forma obtenemos una ecuación similar al caso térmico para el residuo:

$$\{R^{(e)}\} = - \int_A D^T [N]^T \left[\frac{\partial [N]}{\partial r} \right] \{\psi\} dA + \int_V D^T \frac{\partial [N]^T}{\partial r} \frac{\partial [N]}{\partial r} \{\psi\} dV - \int_V [N]^T \beta dV + \int_V [N]^T [N] \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} dV = 0$$

Los dos primeros términos del segundo miembro se convierten en la matriz $[K]$, el término que contiene al escalar β es similar al vector fuerza relacionado con la potencia Q en la ecuación del calor. El último es el término temporal y es el que esta ecuación posee de diferente con las demás. Dicho término se convertirá en una matriz $[C]$ llamada matriz de masa, obteniéndose entonces el sistema de ecuaciones:

$$[C] \left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} + [K] \{\psi\} = \{f\}$$

Para resolver el problema primero debemos hallar la manera de quitar la derivada temporal de la ecuación. Para lo cual se discretiza el eje temporal:

$$\left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\} = \frac{\{\psi_{nueva}\} - \{\psi_{anterior}\}}{\Delta t}$$

Luego se utiliza el método de la familia α que consiste en aproximar dos pasos temporales consecutivos, s y $s+1$, mediante una interpolación lineal de los valores de las variables entre ambos pasos.

$$\left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\}_s = \frac{\{\psi\}_s - \{\psi\}_{s-1}}{\Delta t}$$

$$\left\{ \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\}_{s+1} = \frac{\{\psi\}_{s+1} - \{\psi\}_s}{\Delta t}$$

Despejando se obtiene la formulación más genérica de la ecuación de donde se obtendrán los valores $\{\psi\}_{s+1}$:

$$(1-\alpha)\left\{\frac{\partial \psi}{\partial t}\right\}_s + \alpha\left\{\frac{\partial \psi}{\partial t}\right\}_{s+1} = \frac{\{\psi\}_{s+1} - \{\psi\}_s}{\Delta t} \quad 0 \leq \alpha < 1$$

Según los valores que tome α se obtienen los bien conocidos esquemas de integración temporal

$\alpha = 0$ diferencias hacia adelante o esquema de Euler.

$\alpha = 1$ diferencias hacia atrás.

$\alpha = 0.5$ Esquema de Crank-Nicolson [22,23].

De esta manera la ecuación queda definitivamente reducida a un sistema algebraico sobre $\{\psi\}$ en el tiempo $s+1$. Sustituyendo las derivadas temporales por un esquema de la familia α , después de un cálculo algebraico obtenemos la ecuación para el vector incógnita:

$$([C] + \alpha \Delta t_{s+1} [K]_{s+1}) \{\psi\}_{s+1} = ([C] - (1-\alpha) \Delta t_{s+1} [K]_s) \{\psi\}_s + \Delta t_{s+1} (\alpha \{f\}_{s+1} + (1-\alpha) \{f\}_s)$$

Si elegimos $\alpha=1$ el esquema se denomina implícito, es estable y considerablemente simple. Para calcular el paso $s=1$ se debe conocer las condiciones en $s=0$ así como $[K]_0$, $\{f\}_0$ y $\{\psi\}_0$. Pero si se elige el esquema explícito ya no necesitamos conocer $[K]_0$ y $\{f\}_0$.

En las figuras III.6 y III.7 se presentan dos ejemplos de convergencia de soluciones en dos esquemas. En el primer caso se analiza la convergencia en el esquema de diferencias hacia delante en donde se puede observar que la convergencia está garantizada para intervalos temporales relativamente pequeños. Mientras que en el segundo caso, en el esquema de Crank-Nicolson la convergencia se produce para todo tiempo. Pero para tiempos relativamente altos, el sistema presenta ciertas inestabilidades frente a la solución. Obsérvese la magnitud del intervalo temporal con relación al esquema de diferencias hacia atrás. El esquema de Crank-Nicolson converge para intervalos veinte veces mayores.



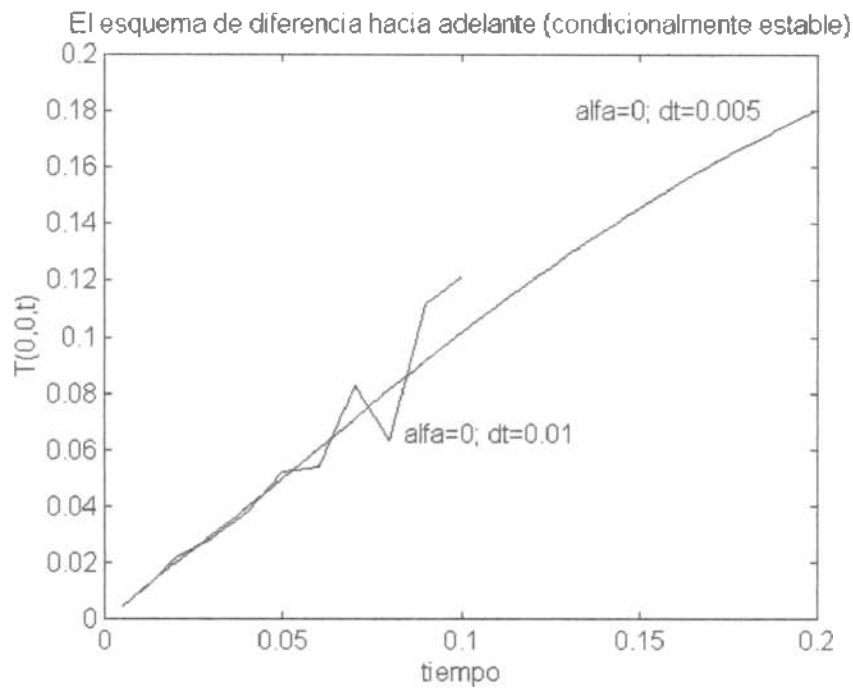


Figura III.6 Ejemplo de convergencia en el esquema de diferencias hacia adelante.

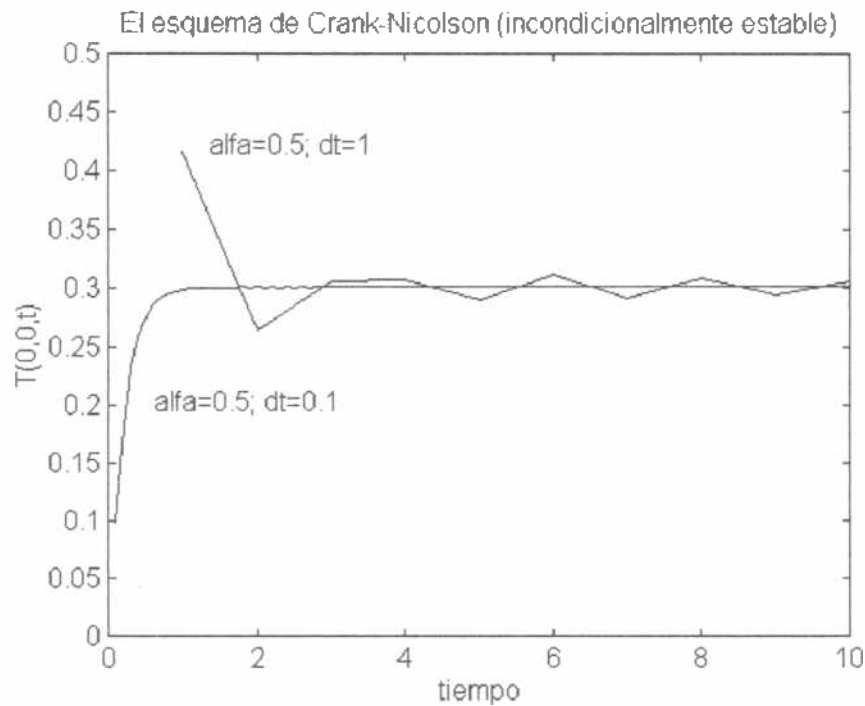


Figura III.7 Convergencia con el esquema de Crank-Nicolson.

III.5 Convergencia y errores.

Hemos analizado la aplicación del método de elementos finitos en los casos específicos de interés para nuestro problema, el cual incluye un dominio específico tanto espacial como temporal. Como pudo observarse, el método es muy amplio y ofrece una gran versatilidad para adaptarse a todo tipo de situaciones. Los esquemas desarrollados en estas páginas han sido probados y estudiados por numerosos autores de los cuales se encuentra un breve grupo en nuestra bibliografía [7, 22, 23, 24]. Sólo resta aclarar que 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. 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 TABLA III.1 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

TABLA III.1. *Grado de precisión de los resultados con EF a medida que crece el número de elementos finitos.*

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, un lado de un elemento triangular.

- 2) Errores de cuadratura: se producen al evaluar integrales en forma aproximada (ese problema no lo poseemos en DIONISIO porque al utilizar elementos triangulares las integrales se evalúan en forma exacta), 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,

$$u \approx u_h = \sum_{n=1}^{Nodos} \phi_n N_n$$

donde ϕ_n denotaba el valor de la función u en el nodo n y N 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.

IV. DESCRIPCION DEL CODIGO DIONISIO.EXE; HERRAMIENTAS VISUALES ENTRADA.EXE, LUMIERE.EXE

IV.1 Aspectos Básicos.

El programa DIONISIO fue desarrollado en el lenguaje FORTRAN 90, utilizando el compilador Microsoft FORTRAN Power Station Version 1.0. La razón de utilizar este lenguaje de programación se debió principalmente a que es el más utilizado por la comunidad científica lo que lo vuelve dúctil a las adaptaciones para utilizar subrutinas ya escritas y porciones de códigos ya probadas. DIONISIO en su versión actual es un programa modular, pensado para funcionar como un cuerpo mínimo y la posibilidad de acoplar diferentes cálculos o desacoplarlos. Esto es que si no estamos interesados en sumar la contribución del creep, por ejemplo, bastará con desactivar (comentar) el llamado a la subrutina correspondiente al cálculo de creep. El programa funcionará sin ese cálculo y nada deberá ser modificado estructuralmente. De este modo las sucesivas instancias que sean agregadas, como ser el cálculo de fractura, fatiga, etc., podrán sumarse con las entradas y salidas asignadas sin necesidad de tocar el código ya existente. Del mismo modo, el manejo funcional de los parámetros permite al usuario calcular muchas situaciones diversas simplemente modificando la sección de funciones sin adentrarse en el programa. Eso permite un dinamismo interesante con el costo de tener que ingresar en el texto del código y recompilar el programa. Actualmente el código consta de unas 5000 líneas. El tiempo utilizado para recorrer una historia de potencia promedio es de aproximadamente 10 minutos, utilizando un procesador Pentium II de 500 MHz de frecuencia. Ese tiempo es consumido en su mayor parte por la resolución del sistema de ecuaciones algebraicas que corresponden a la matriz rigidez y el vector fuerza.

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.

Se han desarrollado también dos aplicaciones subsidiarias del programa: ENTRADA y LUMIERE. La primera es un editor simple que contiene un texto madre simil del archivo de entrada que necesita DIONISIO. La entrada al programa requiere de cierta cantidad de palabras claves en una posición determinada. Para evitar errores en el usuario y el engorroso trabajo de manipular esos archivos, ENTRADA proporciona una solución práctica y sencilla. Del mismo modo se provee de un archivo modelo que contiene una historia de potencia correctamente ordenada como lo solicita DIONISIO. El usuario sólo debe completar los campos con su propia historia de potencia acorde a su problema.

LUMIERE es una primera versión de un programa para tratar las numerosas salidas que contiene DIONISIO. Como se puede observar en el diagrama de flujo del programa Fig. IV.3, existe una cantidad enorme de resultados y datos de salida que se almacenan en más de veinte archivos. Tal cantidad de datos es inabarcable para quien no conoce el funcionamiento de dichos archivos y cómo fueron almacenados esos datos. LUMIERE proporciona una interfaz gráfica apropiada y simple. Es posible utilizar para el manejo de los datos programas de uso comercial y probablemente el usuario experto los prefiera, ya que permiten un manejo dúctil de la información. Pero para quien desee corroborar sus resultados sin necesidad de aprender a manejar un software comercial, LUMIERE le servirá.

Tanto ENTRADA como LUMIERE fueron desarrollados en Visual C++ versión 4.0.

IV.2 Pre Proceso.

El archivo entrada.txt generado por el programa ENTRADA contiene información acerca de la discretización del dominio, las condiciones de contorno y los parámetros característicos del sistema. La tabla IV.1 contiene la información detallada de entrada.

La primera decisión que el usuario de DIONISIO debe tomar es si utilizará un generador de mallas propio, o dejará al programa que realice el trabajo. En caso de optar por utilizar un generador profesional para discretizar el dominio, es importante destacar que la forma de ese archivo debe ser similar a la leída por el programa. El modelo de ese archivo se ha tomado de la salida del programa DELAUNAY – 2D, versión 2.0 CAB-LNCC desarrollado por Marcelo Vénere et al [41]. En caso de determinar que DIONISIO discretice la región, se deberá ingresar los nueve nodos que requiere el programa (Ver figura IV.1)

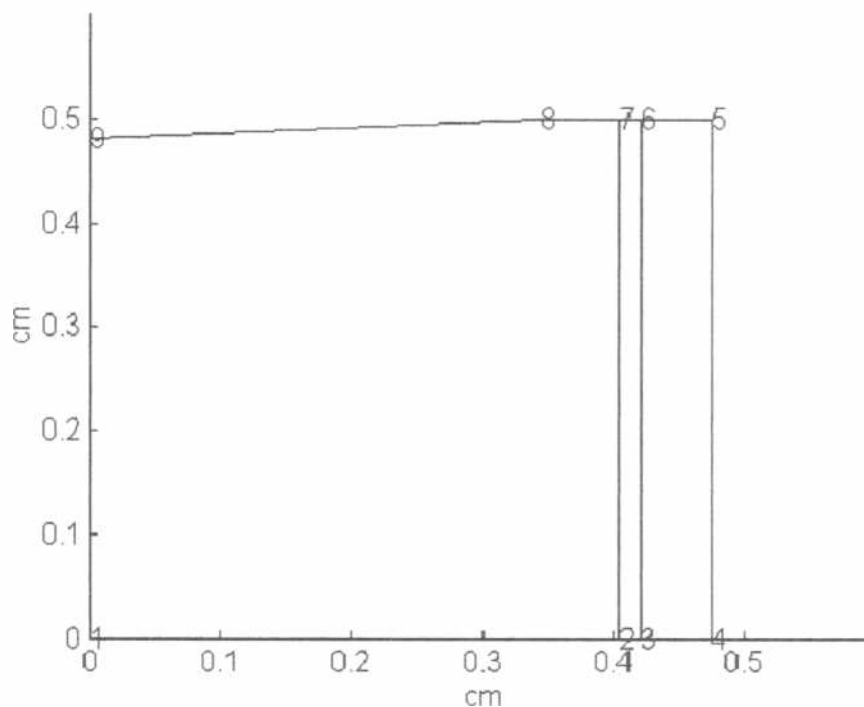


Figura IV.1 Los nueve nodos que deben ingresarse en Entrada.txt y determinan la forma del dominio.

La misma situación se plantea con el archivo de condiciones de contorno, aunque se recomienda fuertemente que se permita a DIONISIO determinar los nodos del dominio afectados por las condiciones de contorno del problema, pues su automatización asegura la ausencia de errores.

PALABRA CLAVE	FORMA DE INGRESO	COMENTARIO
*TITULO	Texto	Todo lo que se escribe debajo de esta línea no es leído por el programa
*ARCHIVO POTENCIA	1 Archivo Potencia.txt	El 1 indica que el archivo está presente. Ingresa el nombre con la extensión. La ausencia de este dato detiene el programa.
*ARCHIVO MALLA	1 / 0 Archivo Malla.fem	1 indica que el archivo está presente. 0 no ingresa archivo malla. Ingresa el nombre con la extensión.
*ARCHIVO CCTRNO	1 / 0 ArchivoCCtrno.txt	1 indica que el archivo está presente. 0 no ingresa archivo de condiciones. Ingresa el nombre con la extensión.
*NODOS (cm)	0 / 9 1 x_1 y_1 2 x_2 y_2 ...	0 Indica que no ingresa coordenada de nodos 9 si se ingresan las coordenadas de los nodos manualmente. Se utilizan en caso de necesitar que el programa discretice el dominio. Debajo y encolumnados ingresan las coordenadas en cm.
*VOLUMEN_DISHI (cm ³)	Numérico	Ingresa el volumen del dishing en centímetros cúbicos
*VOLUMEN_PLENUM (cm ³)	Numérico	Ingresa el volumen del Plenum en centímetros cúbicos.
*SIZE	1 size_1 2 size_2 3 size_3	Tamaños de los elementos de la discretización en cada sector significativo. 1 para el centro de la pastilla; 2 para el gap; 3 en la vaina. Se utilizan sólo si se desea generar la malla en el programa.
*PRESION EXT(bar)	Numérico	Presión exterior sobre la vaina en bar.
*PRESION INT(bar)	Numérico	Presión interior de la vaina en bar.
*TEMPER EXT(C)	Numérico	Temperatura sobre la vaina en Grados Centígrados.

*TENSION FLUENCIA ZY(MPa)	Numérico	Tensión de fluencia del Zircaloy en Mega Pascales.
*FRACCION DE DENSIDAD TEORICA DEL UO2	Numérico, decimal	Indica qué fracción de la densidad del óxido está ocupada por UO ₂ , quitando la porosidad.
*DENSIDAD TEORICA DEL UO2(TM UO2/M ³)	Numérico	Densidad del óxido en tonelada métrica de UO ₂ sobre metro cúbico
*TAMAÑO DE GRANO (metros)	Numérico	Radio promedio del grano de óxido en metros.
*CANTIDAD DE PASTILLAS DEL ELEMENTO	Numérico	Cantidad de pastillas que contiene el elemento combustible.
*N_TESTIGO UO2	Numérico	Un nodo testigo para la salida de datos en el UO ₂ .
*N_TESTIGO ZY	Numérico	Un nodo testigo para la salida de datos del Zircaloy
*GASES DE LLENADO	HELIO Fh XENON Fx KRIPTON Fk	Fracciones respectivas de los gases He, Xe y Kr en el gas de llenado del elemento. (Fh+Fx+Fk=1)

TABLA IV.1 *Datos de entrada del archivo de condiciones de contorno.*

El archivo que contiene la historia de potencia es el único que debe ingresarse obligatoriamente pues el programa no puede continuar sin una historia que calcular.

Un modelo de archivo de entrada con la historia de potencia se presenta en la tabla IV.2. El mismo es generado también por ENTRADA y posee ciertas condiciones de carácter rígido a cumplir. La historia de potencia se divide en pasos con rampas y períodos estacionarios intercalados. El tiempo de duración de cada período estacionario se ingresa en días.

PALABRAS CLAVE	COMENTARIOS
*PASO PINICIAL PFINAL TIEMPO(días)	Describe la forma en que deben ingresarse los datos. El número de pasos, la potencia inicial y la final y el tiempo que dura en días.
*PASOPOT N	N es la cantidad de pasos potencia en la que se ha dividido la historia.
1 0.0 230 1 2 230 230 2.6 . .	Número de paso; potencia inicial en W/cm; potencia final en W/cm, cantidad de días. En el caso de que se trate de una rampa, como es el caso 1, el número que se ingresa en la columna tiempo es 1

TABLA IV.2 Ejemplo de un archivo con la historia de potencia.

Una vez listos los archivos de entrada y antes de correr el programa será necesario dirigirse a la sección de funciones dentro ya del código FORTRAN para determinar los parámetros de cálculo de cada problema particular.

```

C*****
C*****FUNCTIONS SECTION*****
C      * * * * *
C      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *
C      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *
C      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *
C      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *
C      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *      *
C*****
C      POTENCIA LINEAL
      FUNCTION FUNQE(MAT,Q,RUO2)
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)

      AREA=3.14159*(RUO2**2)
      IF (MAT.EQ.1) FUNQE=Q/AREA
      IF (MAT.EQ.2) FUNQE=0.0
      IF (MAT.EQ.3) FUNQE=0.0
      IF (MAT.EQ.4) FUNQE=0.0
      RETURN
      END
C      COEFICIENTE DE CONDUCCION TERMICA EN LA DIRECCION r
      FUNCTION FUNDX(MAT,T,GMIX,CONGAP,GOPEN,GOPEN2)
      IMPLICIT REAL * 8 (A-H,O-Z)
    
```

Figura IV.2 Inicio de la sección de funciones de DIONISIO.

Como puede apreciarse en el fragmento de código transcripto, la sección de funciones

posee distinciones llamativas y se encuentra al final del programa para su mejor y más rápida ubicación. Las constantes determinadas por dichas funciones son las conductividades térmicas, coeficientes de dilatación, parámetros de creep y plasticidad, etc. Cada función contiene una diferenciación por material. El material 1 es el UO_2 , el 2 es el gas que ocupa el gap y el 3 representa a la vaina. Las constantes pueden cambiar dependiendo de que se decida estudiar un ejemplo con diferentes materiales, etc.

Se recomienda, en caso de querer cambiar dichos valores, no borrar los predeterminados, desactivándolos utilizando comentarios en la primera columna del editor FORTRAN.

IV.3 Proceso.

Una vez determinadas las constantes del problema y los correspondientes archivos de entrada, el código puede recompilarse y comenzar a correr.

La estructura del código es simplemente un gran *loop* sobre los pasos de potencia en los que se divide la historia de entrada y depende de la cantidad de rampas que posea. Las rampas son fragmentadas en porciones de igual magnitud y cuya cantidad depende de la pendiente que determina la diferencia en módulo entre dos pasos de potencia sucesivos. Con cada nuevo paso de potencia se debe recalcular la distribución térmica del dominio y los parámetros del problema que dependen de la temperatura.

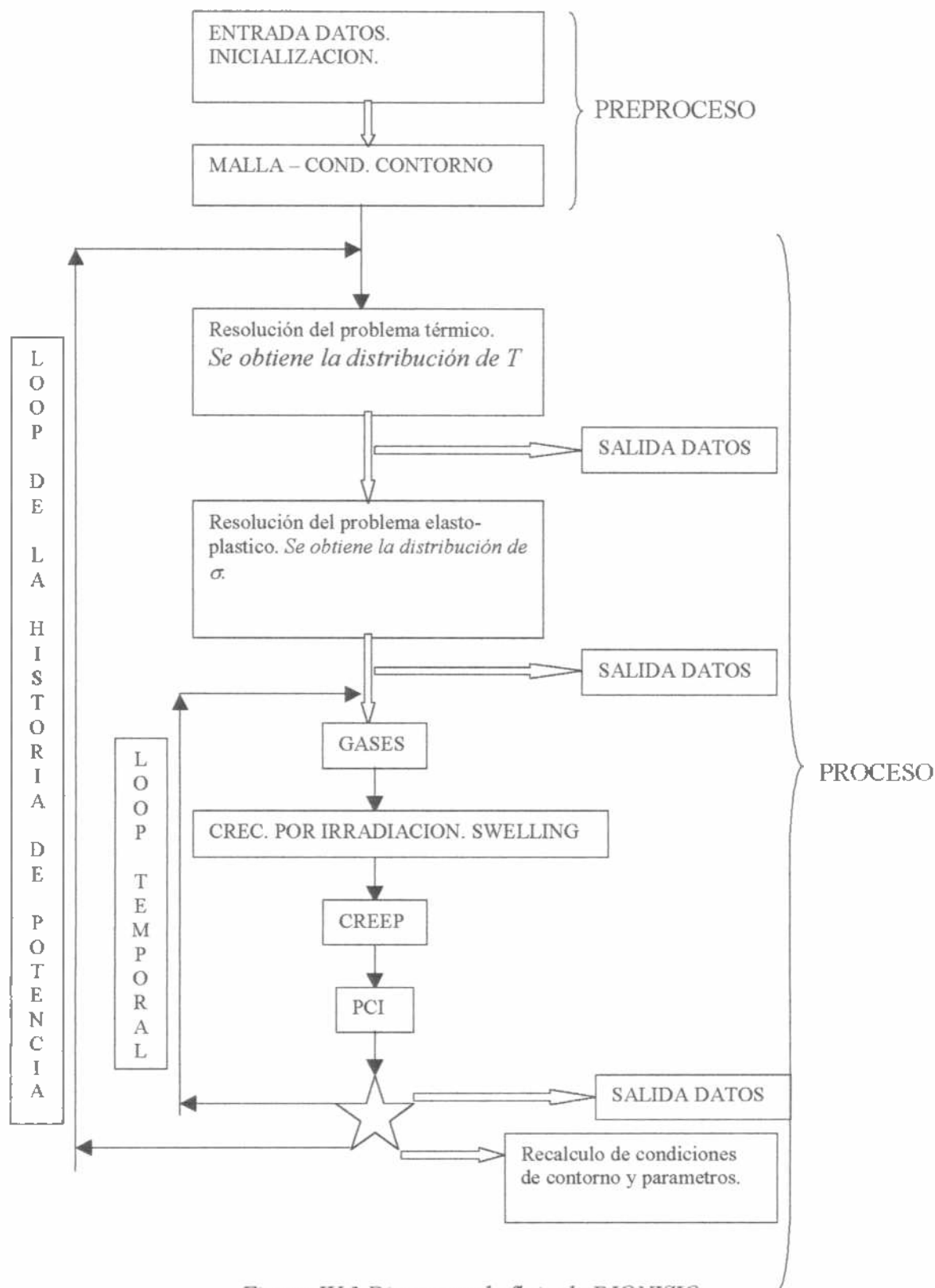


Figura IV.3 Diagrama de flujo de DIONISIO.

En el caso del cálculo de la temperatura, el problema es no lineal y la no-linealidad

está planteada por la dependencia de la conductividad térmica con la temperatura, que es el parámetro incógnita [22, 23]. De este modo nos hallamos con la ecuación algebraica de la matriz de rigidez

$$[K(T^{(r)})]\{T\}^{(r+1)} = \{f\}$$

donde $K(T^{(r)})$ es la matriz de rigidez que depende de la temperatura en el paso de tiempo r , mientras que la incógnita se obtendrá en el paso $r+1$. En el paso inicial de potencia, la temperatura inicial será $T^{(0)} = 25^\circ$. Posteriormente, en los pasos sucesivos la condición de tiempo inicial será:

$$T_n^{(Inicial)} = T_{n-1}^{(final)}$$

El criterio de error que determina el punto de convergencia estará dado por la comparación entre el resultado del cálculo con el resultado anterior y se expresa con la condición [22, 23]:

$$\frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{nodos}}} |T_i^{(r+1)} - T_i^{(r)}|^2}{\sum_{i=1}^{N_{\text{nodos}}} |T_i^{(r+1)}|^2} < \varepsilon \approx 10^{-3}$$

Con las temperaturas nodales determinadas se calculan las temperaturas de cada elemento del dominio como promedio de los valores en los tres nodos y así se pasa a resolver el problema elastoplástico que dará cuenta de la deformación instantánea generada por las variaciones térmicas y de los cambios en las condiciones de contorno. El sistema a resolver queda entonces conformado:

$$[K(U^{(r)})]\{U\}^{(r+1)} = \{f(U^{(r)})\} = \{f^{(CC)}\} + \{f^{(Th)}\} + \{f^{(P)}\}$$

donde K es la matriz de rigidez del sistema elastoplástico y U son los desplazamientos

a determinar. Los vectores fuerzas corresponden a las fuerzas dadas por la condiciones de contorno, las fuerzas de dilatación térmica y las fuerzas plásticas ya explicadas en el capítulo II. La no-linealidad de este problema viene dada por la dependencia de los desplazamientos con el vector tensión σ del sistema.[35, 38]

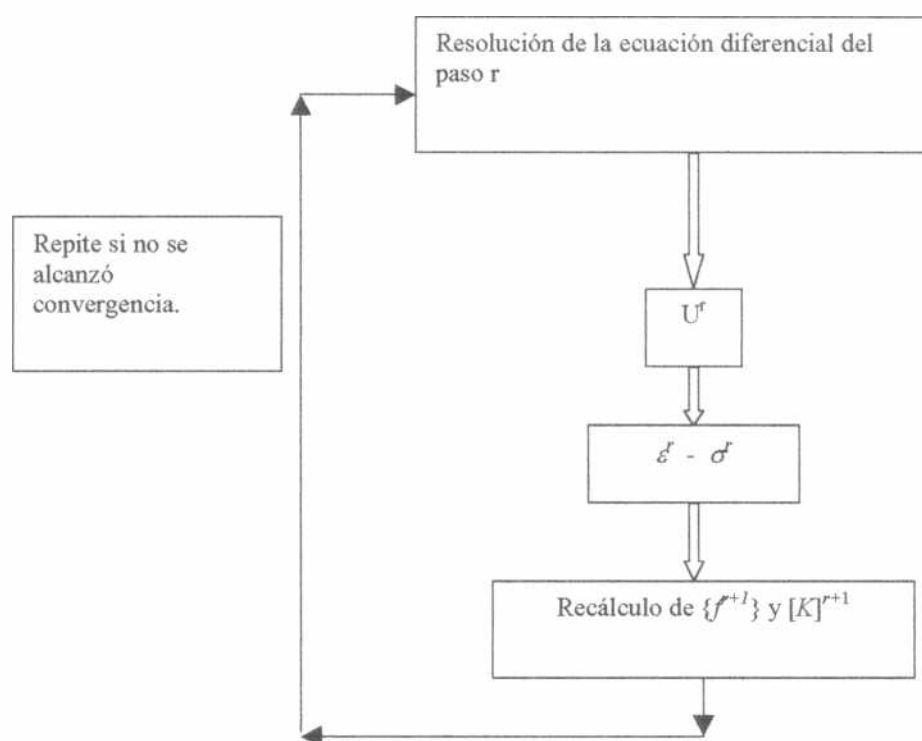


Figura IV.4 Diagrama de flujo del cálculo elastoplástico.

Terminado este último cálculo, comienza la resolución del problema temporal. Cada paso de potencia posee una duración asociada que se dividirá en sucesivos intervalos temporales de acuerdo a las variaciones que los mismos ocasionen en los parámetros del problema. Se abre así otro loop, el loop temporal en donde se calculan todos los fenómenos que dependen del tiempo. En primer lugar se resuelve el problema de gases y productos de fisión y se calcula el swelling relacionado a cada elemento del UO_2 . Una vez fuera de ese loop elemental, se ingresa en el problema temporal propiamente dicho en donde la ecuación matricial a resolver será

$$\left[K(U^{(r)}) \right] \{U\}^{(r+1)} = \{f^{(CC)}\} + \{f^{(C)}\} + \{f^{(Sw)}\} + \{f^{(Ig)}\}$$

La no-linealidad en este apartado es introducida por el problema de creep pues las leyes elegidas dependen de la distribución de tensiones del dominio [36,37]. Las fuerzas son las correspondientes a las condiciones de contorno, el creep, el swelling y el crecimiento por irradiación. A continuación se presenta un diagrama de flujo del problema descrito en forma muy simple que no expresan la situación real en su total complejidad. En primer lugar, al producirse la liberación de los gases de fisión, se modifica la conductividad térmica del gap y ello modifica la distribución de temperaturas en el dominio. En segundo lugar, la liberación de gases modifica, incrementándola, la presión del gas, cambiando las condiciones de contorno y los términos de fuerza correspondientes. En tercer lugar, tanto el swelling como el crecimiento por irradiación del Zircaloy involucran un cambio en las dimensiones de la vaina y de la pastilla, que derivan en un cierre o achicamiento del gap. De este modo podemos apreciar que en determinado momento del cálculo temporal, las condiciones modificadas pueden llegar a ser tales que sea necesario una reactualización de todo el proceso, por lo que se deberá regresar al principio del programa y obtener una nueva distribución de temperaturas.

La salida de los loops que muestra el diagrama se produce, como en el caso anterior, con la satisfacción de una norma determinada entre dos pasos sucesivos.

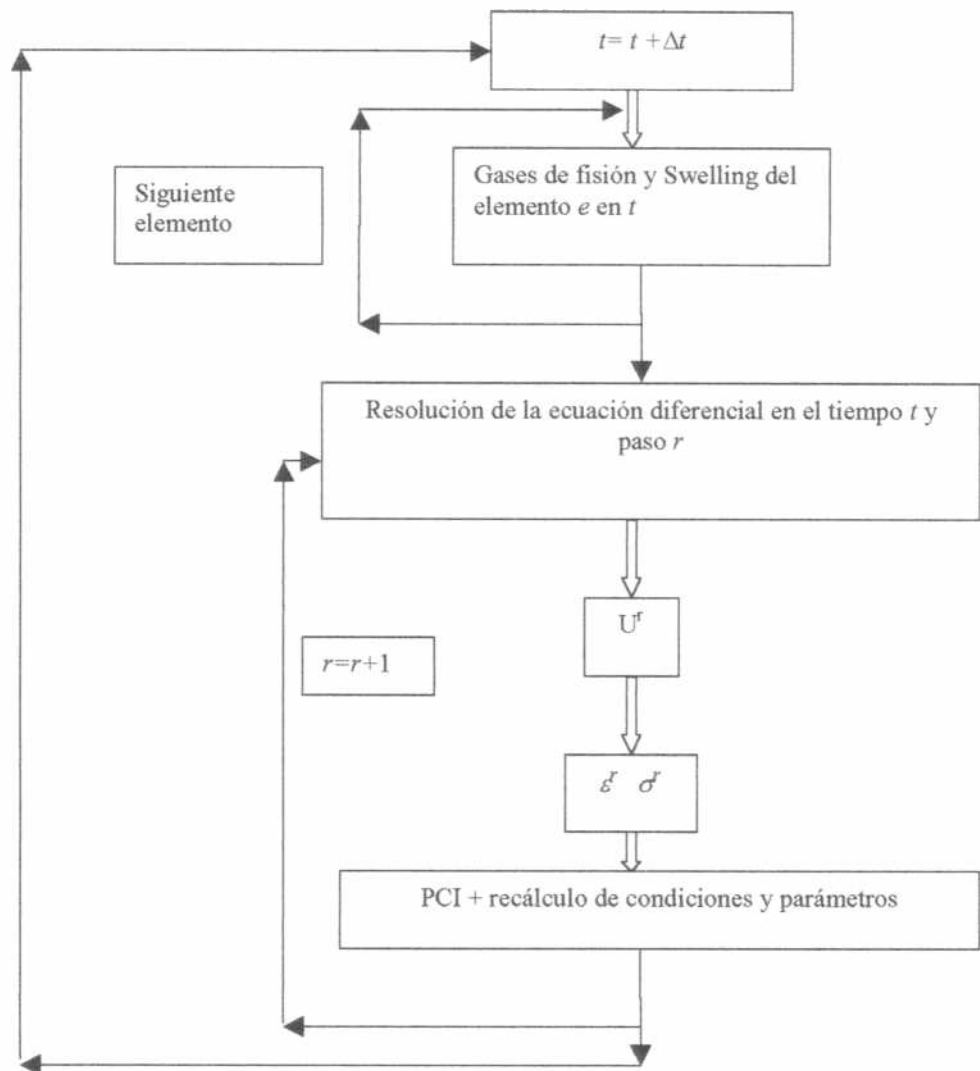


Figura IV.5 Diagrama de flujo del problema temporal.

IV.4 Post-Proceso.

El problema llega a su fin al terminar el último de los pasos de la historia de potencia. Se puede observar en el diagrama de flujo de la figura IV.3, la existencia de numerosos avisos que indican la salida de datos. La información seleccionada como relevante es acumulada en más de veinte archivos. Se presenta una tabla a continuación con una brevísima descripción del contenido de esos archivos para la manipulación directa del usuario experto.

Los mismos son utilizados por LUMIERE para graficar los datos obtenidos.

Archivo	Descripción
DIONISIO.FIN	Lista de archivos de salida para LUMIERE
DIONI.FEM	Malla de elementos finitos
DIONI.TXT	Datos utilizados por LUMIERE
TEPLAS.NDP	Historia plástica en el nodo u elemento elegido.
TECREEP.NDP	Historia de creep en el elemento elegido.
TESWELL.NDP	Historia del swelling en el elemento elegido
TESWTOT.NDP	Swelling total. Datos totales de swelling de la pastilla
TECRECI.NDP	Historia del crecimiento por irradiación de la vaina.
DIMGAP.NDP	Cambios en las dimensiones del gap.
DIMH.NDP	Cambios en las alturas de vaina y pastilla.
TEMIX.NDP	Mezcla de gases a lo largo de la historia.
ITEMPC.NDP	Temperatura central en la pastilla en función del quemado
IPRES.NDP	Presión del gas en función del quemado.
IGASLIB.NDP	Gases de fisión liberados en función del quemado.

ICONSTAN.NDP	Contiene la modificación de ciertos parámetros como Módulo de Young o conductividades en función de las variaciones del problema.
SALTER.NDP	Contiene la malla y la distribución térmica del dominio en diferentes tiempos. Son fotogramas del proceso de temperatura en función del tiempo.
SALELA.NDP	Idem el anterior pero con la distribución eleastoplástica.
SALHOOP.NDP	Idem los anteriores pero con la tensión en la dirección angular. “Hoop streess”
SALTOT.NDP	Idem los anteriores pero con todos los parámetros involucrados sumados.
DIOHOOP.NDP	Distribución de la tensión angular en los elementos del UO_2 .
DIONI.TXT; TERMODAT.DIO; STREDAT.DIO; PLASDAT.DIO; RESOLT.DIO; PROBLEMS.TXT; STRRAD2.DIO; TEMNOLIN.DIO; OTROSDAT.DIO.	Son archivos con datos que en general confirman el buen desarrollo del código y no presenta interés especial para el usuario.

TABLA IV.3 Archivos de salida de DIONISIO.

Algunos de los datos acumulados en estos archivos no tienen una utilidad inmediata o son redundantes. Por ejemplo, se guarda la distribución de tensiones angulares debido a su utilidad en el análisis de fractura tanto de la pastilla o la vaina. Se acumulan datos periódicamente que sólo permiten al programador verificar que las cosas están funcionando

correctamente. En cuanto a la distribución de tensiones y temperatura instantáneas a lo largo del tiempo (especie de fotografías obtenidas de las distribuciones térmicas, elásticas, etc.), tampoco se posee actualmente una herramienta que permita utilizar las posibilidades gráficas que esa historia tiene, pero se espera desarrollarla en un futuro no muy lejano.

V. LOS EXPERIMENTOS MOX Y LOS CASOS FUMEX.

V.1 Introducción

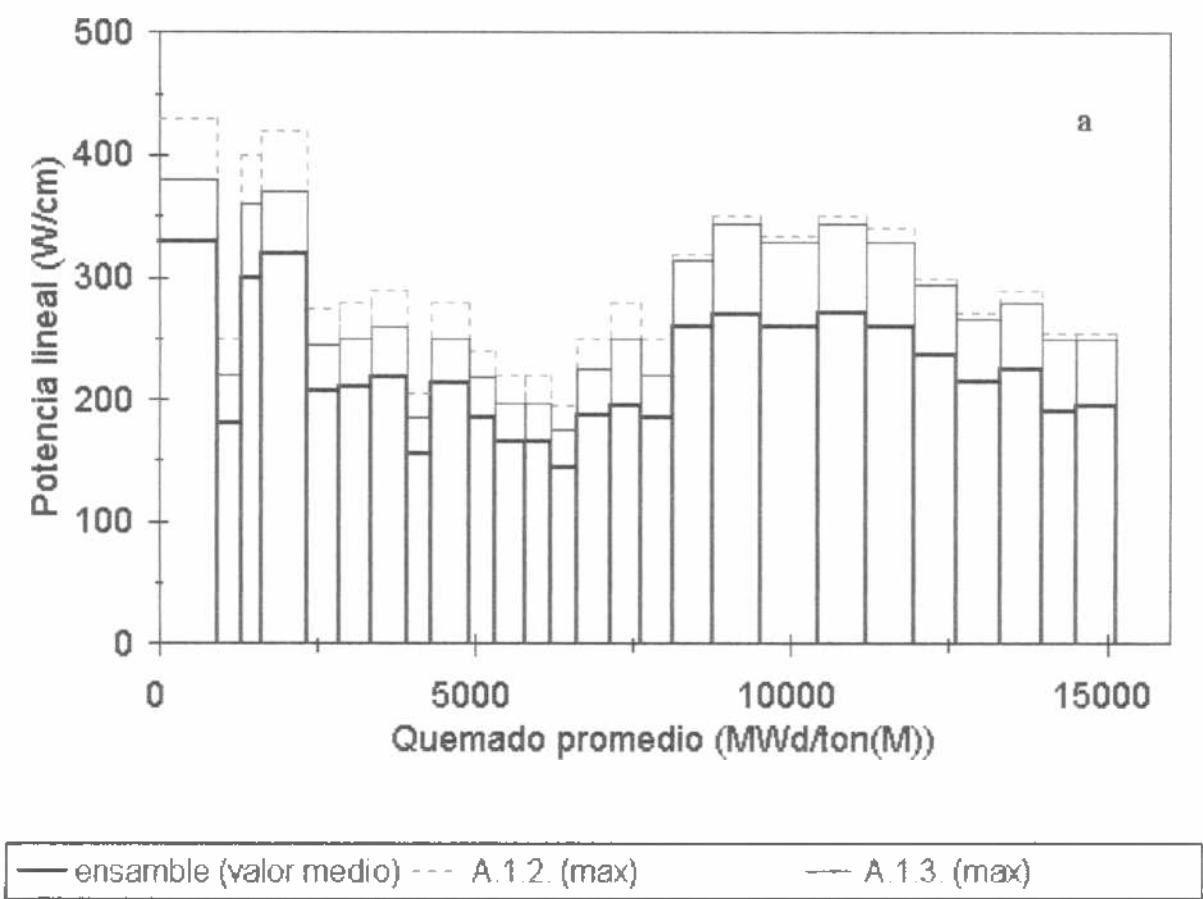
Para validar el código DIONISIO se debió comparar sus resultados con algunos experimentos particulares de irradiación en donde se hayan obtenido mediciones para los parámetros calculados por el código a lo largo de una historia de potencia registrada. No es sencillo reunir dichas características en forma simple. Cualquier experimento de este tipo es de tiempos y costos prohibitivos y, aunque importante, su desarrollo se hace a través de convenios y asociaciones entre países e instituciones que estén dispuestos a compartir los datos y los gastos involucrados.

Primeramente se abordó el análisis de un grupo de experimentos que involucraron la irradiación del primer prototipo argentino de elemento combustible de óxidos mixtos (MOX), realizada en el reactor de alto flujo (HFR) de Petten, Holanda. Con los mismos se buscó simular numéricamente la deformación que sufren los materiales del elemento combustible durante su quemado y compararlo con los resultados experimentales. En segundo lugar se analizó la respuesta del código a las historias de potencia de los diversos experimentos del ejercicio FUMEX (**F**uel **M**odelling at **E**Xtended Burnup) organizado por el Organismo Internacional de Energía Atómica y realizados entre 1993 y 1996 en el reactor ubicado en Halden, Noruega.

V.2 COMBUSTIBLES DE ÓXIDOS MIXTOS

Los primeros prototipos argentinos de elementos combustibles de óxidos mixtos (MOX) para reactores presurizados de agua pesada (PHWR) fueron construidos en la Facilidad- α de la CNEA. Entre enero de 1989 y octubre de 1991, dos de esas barras

(designadas A.1.2 y A.1.3) se irradiaron en el reactor de alto flujo (HFR) de Petten, Holanda. Posteriormente una de ellas (A.1.3) se sometió a una rampa de potencia; el experimento se interrumpió al observarse un aumento de actividad en el refrigerante, que revelaba una falla en la barra [26,27,40]. En la Figura V.1.a y V.1.b se muestran las historias de potencia de ambas barras. Los exámenes de postirradiación, realizados en 1993 en el KfK de Karlsruhe, Alemania, incluyeron inspecciones visuales, mediciones de corrientes de Eddy y dimensionales. Estas últimas se exhiben en la Figura V.3



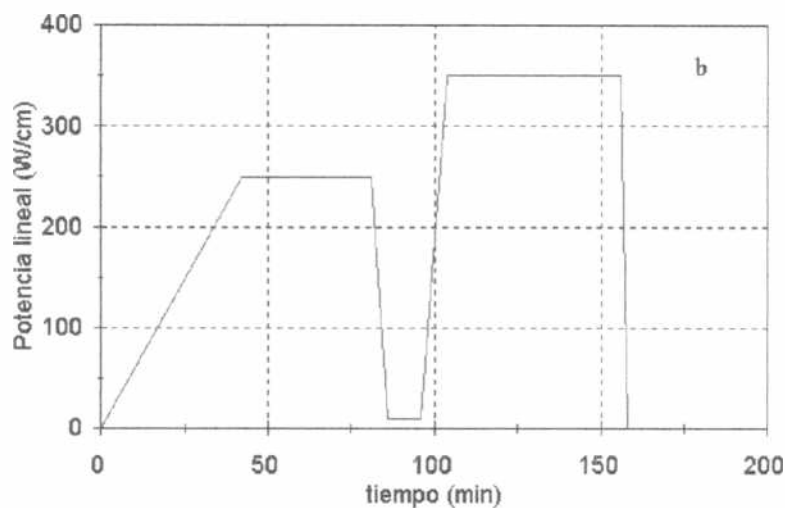


Figura V.1. Historia de potencia. a) Irradiación estacionaria de las barras A.1.2 y A.1.3. b) Rampa de potencia aplicada a la barra A.1.3

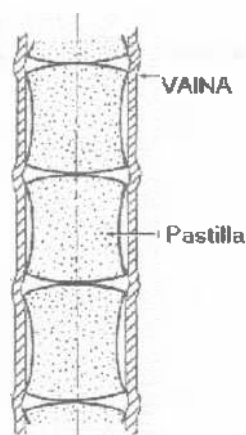


Figura V.2. Deformación diferencial de la vaina en la zona de contacto con las pastillas. "Efecto Bambú"

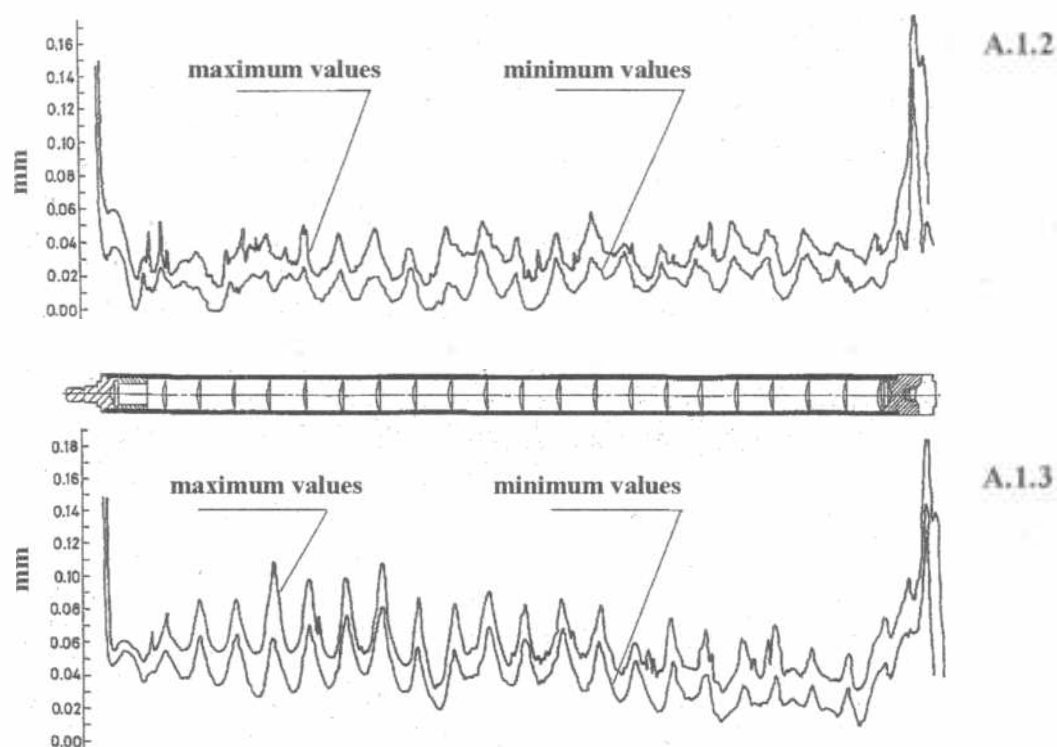


Figura V.3. Determinaciones experimentales del diámetro de las barras A.1.2 y A.1.3 después de irradiarlas.

Se observa que las barras sufrieron una deformación mayor en la región próxima a la superficie de contacto entre dos pastillas. Debido a las altas temperaturas que se desarrollan en las pastillas, especialmente en su eje, al elevado gradiente térmico en las mismas y a la ausencia de restricciones mecánicas en sus extremos, éstas se deforman más en sus extremos que en su sección central. La vaina se deforma en respuesta a esta interacción no uniforme con la pastilla y adquiere la forma de una caña, como se muestra en el esquema de la figura V.2, por lo que a esta distorsión se la denomina efecto bambú [17].

El problema implica la resolución de las ecuaciones de termoelastoplasticidad ya mencionadas en los capítulos precedentes. Es conveniente aclarar sin embargo que los cálculos aquí descriptos sólo incluyen un análisis detallado de los fenómenos termoelásticos involucrados en el problema y no se considera en estos cálculos la influencia de los

fenómenos relacionados con el problema de gases ni aquellos debidos a la plasticidad y al creep..

La dilatación térmica de la pastilla puede ponerla en contacto con la vaina, que en consecuencia se deforma. Para simular este problema se resuelven las ecuaciones acopladas térmica y elástica.

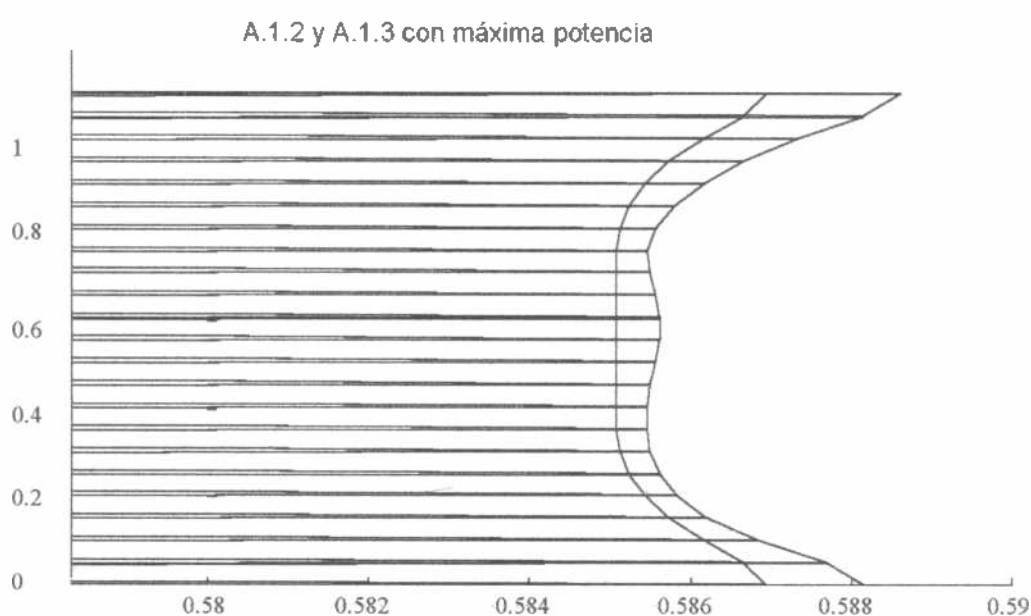


Figura V. 4. Detalle de la región externa de las dos barras irradiadas. Se observa la vaina de la (barra A.1.2 después de la irradiación estacionaria y la vaina de la barra A.1.3 después de la irradiación estacionaria seguida de la rampa de potencia. Se superpone la malla de elementos finitos.

El cálculo predice la forma curva de la pastilla y de la vaina después de la irradiación. Como ejemplo, en la Fig. V.4 se muestra un detalle de la región externa de las dos barras sometidas respectivamente a la irradiación estacionaria (barra A.1.2) y a una radiación estacionaria seguida de la rampa de potencia (barra A.1.3). Nótese la influencia de la rampa

al comparar los radios externos de las vainas de las dos barras ensayadas. Se observa que las crestas son más pronunciadas cuando se aplica la rampa.

En este cálculo reviste especial interés la simulación de la interacción vaina pastilla ya que es vital para la deformación externa. En la figura V.5 se representa la evolución de los radios de la pastilla e interno de la vaina. La aparente inmersión uno dentro de otro en diversos puntos indica que el cálculo considera que ambos materiales están en contacto. En esos casos el cálculo introduce una presión de contacto entre los cuerpos sólidos cuyo efecto es empujar a la vaina hacia afuera. Por este motivo, aunque sólo se considera en la simulación la existencia de deformaciones elásticas, la presencia de dicho desplazamiento de la vaina hacia el exterior puede considerarse como una deformación permanente.

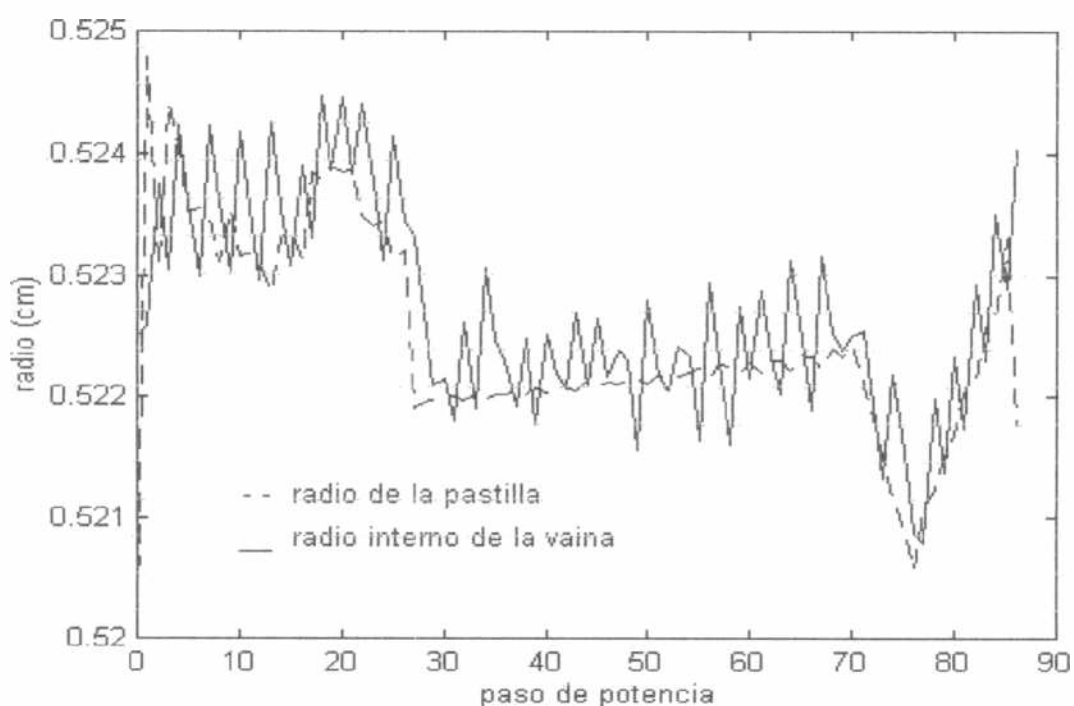


Figura V.5. Evolución de los radios de la pastilla e interno de la vaina durante la irradiación.

La TABLA V.1 expone la comparación entre los valores experimentales medidos sobre las vainas y los valores calculados por el código de la altura de las crestas. Se puede apreciar que dichos valores caen dentro del rango experimental. Es obvio que un análisis mecánico de la compleja situación que se produce en el problema de la interacción vaina pastilla no alcanza para describir en su totalidad la complejidad del problema real, situación que se corrobora con la diferencia entre la deformación medida en los experimentos y la simulación. Al agregarse las interacciones plásticas y el creep, el rango de los valores calculados aumento, ubicándose en la franja media de los experimentales.

	Valores experimentales	Valores calculados lineales	Valores calculados no lineales + "Creep"
irradiación estacionaria	18-30 μm	16-18 μm	23-27 μm
irradiación estacionaria + rampa de pot.	28-55 μm	29-33 μm	

TABLA V.1 *Valores experimentales y valores calculados en la deformación de las crestas en las vainas de Zircaloy.*

V.3 EXPERIMENTOS FUMEX.

El ejercicio FUMEX (**F**uel **M**odelling at **E**xtended Burnup) 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 [39]. 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 UO_2 . 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 mantiene constante en 20 kW/m hasta un quemado de 30 MWd/kg UO_2 para pasar a una potencia de 40 kW/m y mantenerla así hasta el final de la vida (EOL) a un quemado de 50 MWd/kg UO_2 . Se requiere la evaluación de los mismos parámetros que para SC1 comparando así el incremento en la temperatura y en 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 linealmente creciente desde 0 hasta 40 kW/m. La rampa es instantánea y no tiene en cuenta el paso temporal, por lo que se analiza la respuesta inmediata de cada código a las solicitudes de los parámetros involucrados. Con estos casos se busca comparar las predicciones para la temperatura central a diferentes potencias lineales. Como se ha explicado anteriormente, el gas de llenado del gap, debido a su baja conductividad térmica, es aislante; de este modo el espesor del gap juega un papel determinante en la distribución de temperaturas de la pastilla. Los casos SC3-SC7 permiten 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 las tablas V.2 [39]. 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.

Caso Simplificado 1 (SC1)

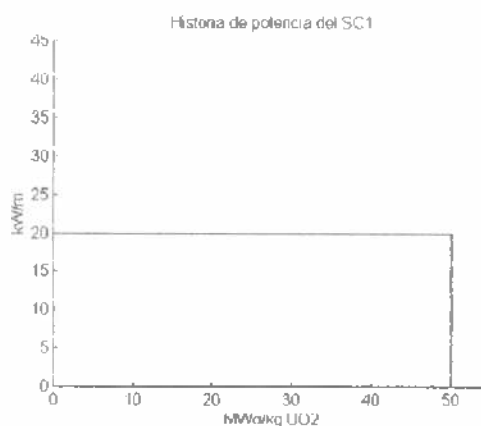
Radio de la pastilla: 0.5335 cm

Altura de la pastilla: 0.5 cm

Espesor de la vaina: 0.094 cm

Espesor del gap: 115 μm

Gas de llenado: He



Caso Simplificado 2 (SC2)

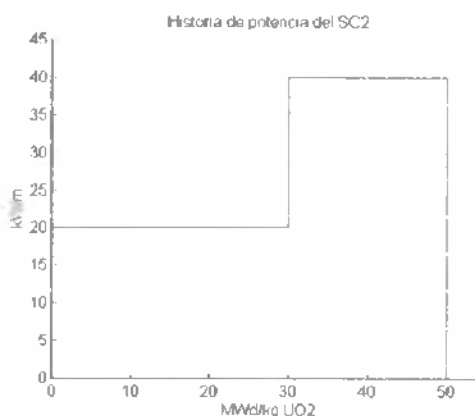
Radio de la pastilla: 0.5335 cm

Altura de la pastilla: 0.5 cm

Espesor de la vaina: 0.094 cm

Espesor del gap: 115 μm

Gas de llenado: He



Caso Simplificado 3-8 (SC3-SC8)

Radios de las pastillas: 0.5425, 0.54,
0.5375, 0.535, 0.5335, 0.54 cm
Alturas de las pastillas: 0.5 cm
Espesor de la vaina 0.094 cm
Espesores del gap: 25, 50, 75, 100,
115, 50 μm
Gas de llenado: SC3 / SC4 / SC5 /
SC6 / SC7: He
Gas de llenado SC8: Xe

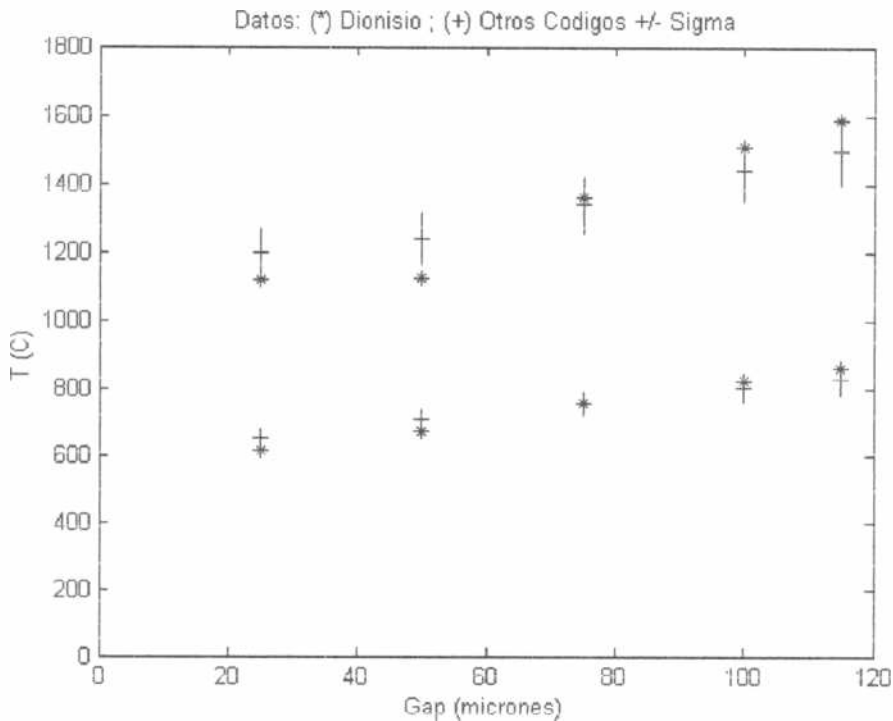
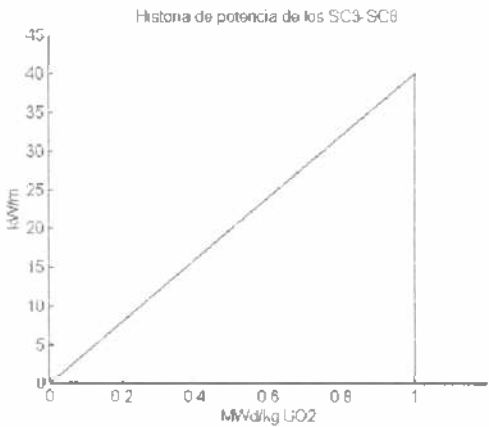


Figura V.6 Temperatura central en función del ancho del gap. Se comparan los datos proporcionados por otros códigos con el predicho por DIONISIO.

			Otros Códigos			Este Código
			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
	Rel. Umbral%		0—41	24.7	11.0	18.85
SC2	Presión, bar	A BOL	8.7—11.5	10.0	0.7	11.01
		Mínimo	8.7—11	9.7	0.6	10.64
		a EOL	11.2—35	17.23	6.85	20.93
	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	t 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

TABLA V.2 Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de Dionisio para los casos simplificados del experimento FUMEX

La utilidad principal de los casos simplificados es comparar las respuestas de los códigos en casos sumamente simples para en un principio, saber que todos parten desde condiciones similares; para lo cual se eligen parámetros destacados del problema real por ser muy representativos en una simulación.

En la Figura V.6 se ha graficado la variación de la temperatura central con el ancho en micrones del gap comparando los resultados obtenidos con otros códigos y con DIONISIO. Las comparaciones de DIONISIO se ajustan a las predicciones de la media de los códigos intervinientes en la simulación. La TABLA V.2 es un sumario de los resultados comparados de todos los parámetros medidos en los casos simplificados.

Posteriormente se procedió a la reproducción de los casos FUMEX propiamente dichos. Son en total 10 experimentos que representan un número similar de barras de elementos combustibles introducidos en el reactor y monitoreadas durante el tiempo que involucró cada historia de potencia respectiva. En cada caso variaban las condiciones geométricas y químicas de los casos y se buscaba reproducir ciertas condiciones específicas de operación. La tabla V.3 presenta los detalles de cada caso así como también un gráfico de cada dominio de interés discretizado como el utilizado en DIONISIO a escala común para evidenciar las diferencias geométricas entre ellas. La tabla V.4 es el sumario de resultados de los casos FUMEX, los provistos por otros códigos y por DIONISIO también.

Como ya se ha explicado en el apartado anterior dedicado a los casos simplificados, 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. Durante el quemado del combustible se libera xenón; en algunos de los casos FUMEX se introdujo ese gas 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. Dicho aumento de temperatura genera una mayor dilatación térmica de la pastilla y una disminución del ancho del gap produciendo en muchos casos el cierre del mismo, lo que produce el contacto pastilla vaina. Este fenómeno de gap cerrado trae como consecuencia una disminución de la temperatura pues la conductividad de contacto es menos aislante que la del gas. 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.

Resulta claro que estos fenómenos están interconectados de manera compleja. El diseño de los experimentos FUMEX tuvo por objeto examinar la habilidad de los códigos para reproducir los parámetros de interés de un combustible con diferentes características geométricas y físicas sometidos a historias de potencia variadas.

FUMEX 1

Radio de la pastilla: 0.4045 cm

Longitud de la pastilla: 1.0 cm

Geometría: Dishing esférico de radio: 0.34045 cm.

Espesor de la vaina: 0.065 cm

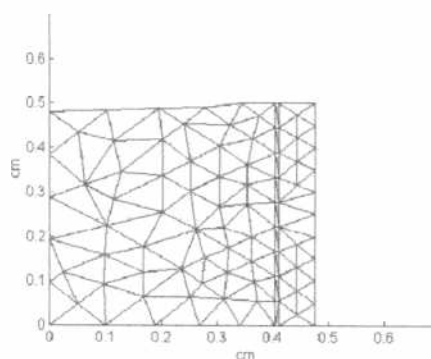
Espesor del gap: 65 μm

Gas de llenado: He

Presión interna: 10 bar

Tamaño de grano: 5 μm

Número de pastillas: 81



FUMEX 2

Radio de la pastilla: 0.296 cm

Longitud de la pastilla: 0.75 cm

Geometría: extremos planos.

Espesor de la vaina: 0.05 cm

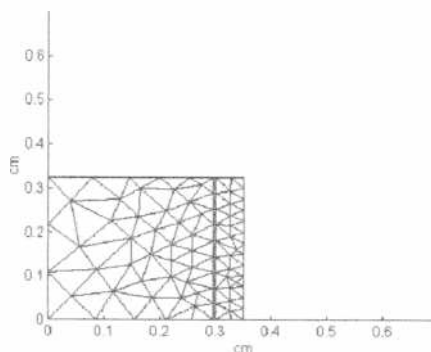
Espesor de gap: 50 μm

Gas de llenado: He

Presión interna: 10 bar

Tamaño de grano: 5 μm

Número de pastillas: 51



FUMEX 3 barra 1, barra 2

Radio de la pastilla: 0.535 cm

Longitud de la pastilla: 1.27 cm

Geometría: Dishing plano en un solo extremo.

Espesor de la vaina: 0.085 cm

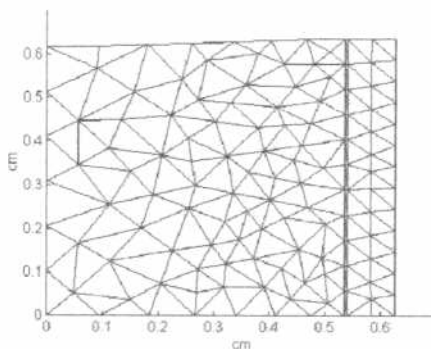
Espesor del gap: 50 μm

Gas de llenado barra 1 He, barra2 Xe

Presión interna: 1 bar

Tamaño de grano: 10 μm

Número de pastillas: 13



FUMEX 3 barra 3

Radio de la pastilla: 0.5375 cm

Longitud de la pastilla: 1.27 cm

Geometría: Disshig plano en un solo extremo.

Espesor de la vaina: 0.085 cm

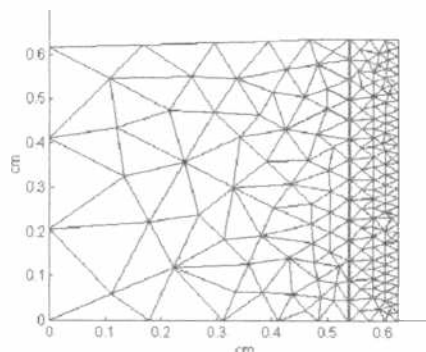
Espesor del gap: 25 μm

Gas de llenado: Xe

Presión interna: 1 bar

Tamaño de grano: 1.7 μm

Número de pastillas: 11



FUMEX 4 A, 4 B

Radio de la pastilla: 0.534 cm

Longitud de la pastilla: 1.27 cm

Geometría: Extremos planos

Espesor de la vaina: 0.094 cm

Espesor del gap: 110 μm

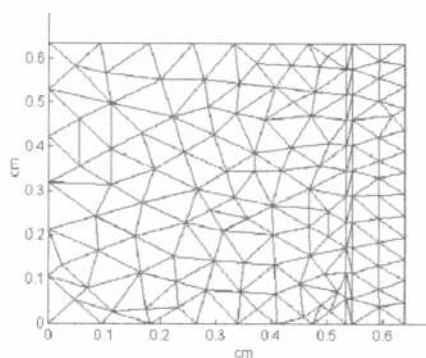
Gases de llenado: A: He,

B: 92%He 8%Xe

Presión interna A: 3 bar, B: 1 bar

Tamaño de grano: 6 μm

Número de pastillas: 61



FUMEX 5

Radio de la pastilla: 0.53 cm

Longitud de la pastilla: 1.08 cm

Geometría: Extremos planos

Espesor de la vaina: 0.0865 cm

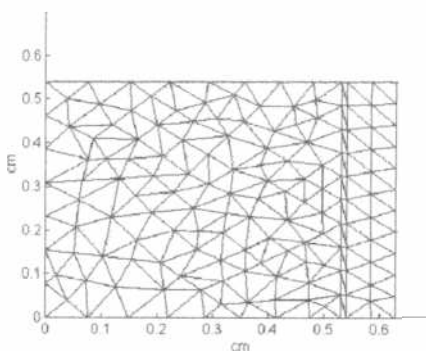
Espesor del gap: 105 μm

Gas de llenado: He

Presión interna: 1 bar

Tamaño de grano: 7.45 μm

Número de pastillas: 42



FUMEX 6s, 6f

Radio de la pastilla: 0.527 cm

Longitud de la pastilla: 1.04 cm

Geometría: Extremos planos

Espesor de la vaina: 0.086 cm

Espesor del gap: 130 μm

Gas de llenado: He

Presión interna: 1 bar

Tamaño de grano: 8 μm

Numero de pastillas: 44

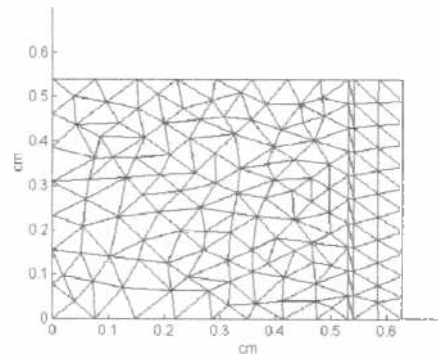


TABLA V.3 *Características geométricas y dominio discretizado de los casos FUMEX.*

		Datos exper.	Otros Códigos	Este código
FUMEX 1	Temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 15kW/m, °C	705	530–760	592.3
	Temp. cent a 20MWd/kgUO ₂ , 15kW/m, °C	740	508–800	621.0
	FGR a EOL, %	1.8	0.05–2.18	1.56
FUMEX 2	Temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 40kW/m, °C		1210–1820	1568.2
	Temp. cent a EOL		480–850	617.4
	FGR a EOL, %	3	1.2–8.5	2.04
	Presión interna a potencia y EOL, bar	20.3	20.1–46	20.1
FUMEX 3	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , °C	960	775–1134	856.5
Barra 1	temp. cent antes rampa, °C	1240	755–1405	960.6
	temp. cent al tope de la rampa, °C	1870	1606–2435	1815.0
	FGR antes rampa, °C		0–40.5	19.5
	FGR al tope de la rampa, °C		11.1–69.9	38.2
FUMEX 3	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 25kW/m, °C	1345	930–1501	1053.1
Barra 2	temp. cent antes rampa de potencia, °C	1040	865–1365	1253.2
	temp. cent al tope de la rampa, °C	1470	1327–2136	1633.0
	FGR antes rampa de potencia, %		0.6–44	4.61
	FGR después rampa de potencia, %		5.6–50.5	5.21
FUMEX 3	Temp. Cent a 5MWd/kgUO ₂ , 25kW/m, °C	1080	850–1430	975.8
Barra 3	Temp. Cent. antes rampa de potencia, °C	940	865–1400	831.6
	Temp. al tope de la rampa, °C	1615	1351–2254	1330.9
	FGR antes rampa de potencia, %		0.3–55.5	2.33
	FGR después rampa de potencia, %		7.1–61.5	3.64
FUMEX 4	temp. cent a 5MWd/kgUO ₂ , 30 kW/m, °C	1020	876–1398	1137.3
Barra A	temp. cent. al tope de la rampa, °C	1125	792–1533	1331.2
	temp. cent a EOL, °C	1225	1035–2246	1229.7
	FRG antes rampa de potencia, %		0.3–10.6	2.49
	FGR después rampa de potencia, %		0.7–28.4	5.53
	FGR a EOL, %		15.4–53.8	37.7
	Presión después rampa, bar	21	4.8–45	8.17

FUMEX 4	Temp. Cent a 5MWd/kgUO ₂ , 30 kW/m, °C	1065	953–1522	1416.0
Barra B	Temp. Cent. al tope de la rampa, °C	1260	1200–1593	1331.8
	Temp. Cent. a EOL, °C	1290	1213–2203	2066.3
	FRG antes rampa de potencia, %		1.2–24.6	6.77
	FGR después rampa de potencia, %		2.7–38.9	15.92
	FGR a EOL, %		27.5–54.6	25.06
	Presión después de la rampa, bar	23.9	3–45.3	24.46
FUMEX 5	FGR antes de la rampa, %	0	0–43.1	0
	FGR a EOL, %	5.8	1–46.8	29.55
	presión al inicio, bar	2.3	2.7–66.6	1.95
	presión a EOL, bar	9.4	3.9–82.6	26.88
FUMEX 6	FGR al final de la irradiación base, %	16.4	0.9–20.2	5.34
	presión al final de la irradiación base, bar		2–25.4	5.21
FUMEX	FGR a EOL, %	45	8.9–38.2	14.11
6F	presión a EOL, bar	84.6	40.4–102	13.81
FUMEX	FGR a EOL, %	50	14–50.4	27.02
6S	presión a EOL, bar	92.3	40.4–106.7	24.55

TABLA V.4 Resultados experimentales, predicciones de otros códigos y predicciones de DIONISIO para los experimentos FUMEX.

Para reproducir el conjunto de experimentos FUMEX con DIONISIO se tomaron como datos de entrada las historias de potencia de los diversos experimentos. Dichas historias no son utilizadas en forma cruda como son suministradas por el reactor, sino que se procede a hacer una serie de simplificaciones para reducir la cantidad de pasos (y de esta manera el tiempo de cómputo) y reemplazar dichos valores por potencias medias; con este procedimiento cada historia de potencia queda reducida a un número de pasos que va de 100 a 250, dependiendo de la complejidad de la misma. En la figura V.7 se muestra un ejemplo de dicha historia simplificada para el caso FUMEX1 junto a la historia real. A continuación se

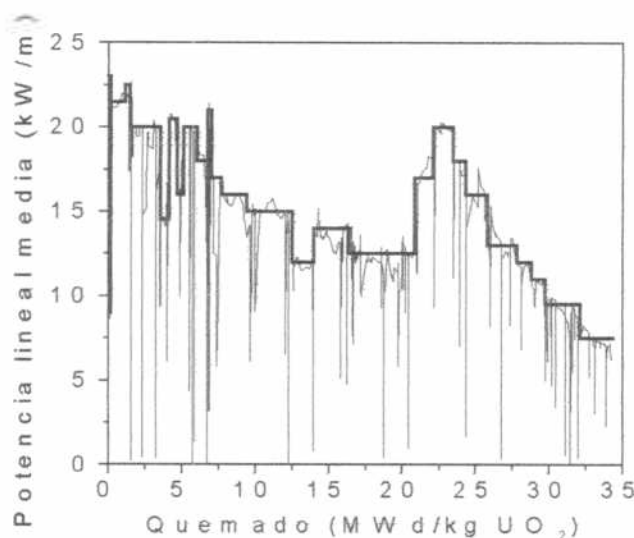


Figura V.7 Historia de potencia real junto a la simplificada utilizada como dato de entrada de DIONISIO.

presentan las figuras V.8-V.17 en donde se grafican por un lado, la historia de potencia lineal promediada en función del quemado del UO₂ para cada caso (Gráficos pequeños sobre los principales), dato de entrada de DIONISIO; por otro lado en un mismo gráfico, '(a)' la temperatura central de la pastilla y '(b)' los gases de fisión liberados en función del quemado del UO₂. Se puede observar que existe una correspondencia funcional entre la respuesta de la temperatura central de la pastilla y la potencia. Así mismo, en los gráficos V.8 a V.14, se presenta el resultado experimental de la temperatura central de la pastilla correspondiente y la franja de resultados de los demás códigos participantes. Del mismo modo, en los gráficos V.15 a V.17, se presentan los resultados experimentales y de otros códigos para el porcentaje de gases de fisión liberados.

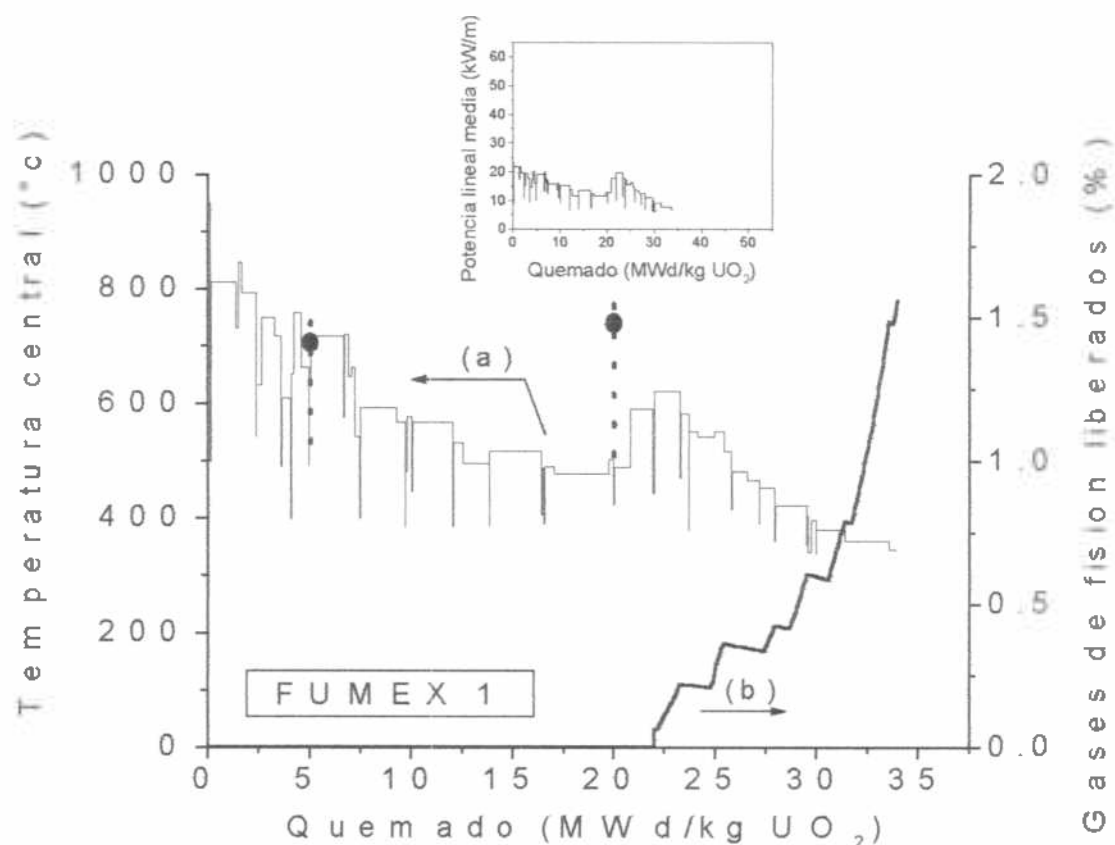


Figure V.8. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 1. Historia de potencia lineal simplificada.

El experimento FUMEX 1 representa la irradiación de un combustible tipo de un reactor PWR (Pressurized Water Reactor) en condiciones de potencia sin exigencias ni rampas pronunciadas. Las temperaturas permanecen bajas y se han medido la temperatura central y los gases de fisión liberados. La temperatura central es medida al cabo de quemados de 5 y 20 MWd/kgUO₂ cuando la potencia era de 15 kW/m en ambos casos. En ambos casos se observa (tabla V.3) 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 la mayoría de los códigos son incorrectas. Debido a las condiciones de irradiación y las temperaturas moderadas, los gases de fisión se encuentran apenas por encima del umbral de saturación de borde de grano, resultando la región del 1-3% de liberación la más difícil de simular, pues un pequeño cambio en las condiciones de

irradiación y temperatura producen cambios significativos en la liberación. DIONISIO simula bastante bien el caso 1.

En el caso del FUMEX 2 es sometido a potencias lineales mas altas generando un quemado mas rápido para estudiar ciertos parámetros como la liberación de gases en condiciones de alto quemado. En cuanto a la temperatura central, dado que no se realizan 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. Durante la mayor parte de la irradiación se encuentra el mismo problema que en el caso FUMEX 1, es decir con baja liberación de gases en el rango 1-3%; sin embargo las predicciones de todos los códigos fueron aceptables. En este caso experimento también se mide la presión interna durante la irradiación. Se espera que la misma aumente por el incremento de gas liberado al volumen libre y por el aumento de la temperatura en la barra.

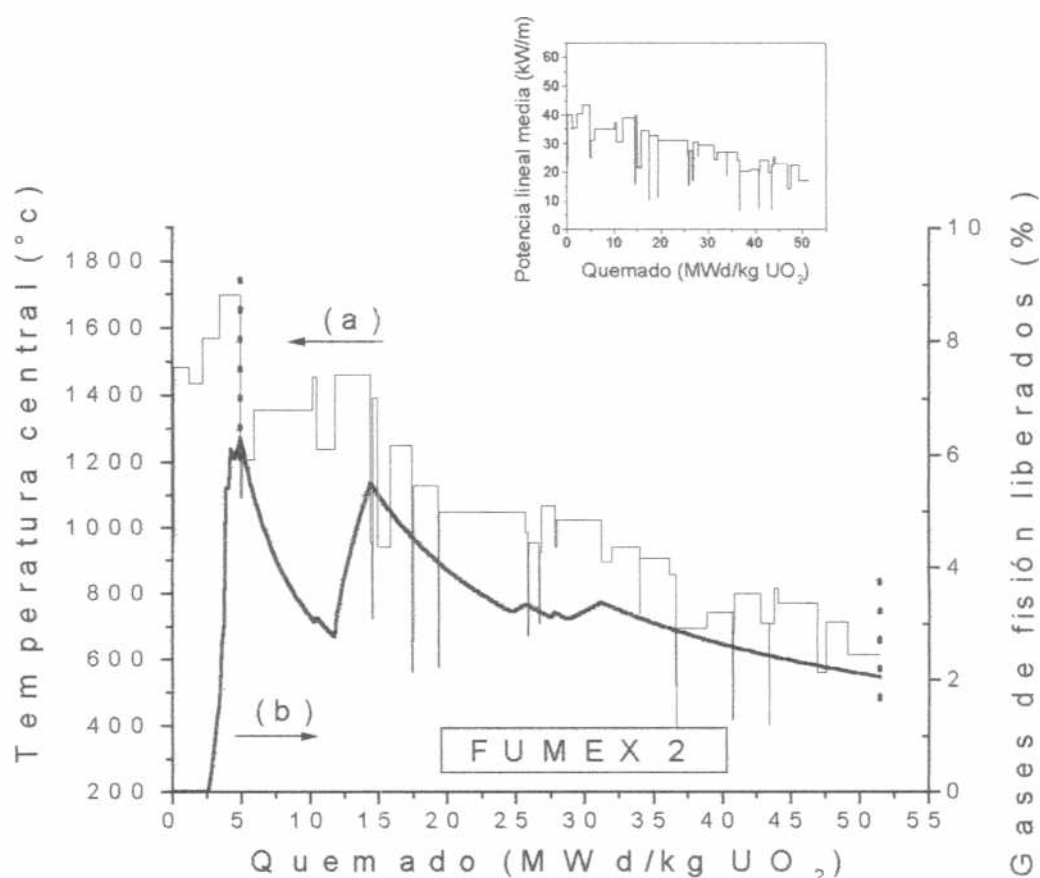


Figure V.9. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 2. Historia de potencia lineal simplificada.

El experimento FUMEX 3 considera tres barras que se irradian 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 simulan 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

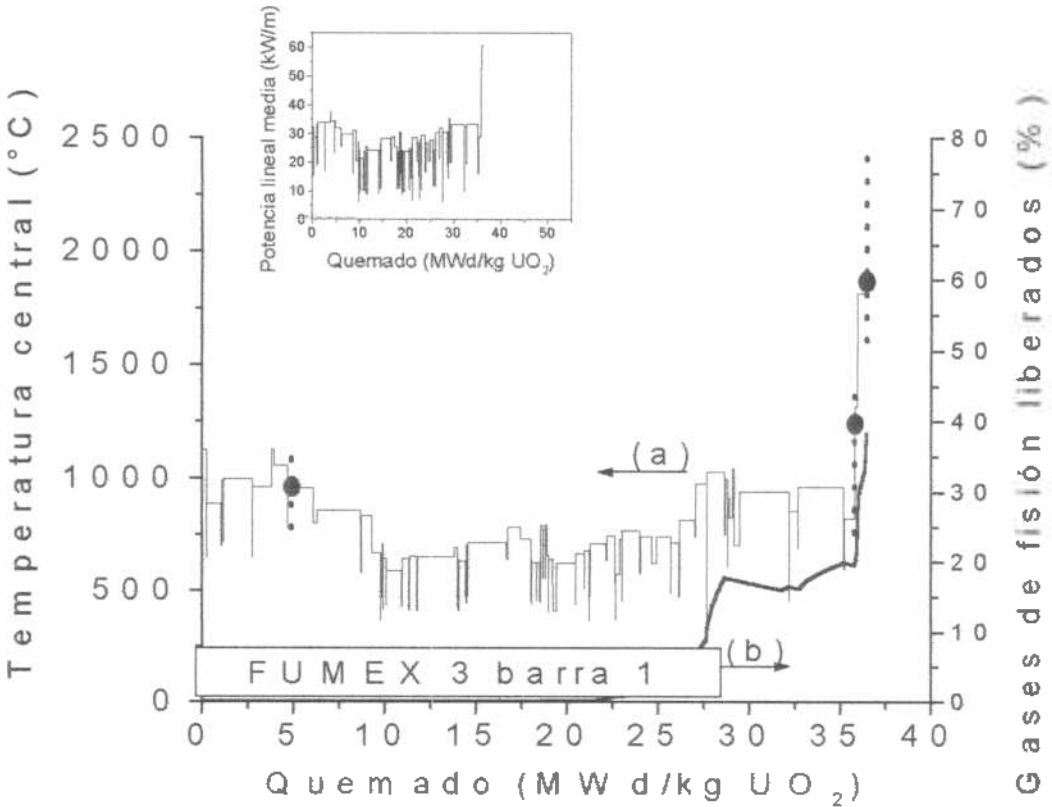


Figure V.10. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 3 barra1. Historia de potencia lineal simplificada.

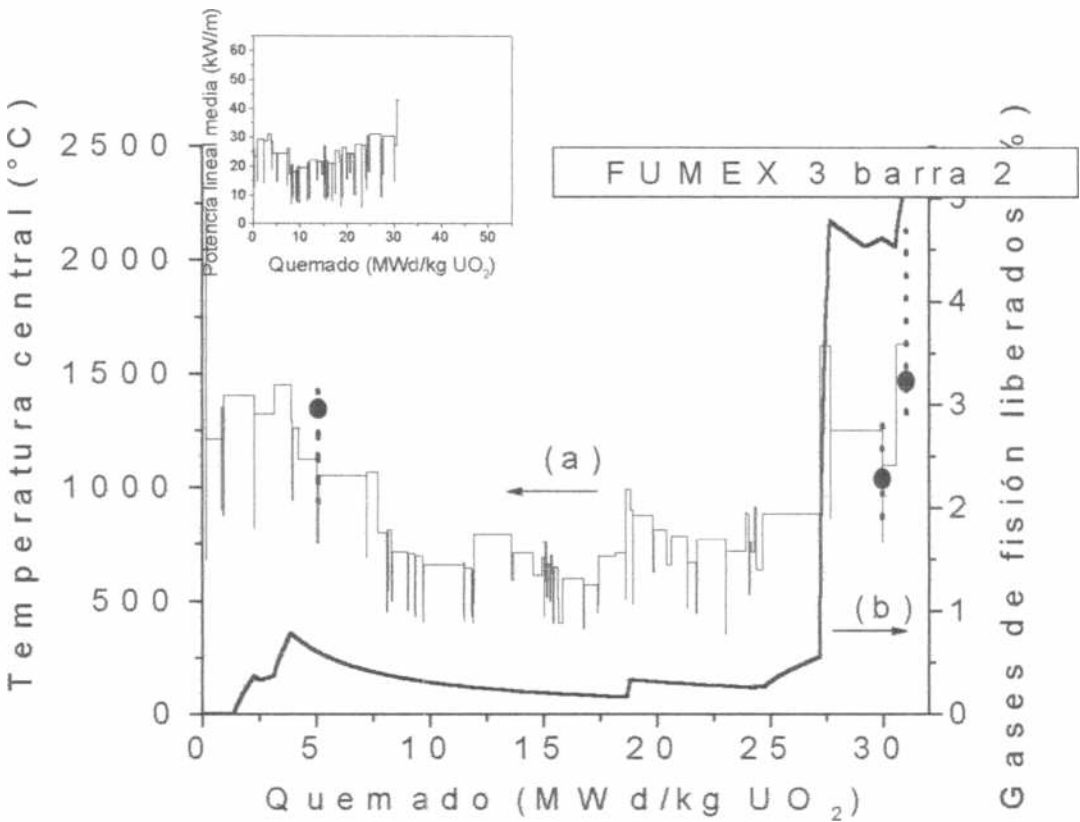


Figure V.11.Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 3 barra2. Historia de potencia lineal simplificada.

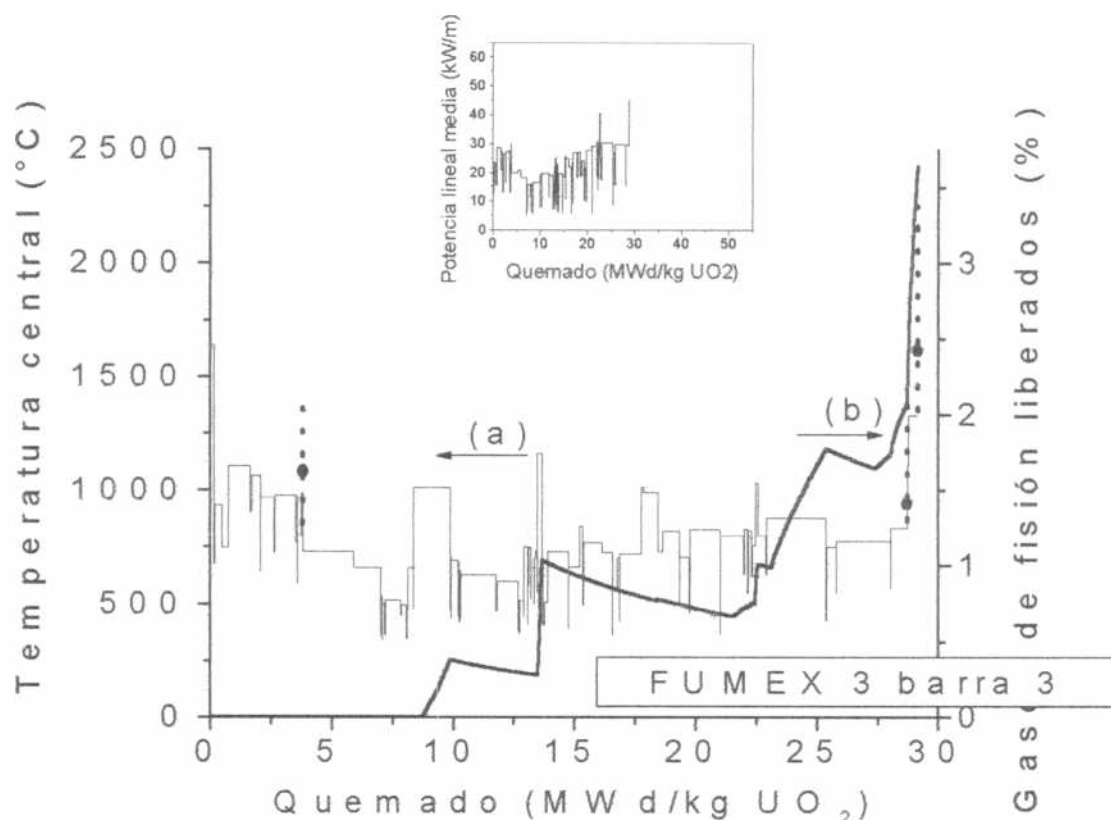


Figure V.12. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 3 barra 3. Historia de potencia lineal simplificada.

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. De este modo la degradación de la conductividad de la pastilla es superada por el efecto contrario del aumento de la conductividad el gap que da como resultado una distribución de temperatura menor en la pastilla y menor la cantidad de gases liberados. En el caso de DINISIO la predicción de la temperatura central es buena en el caso en que el gas de llenado es helio y presenta irregularidades en los casos en que es xenón.

El caso FUMEX4 es una comparación entre las respuestas de una barra con helio y otra con una mezcla inicial de helio y xenón a dieferntes presiones iniciales. La respuesta de DIONISIO para el caso A es adecuada mientras que, en el caso B, se encuentran ciertas

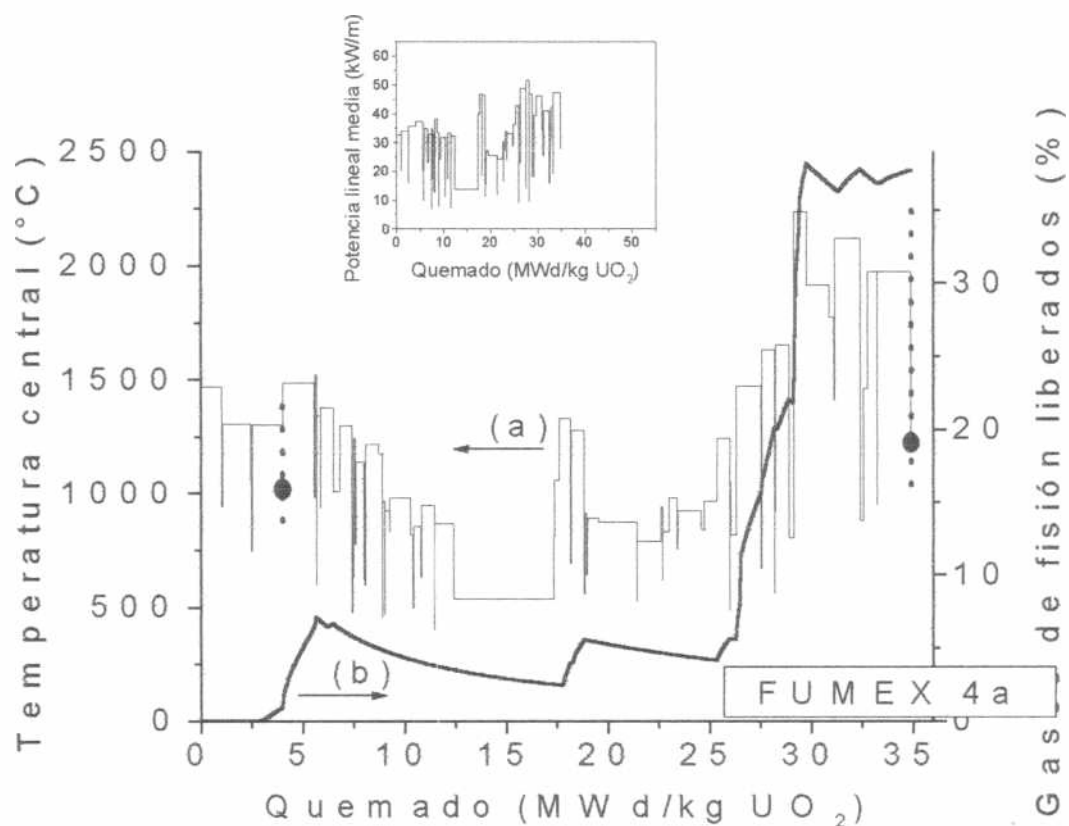


Figure V.13. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 4 barra A. Historia de potencia lineal simplificada.

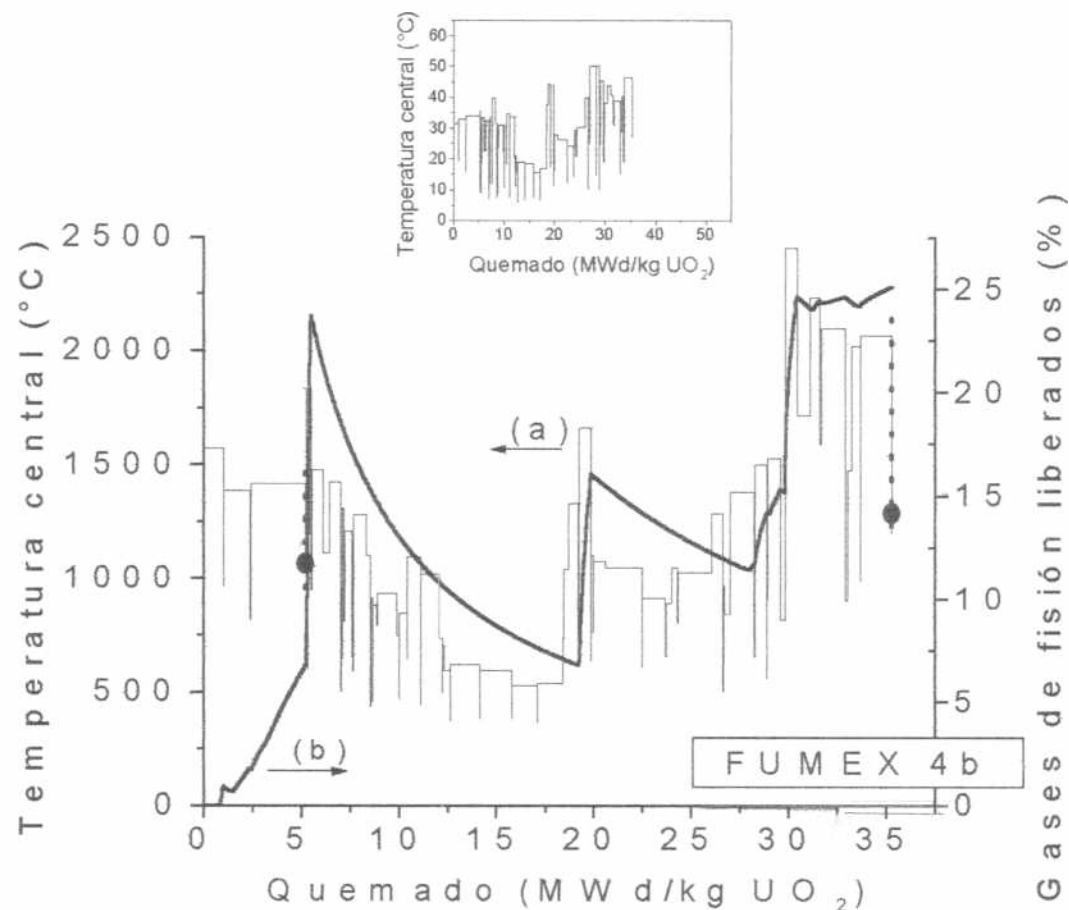


Figure V.14.Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 4 barra B. Historia de potencia lineal simplificada.

divergencias con los resultados experimentales por las mismas razones expresadas en el caso 3. 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 del caso FUMEX 5 fue medir la liberación de gases de fisión debido a una rampa de potencia pronunciada. La irradiación base es de baja potencia por lo que durante ese período existe muy poca liberación, hasta que al suceder la rampa al final de la vida, se observa el fuerte incremento de la liberación de gases que conlleva el correspondiente incremento en la presión interna.

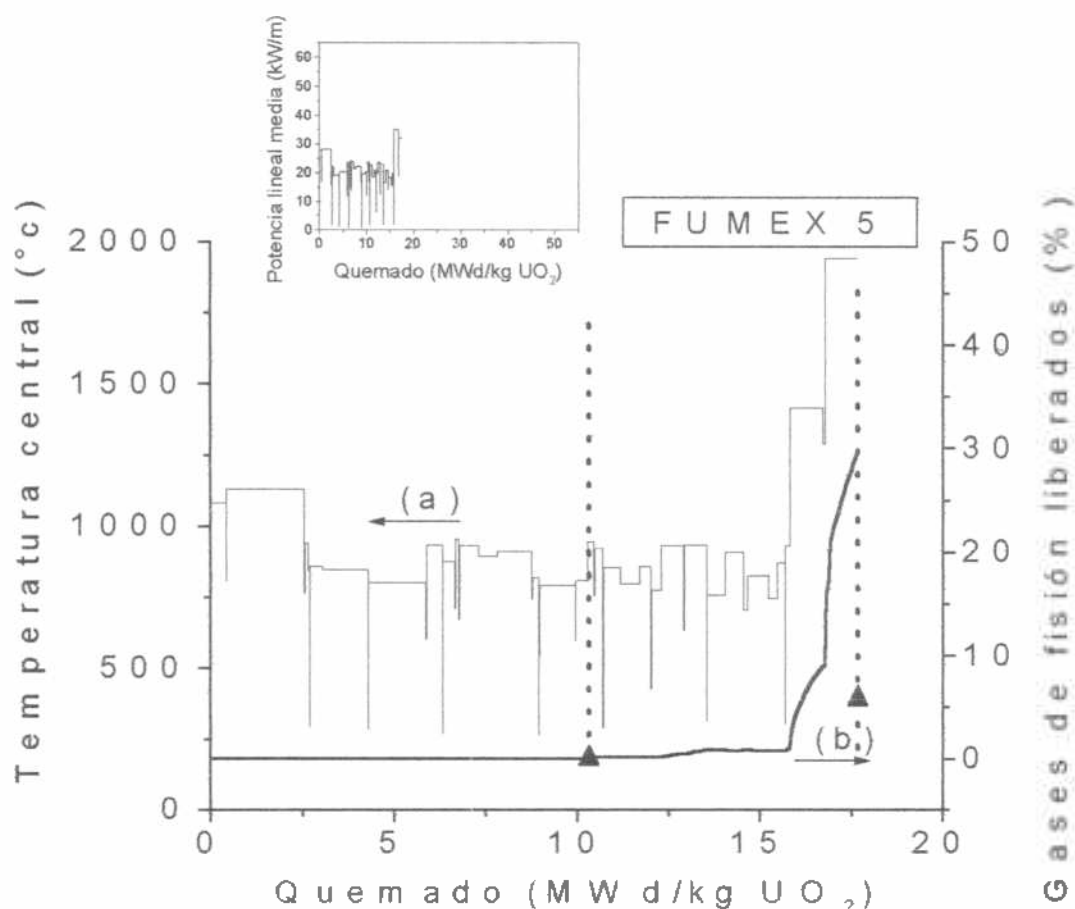


Figure V.15. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 5. Historia de potencia lineal simplificada.

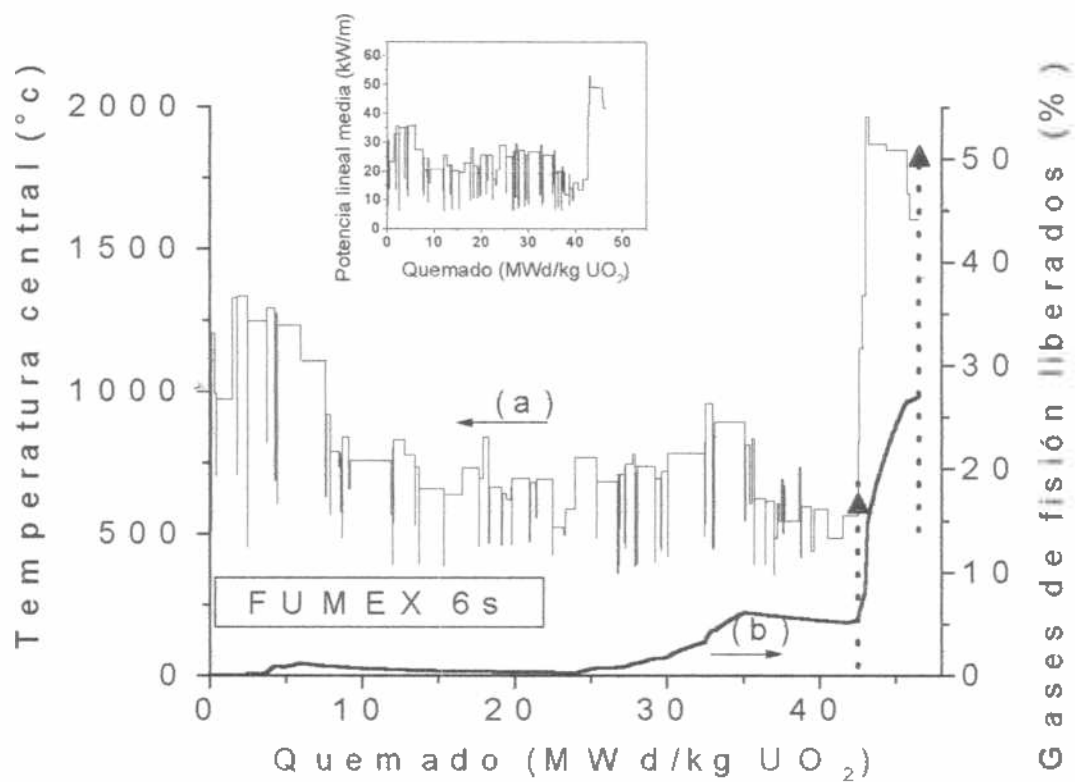


Figure V.16. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 6S. Historia de potencia lineal simplificada.

El caso FUMEX 6 consiste en dos barras que experimentan un fuerte incremento de la potencia al final de la vida. El interés primario de esos casos fue la liberación de gases y estudiar el efecto de la velocidad del incremento de la potencia. El caso 6F presenta una velocidad normal mientras que en el 6S el incremento se produce en algunos días. La respuesta de DINISIO a la liberación es moderada aunque ingresa en el rango de las predicciones de otros códigos.

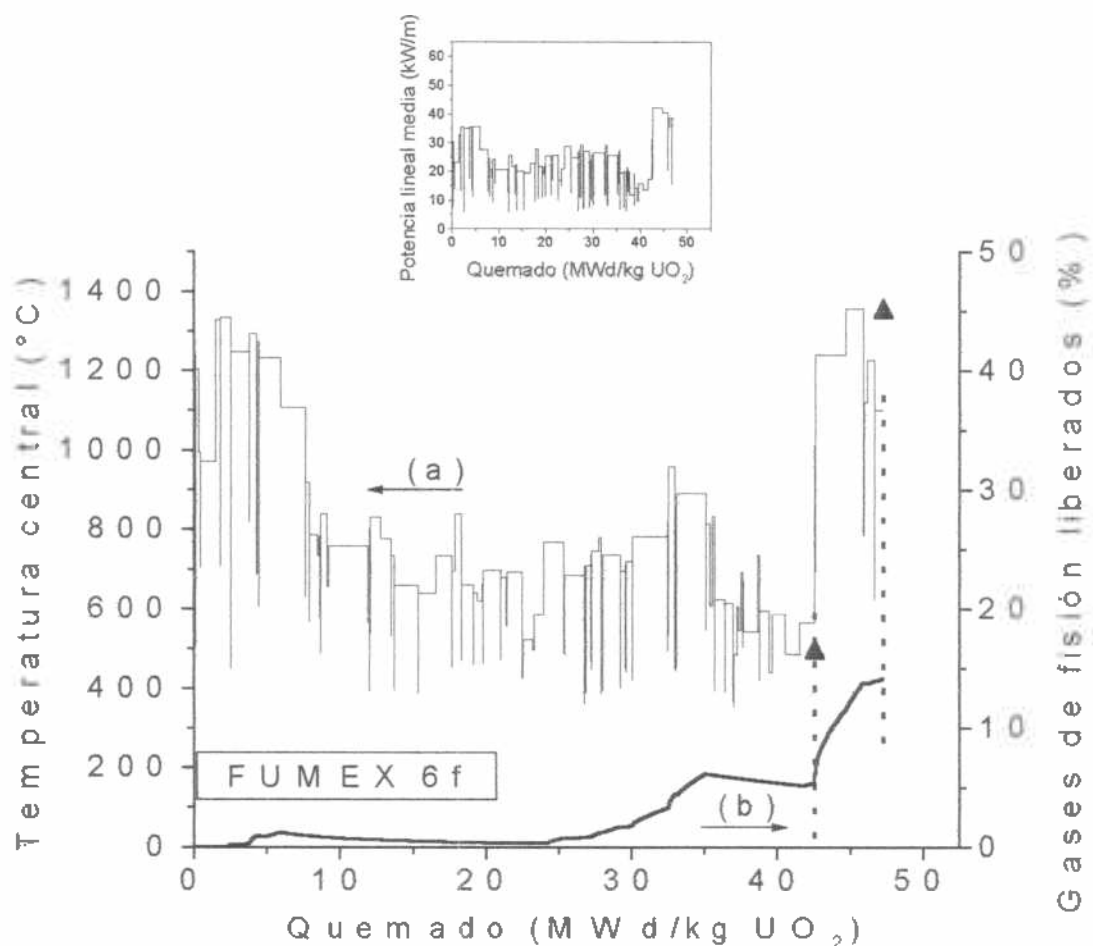


Figure V.17. Resultados simulados correspondientes al caso FUMEX 6F. Historia de potencia lineal simplificada.

V.4 Conclusión

El modelo termoelástico desarrollado reproduce razonablemente la deformación de una barra combustible que fue sometida tanto a una irradiación estacionaria como a una rampa de potencia. Los valores calculados caen en la banda inferior de los valores experimentales.

En cuanto a los experimentos FUMEX, si bien para los cálculos aquí simulados resultó un experimento ciego, como lo fue en el caso de los códigos participantes en la comparación, los resultados obtenidos están acorde a los valores experimentales y caen dentro del rango de valores predichos.

El hecho de que no se considere en DIONISIO la presencia de fractura influye en muchos aspectos de estos resultados. Por un lado, la distribución de tensiones sobre todo en la pastilla es elevada en comparación con los valores reales de un cuerpo cilíndrico en tensión y compresión. Eso es entendible pues las fracturas son grandes aliviadores de tensiones. Por otro lado, la fractura por choque térmico que se produce en las pastillas de combustible al iniciar la rampa de potencia es liberadora de gases de fisión al gap por lo que se prevee un aumento de los gases liberados sobre todo en el umbral de baja liberación como en los casos FUMEX 1 y 2 de dificultosa simulación.

VI. DISCUSION.

Se ha descrito en forma sucinta el funcionamiento de un código de simulación del comportamiento de una pastilla combustible, el gap y la vaina correspondiente, durante su quemado en un reactor de potencia en condiciones normales de operación. Los resultados de dicho cálculo son extrapolados y aplicados a barras combustibles con diferentes números de pastillas y volúmenes libres. Se observa en los casos FUMEX que esa extrapolación no es desacertada pues además de que sus predicciones caen dentro del rango de las de otros códigos semejantes también se observa buena coincidencia con los valores experimentales de los que se posee constancia. Eso demuestra que se está en la dirección correcta, lo cual valida tres cosas. En primer lugar, como se ha analizado en su momento en el capítulo dos, confirma que los modelos que se están utilizando para la descripción de las situaciones físicas o químicas pertinentes son adecuados y compatibles con la realidad. Se conocía, y se ha demostrado con los resultados estudiados sobre cada modelo en DIONISIO, que individualmente y por separado cada modelo respondía adecuadamente a lo esperado, pero se ha comprobado también que sus interrelaciones y sus mutuas afectaciones son tratadas correctamente. En segundo lugar proporciona confianza en el manejo y desarrollo numérico mediante elementos finitos del problema. No es necesario reafirmar la fortaleza de ese método ni alabar su versatilidad y potencia, pero si asegurarse de que es perfectamente aplicable al problema particular de estudio. Por último, otorga esperanzas de que al completar el análisis del proceso de quemado y PCI con situaciones físicas y químicas todavía no tomadas en cuenta, así como con la inclusión de modelos de fractura o fragilización en el código, dichas simulaciones mejorarán aún más y darán más generalidad y consistencia el programa.

La amplia concordancia que mostraron las simulaciones de DIONISIO con los resultados de los experimentos MOX muestran también que el código posee un tratamiento adecuado del problema de la interacción vaina pastilla y el efecto bambú asociado a dicha interacción.

En otro aspecto de este trabajo, se han presentado algunas herramientas gráficas que facilitan la interacción del usuario no experto con el programa. Se espera poder mejorar e implementar nuevas herramientas gráficas que permitan una mejor visualización de los resultados de DIONISIO. La más ambiciosa es la de desarrollar un programa que permita observar la evolución con el tiempo de las formas del dominio, una especie de reproductor de videos con imágenes virtuales del quemado de un combustible.

Mencionaremos a continuación algunos aspectos de versatilidad del código que quizás no son evidentes para quien no ha manipulado programas de este tipo:

*) DIONISIO simula dominios bidimensionales divididos en tres subregiones que representan los tres materiales: Vaina, Gap y Pastilla. Se ingresan los nodos que determinan al dominio y no hay limitación de forma y tamaño mientras se respete un dominio de tres materiales, lo cual permite simular diferentes formas de pastilla de combustible además de diferentes espesores de la vaina.

*) Con pequeñas modificaciones DIONISIO pueden tratarse también dos materiales en contacto, esto es pastilla-vaina, para simular vainas combustibles con vainas colapsables.

*) Se ha mencionado al BACO como un antecesor directo y poderoso en CNEA de códigos de simulación. Ambos códigos poseen características distintivas: DIONISIO trabaja en dos dimensiones permitiendo incluir modelos y situaciones bidimensionales; usa elementos finitos para la discretización del dominio. Por otro lado BACO es una herramienta acabada y en funcionamiento mientras que DIONISIO necesita muchas horas de trabajo y de experiencia para convertirse en una.

*) La forma modular que el programa presenta hace posible con facilidad la inclusión de mejoras y aspectos no tratados todavía. La utilización de funciones claramente diferenciadas del resto del código permite que cualquier usuario medianamente entrenado ingrese y modifique el programa para adaptarlo a sus necesidades de análisis

*) En un futuro cercano se espera introducir un modelo de fractura en el programa. Al trabajar el dominio con simetría cilíndrica, el modelo de fractura a incluir podrá contener un manejo de las tres coordenadas fundamentales del sistema otorgando gran generalidad a dicho tratamiento. Se ha mencionado ya la importancia de incluir fractura en el material fisil pues las mismas permiten el alivio de tensiones y promueven una mayor liberación de gases. Es bastante difícil predecir a priori las modificaciones a los resultados del programa que estas pueden traer pues los fenómenos están sumamente interconectados y se deben estudiar detalladamente las consecuencias de cada modificación.

*) De igual modo se podría ampliar a tres dimensiones el programa aprovechando la versatilidad de los elementos finitos y la forma de construcción del mismo. Un pasaje a tres dimensiones permitiría por ejemplo, un tratamiento mucho más realista del proceso de fractura aunque deberían encontrarse modelos tridimensionales para los demás fenómenos físicos involucrados.

BIBLIOGRAFIA.

- [1] MATHEWS, J.R., *The quantitative description of deformation and stress in cylindrical fast reactor fuel pins*, in *Advances in Nuclear Science and Technology*, Vol.6 (1972), Academic Press.
- [2] CAILLOT, L., LINET, B., LEMAIGNAN, C., *Pellet clad interaction in PWR fuel. Analytical irradiation experiment and finite element modelling*, (Proc. SMIRT 12, Stuttgart, Germany, 1993)
- [3] DELETE, G., CHARLES, M., *Thermal conductivity of fully dense unirradiated UO₂: 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 (1997) 203–216.
- [4] TIMOSHENKO, S., *Theory of elasticity*, McGraw Hill, 1951.
- [5] PENNY, MARRIOT, *Design for creep*, McGraw Hill, 1971.
- [6] HARRIAGUE, S., COROLI, G., SAVINO, E., *BACO, a computer code for simulating a reactor fuel rod performance*, *Nucl. Eng. and Design* 56 (1980) 91–103.
- [7] SEGERLIND, L.J., *Applied finite element analysis*, 2nd Ed., Wiley (1984).
- [8] *Handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel behavior*, MATPRO version 11, NUREG/CR-0497, TREE-1280 (1979).
- [9] DENIS, A., PIOTRKOWSKI, R., *Simulation of isothermal fission gas release*, *J. of Nucl. Mater.* 229 (1996) 149–154.
- [10] DENIS, A., PIOTRKOWSKI, R., *A fission gas release model*, *Water Reactor Fuel Element Modeling at High Burnup and Experimental Support*, IAEA-TECDOC-957, IAEA (1997) 455–465.
- [11] TURNBULL, J.A., WHITE, R., WISE, C., *The diffusion coefficient of Fission Gas Atoms in UO₂*, IAEA TC 659/3.5 (1987) 174–181.
- [12] WHITE, R., TUCKER, M., *A new fission gas release model*, *J. of Nucl. Mater.* 118 (1983) 1–38.
- [13] ITO, K., IWASAKI, R., IWANO, Y., *Finite element model for analysis of fission gas release from UO₂ fuel*, *J. of Nucl. Sci. and Technol.* 22 (2) (1985) 129–138.
- [14] NAKAJIMA, T., *A comparison between fission gas release data and FEMAXI-IV code*

calculations, Nucl. Eng. And Design 101 (1987) 267–279.

[15] STAUFFER, D., *Introduction to percolation theory*, Taylor & Francis, London and Philadelphia, 1985.

[16] MALDOVÁN, M., DENIS, A., PIOTRKOWSKI, R., *Simulation of isothermal fission gas release. An analytical solution*, Nucl. Eng. and Design 187 (1999) 327–337.

[17] OLANDER, D., *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*, Technical Information Center, USDOE, 1976.

[18] FRANKLIN, D., ROBERTS, J., LI, C., *Low temperature swelling and densification properties of LWR fuels*, J. of Nucl. Mater. 125 (1984) 96–103.

[19] MARINO, A., SAVINO, E., HARRIAGUE, S., *BACO code version 2.20: a thermomechanical description of a nuclear fuel rod*, J. Nucl. Mater. 229 (1996) 155–168.

[20] SCHILOT H. *Programación en C y C++ en WINDOWS 95*. OSBORNE Mc Graw-Hill. 1995.

[21] PETZOLD CH., YAO P., *Programación en WINDOWS 95*. Microsoft Press, Mc Graw-Hill. 1995.

[22] REDDY J. N., *An introduction to the finite element method*. Mc Graw-Hill, 1993.

[23] ZIENKIEWICZ O. C., TAYLOR R. L., *El método de los elementos finitos, Vol I - Vol II*. Mc Graw-Hill, 1994.

[24] BASOMBRIO F. G., VENERE M. J., *Introducción al método de elementos finitos*. I.E.S.d.E., C.A.E.

[25] PISSANETZKY, S. *Sparse matrix technology*. Academic Press, London. 1984.

[26] DENIS. A. SOBA. A. *Simulación de la interacción termomecánica entre la pastilla y la vaina y liberación de gases de fisión*. Asociación Argentina de Tecnología Nuclear, Buenos Aires, Noviembre de 2000

[27] SOBA A., DENIS A. *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, 1998, Nyköping, Suecia.

[28] SOBA A. DENIS A. *Modelo Termoelástico por Elementos Finitos de Deformaciones en Vainas de Elementos Combustibles*. 83º Reunión de la Asociación Física Argentina, La Plata, Octubre de 1998.

-
- [29] SOBA A. DENIS A. *Simulación por elementos finitos de fenómenos térmicos, elásticos y plásticos en elementos combustibles*. Asociación Argentina de Tecnología Nuclear, Bariloche, Noviembre de 1999.
- [30] DENIS A. SOBA A. *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.
- [31] LANDAU L. D. LIFSHITZ E. M. *Theory of elasticity*. Pergamon Press, Addison Wesley. 1959.
- [32] CHENG HUAN H., USMANI A. S. *Finite element analysis for heat transfer*. Spring Verlag, 1991.
- [33] ITO K., ICHIKAWA M., OKUBO T., IWANO Y., *FEMAXI-III a computer code for fuel rod performance analysis*, Nucl. Eng. and Design 76 (1983) 3-11.
- [34] FINK J. K., LEIBOWITZ L. *Thermal conductivity of zirconium*, J. Nucl. Mater. 226 (1995) 44-50.
- [35] SANCHEZ SARMIENTO G., BASOMBRIO F. G. *Análisis termoelástico de las vainas para elementos combustibles de la central nuclear Atucha en la zona de los patines, en contacto con el separador*, C.N.E.A. 1977.
- [36] MENDELSON A., HIRSCHBERG M. H., MASON S. S. *A general approach to the practical solution of creep problems*, Journal of Basic Engineering, Diciembre 1959, 585-593.
- [37] IWANO Y. *An efficient numerical method for solving creep problems*, Nucl. Eng. and Design 88 (1985) 333-339.
- [38] LEVY A., PIFKO B. *On computational strategies for problems involving plasticity and creep*, International Journal for Numerical Methods in Engineering. Vol. 17 747-771, 1981.
- [39] International Atomic Energy Agency, *Fuel Modeling at extended burnup*, IAEA-TECDOC-998, IAEA (1998).
- [40] MARINO, A. C., PEREZ E.E., ADELPHANG P., *Irradiation of Argentine (U,Pu)O₂ MOX fuels. Postirradiation results and experimental analysis with the BACO code*, J. of Nucl. Mater. 229 (1996), 169-186.
- [41] DELAUNAY 2D. Versión 2.0 1995. CAB-LNCC. Marcelo J. Vénere, Enzo A. Dari, Raúl A. Feijóo, Antonio Salgado.

[42] HILL, R. *The Mathematical Theory of Plasticity*. Clarendon, Oxford, 1950.

[43] BENJAMIN M. MA. *Transient Pellet-Cladding Interacction of LWR fuel rod. Computer code ISUNE-4*. Nucl. Eng. and Design 58 (1980) 303-338.

[44] HARRIAGUE, MARINO, LOPEZ PUMAREGA, AGÜERO. *BACO, user's Manual rel.2.0*. CNEA, ARGENTINA, 1987.

