

**UNIVERSIDAD NACIONAL DE GENERAL SAN MARTÍN  
COMISIÓN NACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA  
INSTITUTO DE TECNOLOGÍA  
"Prof. Jorge A. Sabato"**

**Modelado de formación y evolución de fisuras en materiales  
de una barra de combustible<sup>(\*)</sup>**

**por Ing. Ezequiel Goldberg**

**Director**

**Dr. Alejandro Soba**

**<sup>(\*)</sup>Tesis para optar al título de *Doctor en Ciencia y Tecnología, Mención Materiales***

**República Argentina**

**2021**

# Agradecimientos

Primero y principal, a mi madre y padre, Ruth y Jorge. Por hacer posibles mis logros, apoyarme en mis iniciativas y proveerme, entre muchas cosas, de todo aquello que es intangible, invaluable y esencial para una buena vida.

A mi familia, Sofía, Natalí, Yamila, Claudio, Dora, Ivo, Amadeo y Carmen. Por estar siempre y por ser parte en y causa de los momentos más alegres.

A mi pareja, Candela, por acompañarme cada día y en cada aspecto de la vida, incluidos aquellos futuros. Por ser atenta, cariñosa, creativa y mostrarme como transitar la vida un poco menos acelerado.

A mi director, Alejandro, por sugerir que me presente a concursar una beca de doctorado en la Sección Códigos y Modelos de CNEA. Por innumerables charlas e intercambios de ideas. Por aportar vastísimos conocimientos y capacidades sobre los cuales producir investigación científica y alentar el desarrollo profesional del grupo y de cada integrante.

A Alicia, por fundar las bases de lo que hoy es la Sección Códigos y Modelos y el código DIONISIO, y por darme más de una oportunidad de crecimiento en distintos roles académicos.

A toda la Sección Códigos y Modelos, Emilio, Edgar, Martín, Matías y especialmente a Mauricio por las interacciones que hacen más amena la rutina laboral.

A Manuel Carlevaro, por iniciarme en el mundo de la simulación y en el camino de la investigación científica.

Al Instituto Sabato y la Comisión Nacional de Energía Atómica, por la oportunidad de cumplir un objetivo de mucha importancia en mi vida.

Finalmente, a la educación pública, que me ha formado y de la que he sido y soy parte en distintos roles en cada etapa de mi vida.

# Resumen

En esta tesis se han desarrollado modelos numéricos con el objetivo de simular la formación y evolución de fisuras en las vainas de elementos combustibles de reactores nucleares. Los algoritmos se basan en el Método de Zona Cohesiva, en el marco de los elementos finitos, que otorga ventajas considerables por sobre otros enfoques. En primer lugar, permite representar la nucleación de la fisura sin requerir una hendidura previa que obre como concentrador de tensiones. Por otro lado, al utilizar una zona cohesiva, el estado de tensiones es calculado alrededor de la fisura del mismo modo que en zonas no dañadas y es utilizado para predecir el contacto o la separación entre las superficies formadas después de la apertura de una fisura. Finalmente, el método puede representar no solo una apertura entre materiales, sino el contacto entre dos superficies. Utilizando entonces una derivación del método mencionado, se pudo representar el contacto entre materiales en geometrías tridimensionales, siendo aplicado para los fenómenos de contacto pastilla-pastilla y principalmente pastilla-vaina, de carácter sustancial en los procesos de falla.

Los modelos fueron incluidos en el código de combustible nuclear DIONISIO, creado, desarrollado y mantenido por la Sección Códigos y Modelos de la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear de la Comisión Nacional de Energía Atómica. El modelo de contacto permitió al programa alcanzar su versión actual al poder simular dominios en tres dimensiones, lo cual posibilita representar de forma precisa fenómenos que carecen de simetrías.

Inicialmente se ha puesto el enfoque en vainas de Zircaloy y materiales base circonio como el Zr-1%Nb. Se realizaron comparaciones con soluciones analíticas de casos de prueba, ensayos controlados de materiales nucleares sin irradiación y numerosos ejercicios experimentales sometiendo barras combustibles a abruptas rampas de potencia, en muchas de las cuales se producen roturas a causa del contacto con las pastillas. A su vez, se ha estudiado el comportamiento de los modelos en conjunción con otros fenómenos que ocurren en una barra de combustible y que el código puede simular, como el crecimiento bajo irradiación.

**Palabras clave:** mecánica de fractura, materiales nucleares, método de zona cohesiva, simulación numérica, DIONISIO.

# Abstract

In this thesis, numerical models have been developed in order to simulate the formation and evolution of cracks in the claddings of fuel elements of nuclear reactors. The algorithms are based on the Cohesive Zone Method, within the framework of finite elements, which provides considerable advantages over other approaches. In the first place, it allows to represent the nucleation of the crack without requiring a previous notch that acts as a stress concentrator. On the other hand, when using a cohesive zone, the stress state is calculated around the crack in the same way as in undamaged zones and is used to predict the contact or separation between the surfaces formed after the opening of a crack. Finally, the method can represent not only an opening between materials, but the contact between two surfaces. Using then a derivation of the mentioned method, it was possible to represent the contact between materials in three-dimensional geometries, being applied for the contact phenomena between pellets and mainly between pellet and cladding, of a substantial nature in the failure processes.

The models were included in the DIONISIO nuclear fuel code, created, developed and maintained by the Codes and Models Section of the Nuclear Fuel Cycle Management of the National Atomic Energy Commission. The contact model allowed the program to reach its current version by being able to simulate domains in three dimensions, which makes it possible to accurately represent phenomena that lack symmetries.

Initially the focus has been on claddings made of Zircaloy and zirconium based materials such as Zr-1%Nb. Comparisons were made with analytical solutions from test cases, controlled testing of nuclear materials without irradiation, and numerous experimental exercises subjecting fuel rods to abrupt power ramps, many of which break due to contact with the pellets. Moreover, the behavior of the models has been studied in conjunction with other phenomena that occur in a fuel rod and that the code can simulate, such as growth under irradiation.

**Keywords:** fracture mechanics, nuclear materials, cohesive zone method, numerical simulation, DIONISIO.

# Publicaciones y congresos

Las tareas realizadas a lo largo del desarrollo de esta tesis han dado lugar a las siguientes publicaciones:

## Revistas internacionales con referato

- Goldberg, E., Soba, A. (2021). “*Modeling of formation and evolution of cracks in zirconium-based claddings of nuclear fuel rods within DIONISIO 3.0*”. Nuclear Science and Engineering; <https://doi.org/10.1080/00295639.2021.1918939>.
- Goldberg, E., Cazado, M. E., Loza Peralta, M. E., Soba, A. (2021). “*New module for simulating experiments without irradiation included in the DIONISIO 3.0 code*”. Nuclear Engineering and Design; <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2021.111067>.
- Cazado, M. E., Goldberg, E., Togneri, M. A., Denis, A., Soba, A. (2020). “*A new irradiation growth model for Zr-based components of nuclear reactors for the DIONISIO code*”. Nuclear Engineering and Design; <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2020.111009>.
- Goldberg, E., Loza Peralta, M. E., Soba, A. (2019). “*DIONISIO 3.0: Comprehensive 3D nuclear fuel simulation through PCMI cohesive and PLENUM models*”. Journal of Nuclear Materials; <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.06.005>.

## Congresos internacionales

- Goldberg, E., Soba, A., “*Simulating the formation and evolution of cracks in zirconium based claddings of nuclear fuel rods with DIONISIO 3.0*”, Top Fuel 2021, 24 al 28 de octubre de 2021, Santander, España (**bajo revisión**).
- Goldberg, E., Soba, A., “*Three-Dimensional PCI Modelling in Dionisio 3.0*”, Progress on Pellet Cladding Interaction and Stress Corrosion Cracking: Experimentation, Modelling and Methodologies Applied to Support the Flexible Operation of Nuclear Power Plants, IAEA-TECDOC-1960 (2021). <https://www.iaea.org/publications/14814/progress-on-pellet-cladding-interaction-and-stress-corrosion-cracking>
- A. Soba, M. Lemes, E. Goldberg, M. E. Loza Peralta, M. E. Cazado, M. E. González, A. Denis, “*ACCIDENT CONDITION MODELS IN THE DIONISIO 2.0 CODE*”, Fuel Modelling in Accident Conditions (FUMAC), IAEA-TECDOC-1889 (2019). <https://www.iaea.org/publications/13604/fuel-modelling-in-accident-conditions-fumac>

## Congresos nacionales

- Goldberg, E., Soba, A. “*Three-Dimensional Pellet-Cladding Mechanical Interaction through Cohesive Model in Dionisio 3.0*”. XXIV Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 5 al 7 de noviembre de 2019, Ciudad de Santa Fe, Santa Fe, Argentina. <http://venus.ceride.gov.ar/ojs/index.php/mc/article/view/5803>
- Goldberg, E., Kees, J., Estévez, E. A., Soba, A. “*Determinación de Tensiones por Crecimiento Diferencial bajo Irradiación en Zona de Baja Temperatura en el Núcleo de un Reactor Experimental mediante el Código Dionisio*”. XXIV Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 5 al 7 de noviembre de 2019, Ciudad de Santa Fe, Santa Fe, Argentina. <http://venus.santafe-conicet.gov.ar/ojs/index.php/mc/article/view/5805>
- Goldberg, E., Soba, A. “*Estudio de la Propagación de Fisuras en Vainas de Combustibles Nucleares Mediante Mecánica de Fractura Elasto-Plástica*”. XXIII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, 7 al 10 de noviembre de 2017, La Plata, Buenos Aires, Argentina. <http://venus.ceride.gov.ar/ojs/index.php/mc/article/view/5394>

## Reuniones científicas

- Goldberg, E., Loza Peralta, M. E., Soba, A. “*Modelado tridimensional en el código DIONISIO*”, XLV Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología nuclear, 5 al 6 de diciembre de 2018, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.
- Goldberg, E., Soba, A. “*Modelado de Experimentos QUENCH en Vainas de Combustibles Nucleares con el Código DIONISIO*”, XLIV Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear, 23 al 27 de octubre de 2017, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.
- Goldberg, E., Loza Peralta, M. E., Soba, A. “*Modelos 3D de PCMI y plenum en el código DIONISIO*”, Expo Becari@s, 23 de agosto de 2019, Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica.

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>8</b>
1.1. Relevancia del tema en la industria nuclear . . . . .	8
1.2. Fracturas en condición de accidente . . . . .	11
1.3. El código DIONISIO, casos de accidente analizados, experimentos disponibles	13
1.4. Métodos analíticos y numéricos para analizar fracturas en metales . . . . .	17
1.4.1. Método de Elementos Finitos Extendido (X-FEM) . . . . .	21
1.4.2. Modelo de Zona Cohesiva (CZM) . . . . .	22
1.5. Modelo cohesivo para describir el contacto entre superficies . . . . .	24
1.6. Validación con datos experimentales y numéricos . . . . .	25
<b>2. Métodos y modelos</b>	<b>27</b>
2.1. Modelo de Zona Cohesiva para fisuras . . . . .	27
2.1.1. Leyes cohesivas para fisura . . . . .	28
2.1.2. Tratamiento de los elementos cohesivos en DIONISIO . . . . .	29
2.2. Modelo de Zona Cohesiva para contacto . . . . .	34
2.3. Crecimiento bajo irradiación de aleaciones base circonio . . . . .	37
2.4. Solución numérica y eficiencia computacional . . . . .	39
<b>3. Ensayos y validación</b>	<b>42</b>
3.1. Ensayos de fisura . . . . .	42
3.1.1. Flexión de viga en tres puntos . . . . .	42
3.1.2. Ensayo de tracción de anillos de Zr-1 %Nb . . . . .	44
3.2. Ensayos de contacto . . . . .	46
3.2.1. Problema de Hertz . . . . .	46
3.2.2. Contacto entre tubo y cilindro embutido . . . . .	48
3.2.3. Comportamiento termomecánico de compuesto de SiC . . . . .	49
3.3. Ensayos de crecimiento bajo irradiación . . . . .	52
3.3.1. Probetas de Zircaloy-2 . . . . .	52
3.3.2. Placa de Zircaloy-4 bajo flujo neutrónico no uniforme . . . . .	53
<b>4. Experimentos de fisura sin irradiación</b>	<b>57</b>
4.1. Modelos mecánicos de <i>ballooning</i> y <i>burst</i> . . . . .	58
4.2. Validación experimental . . . . .	59
<b>5. Experimentos de fisura con irradiación</b>	<b>67</b>
5.1. Ensayos de rampas de potencia . . . . .	69

5.2. Modelo de fragilización por hidrógeno . . . . .	75
<b>6. Experimentos de contacto pastilla-vaina</b>	<b>78</b>
6.1. Experimento MOX . . . . .	79
6.2. Experimento CONTACT . . . . .	82
6.3. Experimento IRDMR . . . . .	84
6.4. Experimento INR Rumania . . . . .	85
6.5. Experimento IFA 562.1-2 . . . . .	87
<b>7. Conclusiones</b>	<b>89</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>92</b>

# 1. Introducción

## 1.1. Relevancia del tema en la industria nuclear

En una barra combustible nuclear para reactores de potencia comerciales usuales, se utiliza un revestimiento metálico para contener las pastillas de combustible propiamente dicho. Las vainas tubulares son cilindros huecos utilizados para proporcionar un recinto hermético que aisle y contenga al material radiactivo. Por otra parte, las vainas están en contacto con el refrigerante, en general agua líquida o vapor de agua, que extrae el calor generado dentro de las pastillas. Los materiales utilizados para la fabricación del tubo de revestimiento son en general aleaciones a base de circonio o acero. Las vainas poseen un espesor variable, dependiendo del tipo de reactor, en un rango entre los 0.05 y los 0.09 cm (ver [Tabla 1.1](#) y [Figura 1.1](#)). El volumen total interior nunca está completamente lleno por pastillas de combustible, ya que existe un espacio libre dedicado a contener los productos gaseosos liberados por las reacciones de fisión.

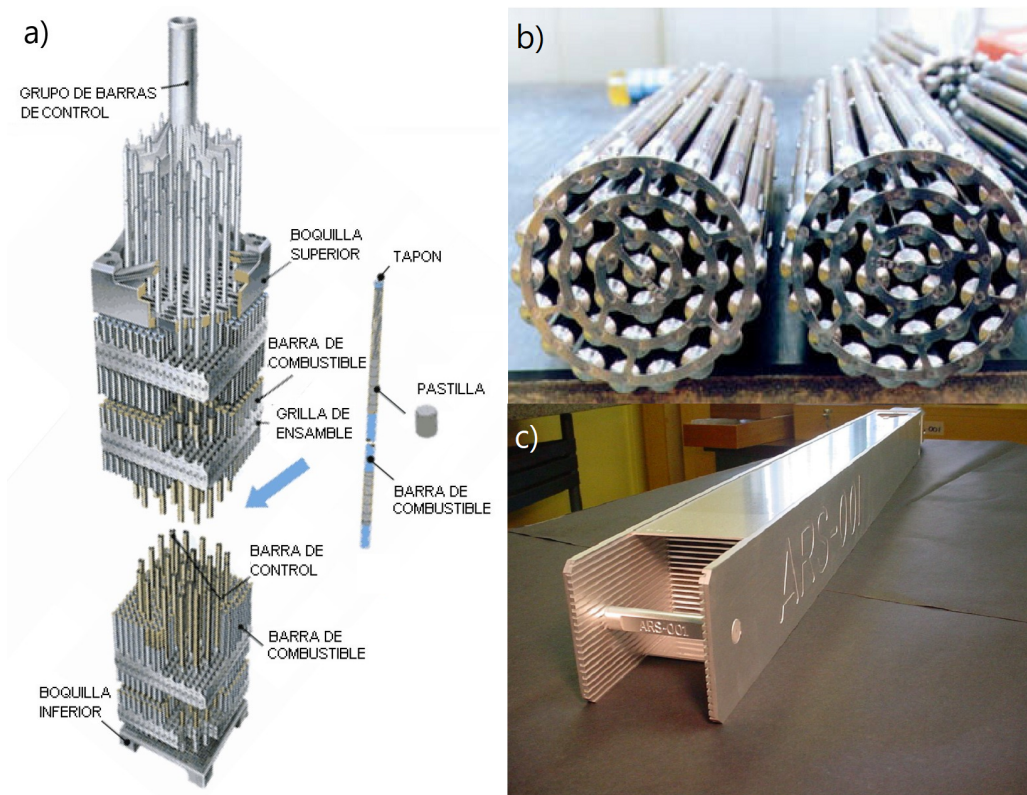


Figura 1.1: Combustibles nucleares. A) LWR (del inglés, *Light Water Reactor*). B) CANDU. C) Placa (reactores de investigación).

Tabla 1.1: Clasificación de reactores de potencia [1]

Reactor	PWR (VVER)	BWR	PHWR	AGR	RBMK	FR LMFBR
Energía neutrónica	Térmica					Rápida
Moderador	H <sub>2</sub> O		D <sub>2</sub> O	Grafito		—
Tipo combustible	UO <sub>2</sub> (U,Pu)O <sub>2</sub>		UO <sub>2</sub>			(U,Pu)O <sub>2</sub> U-Pu-Zr
Enriq. <sup>(*)</sup>	Bajo		U natural	Bajo		Intermedio
Forma EECC	Barra					
Material vaina	Zry-4	Zry-2	Zry-4	Acero inoxidable	Zr-1 %Nb	Acero Aleac. FeNi
Posición EECC	Vertical		Vertical Horizontal	Vertical		
Tipo refrig.	H <sub>2</sub> O presurizado	H <sub>2</sub> O hirviendo	D <sub>2</sub> O presurizado	CO <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O hirviendo	Na
Temp. de salida (C)	320	286	310	630	284	550
Presión refrig. (bar)	155	70	110	40	70	5

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

Una vaina combustible, en su proceso de fabricación y control posterior, cumple numerosas normas de calidad que aseguran que, al momento de integrar el elemento combustible (EC), se encuentra libre de defectos. Sin embargo, la exigente historia a la que será sometida en reactor, genera numerosas instancias de fallas que pueden llegar eventualmente a producir la rotura de la vaina y propiciar su prematura extracción del núcleo del reactor. Aun antes de esto, los distintos parámetros mecánicos y la tenacidad a la fractura se modifican por el trabajado mecánico [2], así como también sufren alteraciones importantes con la cantidad de hidrógeno que capture el material [3] o con la acumulación de irradiación [4]. Si bien estadísticamente la tasa de falla es baja [5-7], esto es a cuenta de un estricto control de las condiciones de operación del reactor. Esto se debe a que el crecimiento de fisuras se ve acelerado por la velocidad de sollicitación mecánica, así como por la cantidad u orientación de los hidruros que se acumulan en los extremos de cada fisura [8, 9].

Por otro lado, a lo largo del quemado, la vaina, habitualmente de Zircaloy (Zry, una aleación de base circonio), es sometida a un conjunto de tensiones que generan deformaciones instantáneas y permanentes. Asimismo, el contacto con el refrigerante por su lado externo, y con la cambiante atmósfera interna producto de agentes liberados por el quemado del combustible, como el cesio y el yodo, generan diferentes tipos de ataques corrosivos que pueden fragilizar el metal y acercarlo a la falla. En el exterior se produce el crecimiento de una capa de óxido (llamada zirconia), de baja conductividad térmica,

que provoca un aumento en la temperatura exterior de la vaina y, en consecuencia, de todo el sistema (una capa de óxido de  $\sim 80 \mu\text{m}$  incrementa en  $30 \text{ }^\circ\text{C}$  la temperatura de la vaina). La presencia de especies químicas agresivas, combinada con la existencia de tensiones importantes, puede dar lugar al fenómeno conocido como fisura por corrosión bajo tensión (SCC, del inglés *Stress Corrosion Cracking*), capaz de conducir a la rotura de la vaina.

La hidruración del Zry es un fenómeno ligado al de oxidación. El hidrógeno que ingresa en la vaina es soluble hasta 100 ppm a  $340 \text{ }^\circ\text{C}$ , pero es prácticamente insoluble a temperatura ambiente ( $<1 \text{ ppm}$ ). Un enfriamiento de la vaina provoca la precipitación de hidruros, que incrementan la fragilidad del material. El control de este fenómeno es fundamental en el diseño y análisis histórico del comportamiento de la vaina. En forma genérica, se puede afirmar que la cantidad de hidrógeno contenida es proporcional al espesor de la capa de óxido.

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

- a) *Creep*: deformación progresiva y permanente bajo fuerzas constantes, que se suma a las instantáneas. Los aumentos de temperatura y la irradiación aceleran este fenómeno. Bajo irradiación, el flujo neutrónico participa en la movilidad de los defectos de la red cristalina e incrementa la velocidad de deformación. A bajas presiones ( $<100 \text{ MPa}$ ) la deformación por irradiación contribuye en un 80 % a la deformación total por *creep*.
- b) Crecimiento bajo irradiación (IG, del inglés *irradiation growth*): se observa experimentalmente que las vainas de Zircaloy sufren un crecimiento debido a la irradiación que se manifiesta en forma diferenciada debido a las asimetrías que poseen. La cantidad de deformación aumenta con el quemado y el tiempo. Este fenómeno globalmente causa la reducción progresiva del espacio entre las barras y las boquillas superiores e inferiores del elemento, por lo que debe tenerse en cuenta en el diseño.

Durante la operación del combustible bajo condiciones normales, la distancia que separa la pastilla de la vaina (*gap*) disminuye. Debido a la evolución geométrica de la pastilla (hinchamiento, *creep*, reestructuración) y de la vaina (*creep*, crecimiento bajo irradiación) ambos materiales pueden entrar en contacto, dando lugar a tensiones y deformaciones locales de consideración. Estos fenómenos se denominan genéricamente interacción mecánica pastilla-vaina (PCMI, del inglés *Pellet-Cladding Mechanical Interaction*) o PCI cuando se quiere involucrar también a procesos de origen químico.

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 [10, 11].

Si bien el contacto aporta un efecto beneficioso ya que facilita la evacuación de calor, causa importantes tensiones en el revestimiento que, bajo una atmósfera de elementos corrosivos, particularmente el yodo, pueden provocar agrietamiento y llegar hasta la rotura. Este proceso es el anteriormente mencionado SCC y es uno de los mecanismos más frecuentes de falla de las vainas [12-16]. Además, si la tensión es suficientemente alta, el material puede alcanzar el rango de fractura dúctil en el que la grieta crecerá siguiendo la curva característica R del material [12, 13].

Bajo esas condiciones, una rampa de potencia rápida, que eleve la exigencia del material sin dar tiempo a relajar tensiones, puede provocar la rotura de la vaina y la liberación de material físil al circuito primario. Por lo que, como medida precautoria, se limita el incremento de potencia, sobre todo en las primeras rampas hasta permitir la relajación de tensiones [17].

Para analizar el crecimiento de fisuras bajo estas condiciones, debe considerarse la distribución de temperatura a la que está sometida la vaina, la cantidad de irradiación acumulada (ya que ello está relacionado con la fragilización de los parámetros mecánicos), la cantidad de elementos corrosivos liberados a la atmósfera y la distribución de hidruros dentro de la vaina. Este análisis varía de acuerdo con el tipo de combustible que se analiza, sea un CANDU [18], BWR [19] o PWR [20], en donde cada uno de los aspectos antes mencionados debe tenerse en cuenta, en conjunto con ensayos generales que se proponen estudiar experimental y numéricamente este problema [21].

Todos los fenómenos mencionados se intensifican en condiciones del llamado alto quemado ( $>30$  MWd/kgHM), especialmente en reactores PWR [22, 23]. Si bien prolongar la vida del combustible en reactor proporciona numerosas ventajas desde el punto de vista económico, un mayor tiempo de permanencia de la vaina en el reactor aumenta la irradiación, lo que incrementa la cantidad de hidrógeno capturado, la corrosión interna y la oxidación externa, con su consecuente fragilización. La combinación de estos factores facilita la nucleación y propagación de fisuras y la consiguiente cantidad de fallas en los EECC por PCMI [24, 25].

## 1.2. Fracturas en condición de accidente

Existen dos grandes tipos de accidentes en reactores nucleares que afectan directamente el comportamiento y la estabilidad de los combustibles. En una amplia clasificación se pueden dividir en accidente de pérdida de refrigerante (LOCA, del inglés *Loss-of-Coolant Accident*) [26] y accidente iniciado por reactividad (RIA, del inglés *Reactivity-initiated Accident*) [27] (Figura 1.2). En el caso de un LOCA, el suministro de refrigerante se ve afectado y el calor producido durante la fisión no puede escapar, lo que resulta en un repentino aumento de la temperatura y la presión dentro de los tubos de Zircaloy. El tubo comienza a hincharse y finalmente explota. En consecuencia, las vainas están sujetas a

los mecanismos de daños como el *creep*, la pérdida de ductilidad y la corrosión. En el caso de un RIA, hay un aumento indeseado en la velocidad de fisión y un incremento abrupto en la potencia del reactor que conduce al daño del núcleo del mismo, por lo que los mecanismos de daño usuales en este escenario se producen por interacción mecánica y alejamiento de la ebullición nucleada (DNB, del inglés *Departure from Nucleate Boiling*) [28]. Estos fenómenos son conceptualmente semejantes a los que ocurren y afectan a las vainas en PCMI, aunque intensificados por la condición de accidente. Un aumento rápido de potencia asemeja una rampa y la fuerte dilatación térmica de la pastilla puede propiciar el avance de una fisura y una potencial rotura [29]. Nuevamente, como en el caso de operación normal, las condiciones de alto quemado intensifican la inestabilidad de las vainas [30-32].

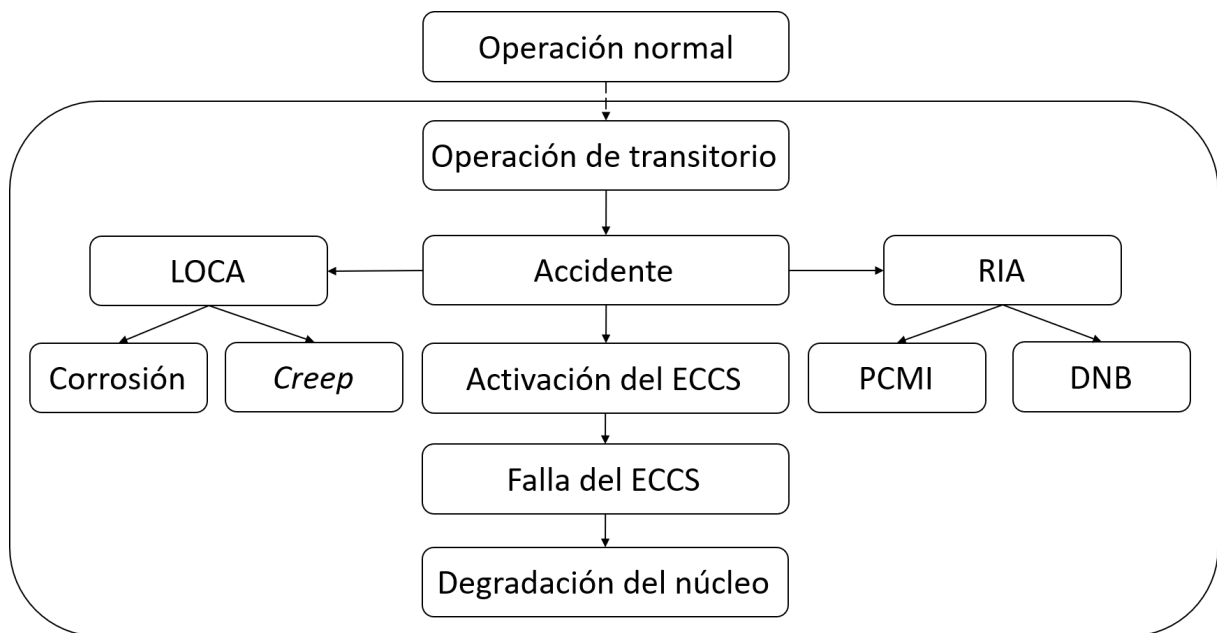


Figura 1.2: Secuencia de eventos en caso de accidente en una planta nuclear de potencia. ECCS: sistema de emergencia para refrigeración del núcleo, del inglés *Emergency Core Cooling System*.

En el tipo de accidente LOCA, ocurren diversos fenómenos mutuamente influyentes que generan un escenario distinto desde el punto de vista de los modelos que deben utilizarse para describirlo. En primer lugar, la pérdida de refrigerante ocasiona un calentamiento rápido de la vaina que puede alcanzar los 1000-1200 °C; al mismo tiempo, la despresurización del entorno hace que la presión interna de la vaina sea mucho mayor que la exterior. Ambos fenómenos propician la alta deformación del metal por *creep* de alta temperatura que culmina con el *burst* (explosión de la vaina) [26]. Tanto la microestructura de la vaina, que sufre cambios de fases y formación de precipitados de hidruros [33], como el aumento del óxido externo e interno [26], generan escenarios de accidentes catastróficos cuyas consecuencias ocasionan severos daños al núcleo del reactor. Por estos motivos, los estudios experimentales sobre estos fenómenos buscan caracterizar las mencionadas condiciones, mitigar sus efectos y determinar condiciones de operación y seguridad de los reactores de

modo de impedir los efectos de este tipo de accidentes. Para ello se proponen facilidades experimentales especialmente diseñadas con ensayos controlados en donde barras y EECC son sometidos a las condiciones de un LOCA severo hasta ocasionar la rotura de las vainas por *burst* [34, 35]. Asimismo, se desarrollan instrumentos analíticos para caracterizar matemáticamente la evolución de dichos fenómenos y establecer criterios de falla basados en las condiciones termomecánicas y constitutivas de los materiales [26, 36].

Por otro lado, diversos códigos de combustible como DIONISIO [37], FRAPTRAN [38], TRASNSURANUS [39] incorporan modelos destinados a describir el comportamiento de las barras combustibles frente a accidentes. Sin embargo, ninguno de estos códigos posee aún un modelo que analice numéricamente la nucleación y el avance de una fisura en las condiciones descritas. El objetivo motivador de esta propuesta de tesis es el de desarrollar modelos numéricos para reproducir, en una instancia de simulación, este tipo de deformaciones incluyendo la formación y evolución de fisuras en las vainas de elementos combustibles nucleares, para después incluirlos en DIONISIO.

### 1.3. El código DIONISIO, casos de accidente analizados, experimentos disponibles

Dentro de la Sección Códigos y Modelos (Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, Comisión Nacional de Energía Atómica) se ha desarrollado un código llamado DIONISIO que analiza el comportamiento de una barra de combustible nuclear bajo irradiación [40]. El mismo provee información, tanto en condiciones normales de operación del reactor como en casos de accidente, del comportamiento de pastillas de  $\text{UO}_2$  (combustible estandarizado del 95 % de los reactores del mundo), así como de las vainas que las contienen, en general conformadas en Zircaloy. Además, el código permite incluir una fisura iniciada para estudiar su evolución en la vaina para un dominio bidimensional.

El código ha participado en proyectos internacionales de desarrollo e intercomparación de resultados organizados por el OIEA (Organismo Internacional de Energía Atómica, IAEA). Uno de ellos fue el experimento *Improvement of Computer Codes Used for Fuel Behaviour Simulation* (FUMEX-III) [41], cuyo objetivo principal consistió en incluir modelos de quemado extendido en códigos de combustible y fruto del cual pudo ampliarse el campo de predicción de DIONISIO hasta quemados medios de aproximadamente 80 MWd/kgU [22, 23]. Otro proyecto internacional del cual ha participado se denominó *Fuel Modelling in Accident Conditions* (FUMAC). Dicho trabajo conlleva la inclusión de modelos de accidente en los códigos de combustible, para lo cual se contó con un nutrido conjunto de ejercicios controlados, en donde barras instrumentadas fueron sometidas a las condiciones de un accidente tipo LOCA, analizándose la variación de los parámetros termohidráulicos, mecánicos y estructurales de una barra. En particular, el conjunto de experimentos desarrollados en AEKI [42], los experimentos QUENCH [43] y otros lleva-

dos a cabo en Studsvik [44] proponen estudiar la deformación de la vaina, cómo y en qué momento comienza el *ballooning* y cómo y en qué momento se produce la rotura. Cabe aclarar que todos estos fenómenos ocurren en un lapso de tiempo pequeño, no superior en ningún caso a los diez a veinte segundos.

El conjunto de subrutinas en DIONISIO dedicadas al cálculo de los campos de tensiones y deformaciones del dominio pastilla-vaina se basa en la formulación débil del método de elementos finitos (MEF o *FEM*, del inglés *Finite Element Method*), la cual se obtiene planteando el equilibrio mediante el principio de los trabajos virtuales [45]. Siendo el problema de carácter no lineal considerado homogéneo, se aplica el criterio de plasticidad de Von Mises [46]. La resolución es estacionaria, utilizando esquemas iterativos basados en el método de gradientes conjugados [45, 46].

En la versión 2.0 del código se utilizan elementos cuadriláteros lineales y en el dominio se supone simetría axial (de revolución alrededor del eje  $z$ ). El código posee un generador de mallas embebido que discretiza la pastilla y la vaina sobre las que se resuelven las ecuaciones termomecánicas, termoquímicas y el contacto entre ambos dominios. A partir de un nuevo modelo de contacto derivado de esta tesis (Sección 2.2 y Capítulo 6) junto con un modelo tridimensional del plenum (repositorio para acumulación de gases de fisión) [47], el código alcanzó su versión 3.0 en la que el usuario puede seleccionar el dominio anteriormente mencionado o uno completamente tridimensional, discretizado mediante elementos hexaédricos y prismas triangulares (ambos de orden lineal).

La barra es dividida en una cantidad de sectores axiales que el usuario determina, independientemente del tamaño o la cantidad de pastillas. Cada uno de estos sectores es sometido a una historia de potencia diferente, representando la distribución longitudinal heterogénea de flujo neutrónico en el reactor, así como la variación de condiciones de contorno. La Figura 1.3a muestra un ejemplo de la división de la parte activa de una barra combustible completa, junto al plenum, el resorte y los tapones. En cada sector axial se consideran una o dos pastillas representativas de todas las que lo integran, junto con la correspondiente porción de *gap* y vaina (Figura 1.3b) y se resuelven las ecuaciones diferenciales (calor, deformación, tensión). La porción del plenum se discretiza con la geometría de una barra de combustible genérica.

En cada paso de tiempo, se obtiene una descripción completa de las variables del sistema para cada sector, comenzando por los valores de potencia lineal y temperatura del refrigerante. En primer lugar, se describe el comportamiento termohidráulico del refrigerante [11, 48]. En este cálculo, se analizan las modificaciones termoquímicas de la vaina, como crecimiento de la capa de óxido (O), cambios de fase y captura de hidrógeno (H). En segundo lugar, se resuelve la ecuación de difusión del calor en el dominio pastilla-*gap*-vaina, considerando condiciones de contorno de Dirichlet determinadas en el paso anterior. Posteriormente, se evalúan la liberación de gases de fisión (FGR, del inglés *fission gas release*), el hinchamiento (*swelling*) y la densificación bajo la actual condición

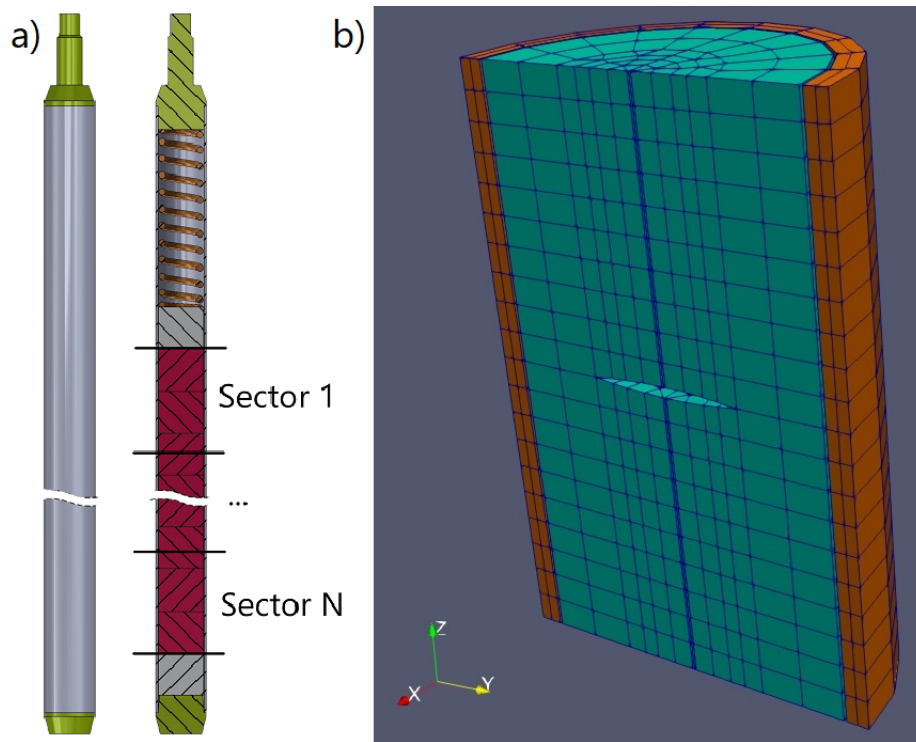


Figura 1.3: a) Esquema de la barra con la pila dividida en sectores. b) Dos medias pastillas (verde) y porción de vaina (naranja).

térmica predicha [49]. A su vez, en cada paso se calcula la composición de la mezcla gaseosa en el *gap* y su conductividad térmica. A continuación, se resuelve la ecuación general de equilibrio mecánico considerando las fuerzas que actúan sobre todo el sistema (dilatación térmica, *swelling* y densificación para la pastilla, crecimiento bajo irradiación para el Zircaloy, viscoplasticidad y *creep*) [11, 40, 48]. Si se alcanzan quemados altos, varios modelos evalúan las diversas variaciones mecánicas y químicas en la pastilla, acoplándose con el resto del código [22, 50]. Una vez completados los cálculos para cada uno de estos sectores en un determinado paso de tiempo, se combinan para obtener resultados generales de la barra completa para algunas variables como la cantidad total de gas liberada al volumen libre y la elongación total de la pila y la vaina.

En la Tabla 1.2 presentamos los principales modelos termomecánicos y sus fuentes incluidos en las bibliotecas de DIONISIO para los materiales de vaina para los que se desarrollaron modelos de fractura. Debe tenerse en cuenta que dicha biblioteca es dinámica, continuamente en crecimiento y actualización, por lo que para cada parámetro existe en general más de un modelo. En la tabla se incluyen las funciones de más reciente desarrollo, mejoradas y contrastadas para los efectos del análisis de mecánica de fractura llevado a cabo en esta tesis.  $T$  representa la temperatura en K,  $\phi$  el flujo neutrónico rápido en  $\text{n s}^{-1} \text{m}^{-1}$ ,  $R$  la constante de gases ideales en  $\text{cal mol}^{-1} \text{K}^{-1}$ ,  $\sigma_{VM}$  la tensión efectiva de Von Mises en Pa,  $w_{fO}$  la fracción en peso de oxígeno capturado en las reacciones metal-agua de alta temperatura (en caso de atmósfera de vapor) [37] y  $t$  es el tiempo total transcurrido en s.  $f_\alpha$  y  $f_\beta$  son las fracciones en volumen de cada fase del circonio en el Zry.

Tabla 1.2: Modelos termomecánicos para Zry y Zr-1 %Nb en DIONISIO

	Zry	Zr-1 %Nb [51]
Módulo de Young $E$ [Pa]	$1,236 \times 10^{11} - 6,221 \times 10^7 T$ [52, 53]	$T < 1073$ $1,121 \times 10^{11} - 6,438 \times 10^7 T$ $T \geq 1073$ $9,129 \times 10^{10} - 4,5 \times 10^7 T$
Coefficiente de Poisson $\nu$	$0,376 - 1,93 \times 10^{-5} T - 5,1 \times 10^{-8} T^2$ [54]	$0,42628 - 5,556 \times 10^{-5} T$
Tensión de fluencia ( <i>yield</i> ) $\sigma_y$ [Pa]	$-7,624 \times 10^{-11} T^6 + 6,651 \times 10^{-7} T^5$ $- 2,211 \times 10^{-3} T^4$ $+ 3,366 \times 10^{-1} T^3$ $- 1,993 \times 10^2 T^2$ [54] $- 2,358 \times 10^4 T$ $+ 5,450 \times 10^7$	$2,634 \times 10^{-7} T^5 - 8,757 \times 10^{-4} T^4$ $+ 1,108 \times T^3$ $- 6,622 \times 10^2 T^2$ $+ 1,818 \times 10^5 T$ $- 1,537 \times 10^7$
Dilatación térmica $\alpha$ [K <sup>-1</sup> ]	Dirección axial $1,26 \times 10^{-5}$ [53] Dirección radial $4,95 \times 10^{-6}$	Dirección axial $293 < T < 393 \rightarrow 5,3 \times 10^{-6}$ $393 < T < 573 \rightarrow 5,4 \times 10^{-6}$ $573 < T < 773 \rightarrow 5,5 \times 10^{-6}$ $773 < T < 923 \rightarrow 5,6 \times 10^{-6}$ Dirección radial $293 < T < 393 \rightarrow 5,7 \times 10^{-6}$ $393 < T < 573 \rightarrow 5,9 \times 10^{-6}$ $573 < T < 773 \rightarrow 6,3 \times 10^{-6}$ $773 < T < 923 \rightarrow 6,8 \times 10^{-6}$
Conductividad térmica $k$ [W m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup> ]	$7,51 + 2,09 \times 10^{-2} T$ $- 1,45 \times 10^{-5} T^2$ [11] $+ 7,67 \times 10^{-9} T^3$	$T < 373$ $9,5 \times 10^{-3}(T - 273) + 17,01$ $373 < T < 673$ $10,3848(T - 273)^{0,117}$ $\times e^{-0,115 \times 10^{-3}(T-273)}$ $673 < T < 1273$ $167,88(T - 273)^{-0,429}$ $\times e^{1,169 \times 10^{-3}(T-273)}$
Creep $d\varepsilon/dt$ [s <sup>-1</sup> ]	$10,24 \times 10^{-29} \phi \times e^{-10000/(RT)} \times \sigma_{VM} + 725,2 e^{12,4175 \times 10^{-8} \times \sigma_{VM}} \times t^{-1}$ [55]	
Creep $d\varepsilon/dt$ [s <sup>-1</sup> ] (alta temperatura)	$\alpha \rightarrow 4 \times 10^{-32} (e^{-342w_{fo}}) (e^{-38487/T}) \sigma_{VM}^{5,89}$ $\beta \rightarrow 1,65 \times 10^{-22} (e^{-17079/T}) \sigma_{VM}^{3,78}$ [56] $\alpha + \beta \rightarrow \alpha \times f_\alpha + \beta \times f_\beta$	$\alpha(\sigma_{VM} < 1500) \rightarrow$ $\rightarrow \frac{6,78 \times 10^9}{T} (e^{-15996/T}) \sigma_{VM}$ $\alpha(\sigma_{VM} \geq 1500) \rightarrow$ $\rightarrow \frac{2,28 \times 10^9}{T} (e^{-23333/T}) \sigma_{VM}^4$ [57] $\beta \rightarrow \frac{1,23 \times 10^9}{T} (e^{-17088/T}) \sigma_{VM}^{4,3}$ $\alpha + \beta \rightarrow \frac{5,01 \times 10^8}{T} (e^{-15000/T}) \sigma_{VM}^4$

## 1.4. Métodos analíticos y numéricos para analizar fracturas en metales

En el modo principal de ejecución de DIONISIO, las deformaciones y tensiones son tratadas mediante la llamada condición cinemática de pequeños desplazamientos y pequeñas deformaciones, la cual asume desplazamientos y rotaciones infinitesimales y la no-linealidad es considerada como condición del material. En caso de que el material se encuentre dentro del rango elástico, su comportamiento será idéntico al de un material lineal elástico [45, 46].

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

$$\int_{\Omega} \bar{\epsilon} : \bar{\sigma} d\Omega = \int_{\Omega} f_{\Omega}^{Ext} u d\Omega + \int_{\Gamma} f_{\Gamma}^{Ext} u d\Gamma \quad (1.1)$$

Donde el primer miembro, constituido por los tensores de deformación  $\bar{\epsilon}$  y de tensión  $\bar{\sigma}$ , representa al trabajo interno y el segundo se compone de la suma de las fuerzas exteriores de volumen ( $f_{\Omega}^{Ext}$ ) y las fuerzas exteriores de superficies ( $f_{\Gamma}^{Ext}$ ) multiplicadas por los desplazamientos ( $u$ ). Es en el primer término en donde se considera el cálculo de las tensiones internas en el dominio, a las que aportan cada una de las deformaciones que actúen sobre la pastilla y la vaina durante la historia de potencia a la que se somete a la barra. Además de las deformaciones elastoplásticas, los materiales sufren dilataciones y contracciones térmicas debido a las altas variaciones de temperatura, así como *creep*, *swelling* en el caso de las pastillas y crecimiento bajo irradiación para la vaina.

Para la mecánica de fractura en particular, el modelo incluido en el código previamente se basa en el cálculo del parámetro J de Rice [58], en el marco proporcionado por la mecánica de fractura elastoplástica clásica [59, 60]. El modelo de integral J supone al comportamiento elastoplástico como elástico no lineal. Bajo esta hipótesis, la energía potencial elástica no depende de la forma de aplicación de la carga, por lo que existe una correspondencia unívoca entre tensión y deformación que permite evaluar la integral a lo largo de un camino. Esta aproximación se cumple siempre y cuando el material no sufra una descarga de tensión considerable. En ese caso, la energía elástica no lineal teórica se diferencia de la energía real para deformar el material ya que la plastificación implica pérdidas calóricas y deformación permanente [60]. En este marco, la integral J representa a la cantidad de energía potencial que se pierde al propagar una fisura. Para predecir la evolución de dicha fisura, se utiliza la llamada curva  $J_R$  que es una propiedad del material y representa la tenacidad a la fractura de este. Esta curva representa un contorno de condiciones de equilibrio donde la fisura permanece estable si la carga es constante, habiendo

un balance entre la fuerza impulsora y la resistencia del material al crecimiento de fisura. El crecimiento estable de una fisura ocasiona una descarga elástica y una deformación no proporcional. Esto implica que la hipótesis de elasticidad no lineal se ve afectada por la pérdida de energía potencial que se transforma en energía no conservativa [61].

En base a este modo de tratar las fisuras, el código analiza el campo de tensiones alrededor del extremo (*tip*) de una fisura, sobre una porción de vaina mallada de forma estructurada y, aprovechando diversas simetrías del dominio, calcula su estado de tensión elastoplástica, evalúa la integral  $J$  de Rice y analiza si se encuentra en las condiciones propuestas por la curva  $J_R$  ideal para comenzar a crecer. Debe tenerse en cuenta que todas las variables involucradas en la curva  $J_R$ , así como en el cálculo del campo de tensiones, dependen a su vez de diversos parámetros, entre los cuales los más relevantes son la temperatura, las presiones aplicadas sobre la vaina, las cantidades de O e H que la vaina ha captado, la atmósfera corrosiva interna y la oxidación externa [52, 53]. Este método antes descrito proporciona resultados aproximados para ciertos modos de fractura y ciertas hipótesis de trabajo y ha sido muy utilizado hasta la década de 1990 y primeros años del 2000 [62-72]. Suele aplicarse a problemas elastoplásticos con relaciones constitutivas que involucran no linealidades materiales, pero sin suponer grandes deformaciones o desplazamientos ya que complejizan estructuralmente las ecuaciones integrales. Por otro lado, estos métodos clásicos resultan adecuados únicamente cuando la deformación plástica afecta a regiones relativamente pequeñas de la estructura considerada. Ya que se presupone la existencia de un campo autónomo de tensiones en torno al vértice de la grieta, los casos de plastificación generalizada (en los que no se conoce a priori la forma en que se distribuyen las tensiones alrededor de la fisura) no pueden ser estudiados mediante los parámetros tradicionales de la mecánica de fractura (como  $K$  o  $J$ ). Los análisis clásicos adolecen de otra limitación importante, suelen suponer que la distribución de tensiones es fundamentalmente bidimensional. Aquellas situaciones en las que los efectos tridimensionales sean apreciables (bien sea debido a la geometría del problema o simplemente a la distribución de esfuerzos) no pueden ser tratadas correctamente [64-66].

Una aproximación alternativa al problema es la utilización de la mecánica de daño. Esta intenta determinar cómo se degrada el material en función del estado local de tensiones. Utilizando relaciones constitutivas que reproduzcan el efecto del mecanismo microestructural de fractura pertinente, puede obtenerse una mejor descripción del estado del material cerca de la fisura. En las aleaciones metálicas de elevada tenacidad a la rotura, el fenómeno suele acontecer por nucleación, crecimiento y posterior eliminación de microcavidades (Figura 1.4). Un modelo muy popular para el tratamiento de este proceso es el de Gurson-Tvergaard [73, 74], que incorpora el efecto de la tensión hidrostática en la superficie de flujo, dando lugar a una componente volumétrica de la deformación plástica que se cuantifica a través del nivel relativo de porosidad. Al mismo tiempo, la porosidad es un indicador del daño acumulado en el material. Este modelo, utilizado en

conjunción con el MEF, permite abordar situaciones que exceden el ámbito de validez de la mecánica de fractura clásica. En el caso de la propagación lenta de fisuras (donde los efectos transitorios son irrelevantes) la mayoría de los estudios se han llevado a cabo mediante el análisis dinámico implícito. Para problemas en donde la relación constitutiva es fuertemente no lineal (que dificulta la convergencia de los algoritmos iterativos) y con la presencia de concentraciones de tensiones significativas (que requieren un mallado extremadamente fino para ser resueltas con precisión), se suele optar por soluciones dinámicas explícitas, con el consiguiente aumento del costo computacional [75, 76].

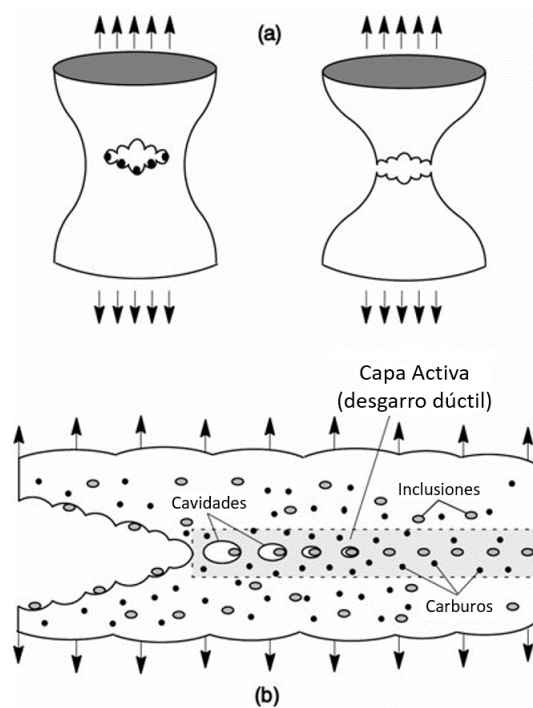


Figura 1.4: Modelo de fractura dúctil. a) Nucleación y crecimiento de microcavidades en un espécimen de tracción. b) Camino esquemático de una fisura en crecimiento.

Los casos de fisuras producto de los procesos de LOCA, o casos de PCMI con grandes rampas de potencia, como sucede en el caso de un RIA, ingresan en esta última categoría y requieren el uso de métodos de los llamados de aproximaciones locales, en donde es necesario determinar un criterio local de falla y no se impone de antemano ninguna distribución de tensiones. Por el contrario, el campo de tensiones es desconocido a priori y forma parte de la solución del problema. Se considera que la propagación de la fisura acontece cuando el estado mecánico en su extremo alcanza una determinada condición crítica.

Aplicar la mecánica de daño resulta en considerar la degradación que experimenta el material al ser sometido a condiciones severas. Las relaciones constitutivas incorporan una pérdida de capacidad resistente controlada por parámetros que cuantifican el nivel de daño en el material. Esto implica el tratamiento diferenciado de la zona donde nuclea y propaga la fractura (a priori desconocida y cuya determinación es parte de la solución

buscada) con respecto al resto del sólido.

En el caso de la rotura dúctil, las relaciones constitutivas empleadas tratan de reproducir la pérdida de resistencia asociada al fenómeno de cavitación anteriormente mencionado. La localización de deformaciones se modela ahora explícitamente como una interfaz de discontinuidad en el campo de desplazamientos, cuya evolución depende de una ecuación constitutiva discreta con ablandamiento en términos del salto relativo a través de la apertura de la fisura y el vector tracción  $T$  en la misma dirección (normal al plano de la fisura) [74,77]. Hillerborg y otros investigadores propusieron que esta ley discreta no lineal con degradación se relacione con el concepto de energía de fractura, y por lo tanto que sea considerada como una propiedad intrínseca del material [78], dando origen de esta forma a un gran número de ecuaciones de tipo tracción-separación. Usualmente, la parte continua o estable del material se modela mediante ecuaciones constitutivas clásicas, siendo muy común el uso de elasticidad lineal para materiales frágiles [73, 74, 77, 79].

Cabe destacar que este tipo de metodologías son óptimas para ser utilizadas en el marco del MEF, pudiendo observar que los trabajos fundacionales de este tipo de métodos parten de reconocer las limitaciones de las teorías clásicas de mecánica de fractura, como la necesidad de un iniciador de fisura o que la distribución de tensiones debe ser esencialmente bidimensional. Partiendo entonces del tipo de funciones de interpolación propuestas como aproximación para la solución dentro del MEF, se idea el incluir el detalle de las zonas de fractura. Para ello se utilizan variantes de los llamados métodos discontinuos de Galerkin, en donde se realiza una generalización de formulaciones débiles que permiten discontinuidades de las incógnitas en el interior del dominio del problema. Con este fin, se restringe la integración a cada subdominio, generando naturalmente términos integrales de límite en las interfaces que implican discontinuidades de salto. El rol de estos términos es hacer cumplir la consistencia y la continuidad del problema desconocido de manera débil, cuando corresponda. Alternativamente, siempre en el contexto de formulaciones de elementos finitos de forma elíptica, se permiten discontinuidades de salto a través de los límites del elemento [80].

El principal atractivo de los métodos de Galerkin Discontinuo radica en su capacidad para representar discontinuidades físicas presentes en la solución del problema de una manera natural. Una de sus desventajas manifiestas es el crecimiento del número de grados de libertad del problema discreto. Sin embargo, esta desventaja puede ser significativamente aliviada, ya que el método es susceptible de ser implementado eficientemente de forma paralela. En esta línea de modelado existen diversas alternativas, de las cuales las utilizadas principalmente dentro del MEF son el método de elementos finitos extendido (X-FEM) y el de zona cohesiva (CZM, del inglés *Cohesive Zone Method*).

### 1.4.1. Método de Elementos Finitos Extendido (X-FEM)

El X-FEM es una técnica numérica que amplía el enfoque del clásico MEF mediante el enriquecimiento del espacio solución para ecuaciones diferenciales con funciones discontinuas [81, 82]. Es una aproximación útil para soluciones con discontinuidades fuertes en pequeñas partes del dominio computacional que se está analizando, como discontinuidades y singularidades, y posee gran velocidad de convergencia. En general, una sola malla es suficiente para modelar y capturar la evolución de las interfaces y grietas de materiales en dos y tres dimensiones [83-85].

El concepto principal de este método es considerar la presencia y avance de una fisura en una malla usual, frecuentemente no estructurada, y enriquecer la zona de interés mediante polinomios interpolantes que contemplen en su descripción analítica la presencia de las discontinuidades sobre el dominio [85]. De esta forma, no se requiere modificar la malla original como en los casos clásicos anteriormente mencionados cuando se produce un avance de fisura, sino que el camino virtual observado numéricamente se puede seguir a través del agregado de las funciones interpolantes adecuadamente elegidas. Con el X-FEM, la malla clásica solo necesita solaparse con la geometría del frente de la grieta y no necesita alinearse con ella. La combinación lineal se complementa con las funciones de enriquecimiento, que deben capturar el salto en el campo de desplazamiento a través de la fisura. Es posible simular esto a través de la identificación de nodos adicionales enriquecidos y una nueva construcción para la función de enriquecimiento, lo que resulta un proceso mucho más simple que mallar nuevamente el dominio reiteradas veces a lo largo de la simulación.

Para el enriquecimiento, se utilizan funciones especiales que añaden grados de libertad adicionales a la aproximación estándar de elementos finitos y permiten que la geometría de las fisuras sea independiente de la malla. Los nodos añadidos y las funciones de forma asociadas a estos, incorporan en el modelo las discontinuidades que introduce la fisura, pudiendo ser una discontinuidad fuerte en el caso de que la fisura haya separado el material, o una débil en el caso de que la nucleación de las cavidades se encuentre en una instancia intermedia. De igual modo, los nodos agregados al extremo de la fisura conllevan en sus funciones de forma las soluciones asintóticas típicas de los campos de tensiones [86-88].

Resulta esencial para el método que las funciones de forma enriquecidas capturen los fuertes gradientes de deformación y tensión que se producen en la zona circundante al extremo de la fisura. Alternativamente, puede utilizarse dentro de X-FEM un procedimiento que adapte la malla cerca del frente de avance de la grieta. Este procedimiento de optimización se adecúa perfectamente al MEF, en el cual refinar la malla en las zonas de mayor exigencia numérica es una de las ventajas más destacadas del método (Figura 1.5). Por otro lado, la construcción de funciones analíticas que describan adecuadamente las discontinuidades generadas por el avance de la fisura es crucial para garantizar el buen comportamiento del modelo. Se utilizan funciones basadas en modelos cohesivos [82, 89],

discontinuas tipo escalón de Heaviside para discontinuidades fuertes [82] o distintas leyes continuas que simulan el crecimiento del daño [85, 90, 91].

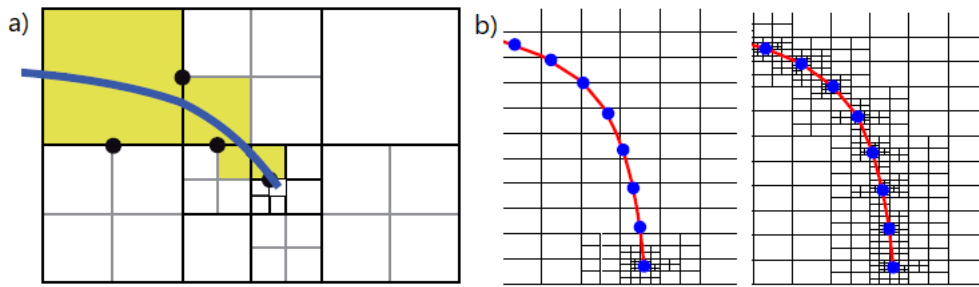


Figura 1.5: Ejemplos de mallas aplicando X-FEM. a) Los elementos atravesados por la fisura (coloreados) son enriquecidos. b) Esquemas de refinación de malla al propagar la fisura.

#### 1.4.2. Modelo de Zona Cohesiva (CZM)

En el CZM, el material continuo se puede describir con una ley constitutiva propia del problema a resolver, por ejemplo, plasticidad de Von Mises con grandes deformaciones [45]. Elementos cohesivos se introducen entre las interfaces de la malla original. Estas regiones interfaciales, a través de las cuales se pueden propagar las fracturas, también permiten la descripción de una distribución de presiones determinada en general por fluidos, sean líquidos o en nuestro caso gases, que contribuyen a la propagación de la fisura (Figura 1.6) [92, 93].

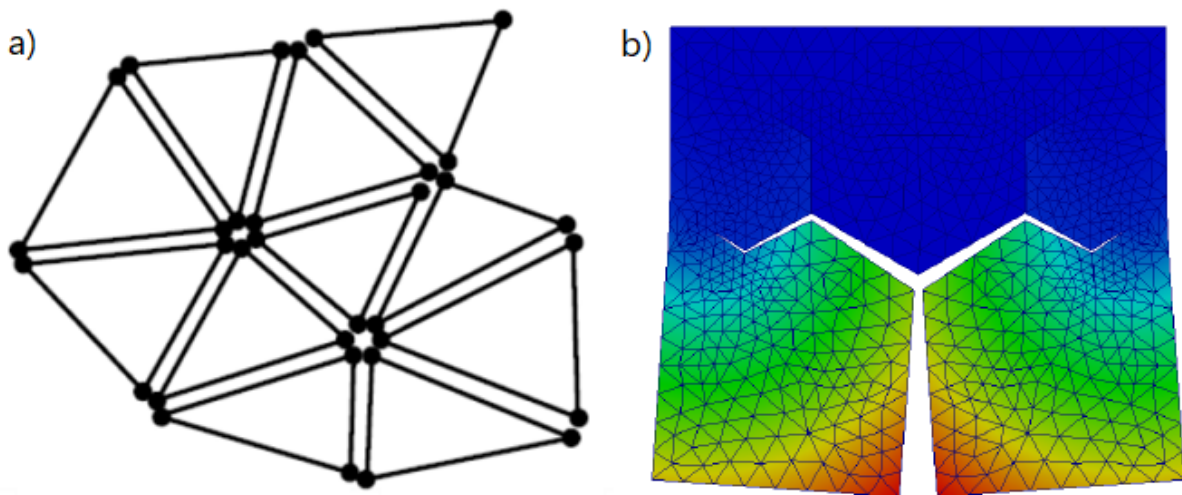


Figura 1.6: a) Esquema de una malla con elementos finitos separados por elementos cohesivos de interfaz. b) Ejemplo de propagación de fractura por presurización de fluidos.

El método requiere determinar un criterio de iniciación, para comenzar la fisura, en conjunto con una ley que describa su evolución relacionada con las tensiones entre sus caras (Figura 1.7) [93].

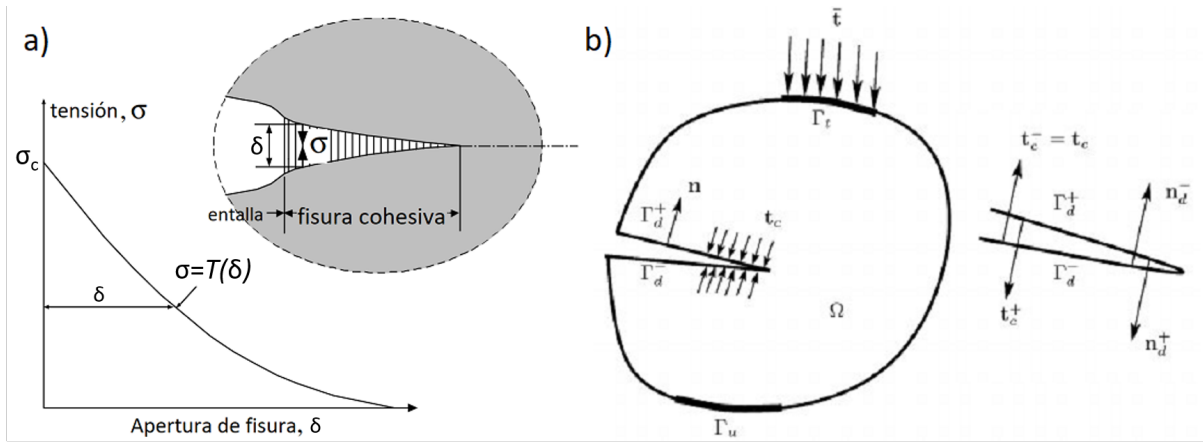


Figura 1.7: a) Generalización de la curva cohesiva de ablandamiento. b) Esquema de fisura cohesiva en un cuerpo bidimensional.

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot \bar{\sigma} + f^\Omega &= \rho_0 \frac{d^2 u}{dt^2} && \text{en } \Omega \\
 n \cdot \bar{\sigma} &= t && \text{en } \Gamma_t \\
 u &= u_0 && \text{en } \Gamma_u \\
 n_d^+ \cdot \bar{\sigma} &= t_c^+ ; n_d^- \cdot \bar{\sigma} = t_c^- && \text{en } \Gamma_d
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

En el conjunto de Ecuaciones 1.2,  $\bar{\sigma}$  es el tensor de tensiones,  $u$  el campo de desplazamientos y  $f^\Omega$  representa fuerzas volumétricas mientras que  $t$  representa las tensiones fijas sobre el dominio o sobre la fisura ( $c$ ). En forma débil, la ecuación queda construida del siguiente modo:

$$\int_{\Omega} (\rho_0 \ddot{u} + \bar{\sigma} : \nabla u) d\Omega + \int_{\partial\Omega_c} \delta T(\delta) d\Gamma_c = \int_{\Omega} f^\Omega u d\Omega + \int_{\Gamma} t u d\Gamma + R \tag{1.3}$$

Donde  $\delta$  representa el salto en la discontinuidad  $d\Gamma_c = \Gamma_{c+} - \Gamma_{c-}$  y  $T(\delta)$  es la función de tensión del elemento cohesivo. El dominio  $\Omega$  describe el volumen representativo,  $\Gamma$  su superficie y  $\partial\Omega_c$  la superficie de la potencial fisura.

Esta formulación posee varias características que conviene destacar para clarificar conceptos:

- Expresa la Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento en la cual, en la primera integral del primer miembro de la ecuación, aparece la doble derivada en el tiempo del vector desplazamiento multiplicada por la densidad.
- Tanto la primera integral del primer miembro como aquellas que componen el segundo miembro, son idénticas a las utilizadas en el caso continuo y no presentan variación con respecto al análisis realizado sobre el sistema sin fisuras.
- La segunda integral del primer miembro solo se evalúa en los elementos cohesivos y suma al sistema un término que da cuenta de la discontinuidad.

d) La función analítica  $T(\delta)$  es conceptualmente idéntica a la utilizada en el método de X-FEM, ya que su objetivo es dar cuenta del grado de discontinuidad que existe dentro del dominio, sea una discontinuidad fuerte o débil y su correspondiente evolución. Posee un valor variable, que dependerá del tipo de física que deseemos tratar, sea material frágil [94], dúctil [95] o considere grandes desplazamientos [96], por mencionar algunos ejemplos. En general, se puede hallar una batería de funciones en la literatura para esta función [77-80,92-101].

Dadas las características de los problemas de fractura que se suceden en vainas de barras de combustibles nucleares, el método de zona cohesiva presenta ventajas de implementación y predicción que lo vuelven óptimo para el desarrollo de los modelos de fisura expuestos en la presente tesis.

## 1.5. Modelo cohesivo para describir el contacto entre superficies

El fenómeno de contacto entre superficies puede causar una considerable sollicitación mecánica para los cuerpos involucrados, particularmente para la vaina en los casos de PCMI. Esta interacción es inducida por una mayor temperatura en la pastilla, que cuenta con una mayor dilatación térmica junto al incremento por *swelling*, y la concomitante interacción mecánica de la vaina por el *creep* debido a la alta presión externa. Este suceso resulta de relevancia en diversas instancias y para diferentes condiciones de operación. Para quemados bajos y reactores que operan con las llamadas vainas colapsables, como los CANDU [102], el PCMI es crucial desde los primeros instantes de irradiación. En los reactores PWR y BWR, la interacción puede ocurrir cerca del final de la vida de la barra en el reactor [103], especialmente durante rampas de potencia transitorias [104]. El PCMI también es pertinente en escenarios de alto quemado, en los cuales el combustible contiene cantidades significativas de átomos de gases de fisión en su matriz y la formación de burbujas gaseosas, inducida por la difusión térmicamente activada de los átomos de gas, es capaz de causar una magnitud considerable de *swelling* en el combustible [105].

En la versión del código previa a esta tesis (2.0), la cual trataba únicamente dominios en dos dimensiones con simetría de revolución, el código utilizaba el algoritmo de multiplicadores de Lagrange [11] para resolver el fenómeno de contacto entre pastilla y vaina. Este método requiere el ensamblado de un sistema variable, agregando nuevas ecuaciones para aquellos nodos que entran en contacto. Las nuevas ecuaciones modifican las propiedades de la matriz del sistema, la cual deja de ser diagonal dominante o pierde su simetría si se intercambian filas. De manera adicional, el error introducido en las sucesivas iteraciones hasta alcanzar la convergencia causaba que el problema fuera inestable y costoso desde el punto de vista computacional.

Después de estudiar en detalle la dinámica y el funcionamiento de los elementos cohesivos, comprendimos que era factible aplicarlos a predecir el contacto entre superficies,

con idénticas capacidades y ventajas que para una fisura. La principal diferencia resulta en que, en este caso, la discontinuidad existe desde el comienzo de la historia del problema y desaparece con la sollicitación mecánica. De este modo, desarrollamos un nuevo algoritmo de contacto basado en el CZM, con una ley lineal de contacto apropiada que no altera la matriz de resolución del sistema, resultando más accesible obtener la solución y de mayor facilidad para paralelizar. Además de su implementación para dominios en dos dimensiones, pudimos aplicar este nuevo modelo de contacto a casos tridimensionales, permitiéndonos llevar el código a su nueva versión 3.0. El método anterior dificultaba este avance debido a que, al pasar de dos a tres dimensiones, los obstáculos mencionados se incrementan como consecuencia del aumento de grados de libertad del sistema. De modo complementario, también se utilizó el nuevo modelo para simular el contacto pastilla-pastilla en la pila, permitiendo al usuario considerar una o dos pastillas en el dominio representativo *pastilla-gap-vaina*.

## 1.6. Validación con datos experimentales y numéricos

Dada la complejidad del modelo que buscamos desarrollar, que implica modelar la formación y evolución de fisuras en vainas de Zircaloy sometidas a fuertes gradientes de tensión y temperatura, en donde diversos fenómenos acoplados ocurren en conjunto, el trabajo se divide en etapas bien diferenciadas.

La versión 2.0 del código incluía modelos que dan cuenta de la evolución termomecánica y termoquímica de las vainas [11, 40, 48]. Estos modelos fueron comparados con datos experimentales obtenidos de bases de datos especializadas, como las proporcionadas por la IAEA [106] y la NEA (*Nuclear Energy Agency*, Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos, OECD) [41].

En el [Capítulo 2](#), se detallan los modelos propios de mecánica de fractura desarrollados para la presente tesis, junto con el modelo de contacto derivado de los conceptos de zona cohesiva, un nuevo modelo de crecimiento bajo irradiación para las vainas y el enfoque de solución numérica utilizado. Una vez desarrollados e incluidos en el código, estos se validan de dos formas diferentes. En primer lugar, comparamos los modelos cohesivos, sus funciones de tensión-deformación y su comportamiento en forma separada. Para ello utilizamos casos provistos por la literatura académica en donde se contrastan con resultados analíticos o numéricos provistos por otros códigos [73, 74, 76-80, 92-101, 107] ([Capítulo 3](#)). Posteriormente, los modelos son aplicados a geometrías de mayor similitud a aquellas de nuestro interés, principalmente geometrías tubulares con fisuras axiales. En este caso, se compara con resultados experimentales [35, 108-110] ([Capítulo 4](#)).

Finalmente, una vez que dichos modelos se acoplan con los que describen el comportamiento termomecánico y termoquímico de una vaina, volvemos a recurrir a los experimentos provistos por las bases de datos de la IAEA o la NEA, esta vez abocándonos a

aquellos relacionados a procesos de accidente, es decir los contenidos en proyectos como FUMAC [42,43] o similares, los de la serie IFA-650 [111,112] o ensayos que buscaron describir el comportamiento de vainas frente a fuertes rampas de potencia y PCMI [113-118] (Capítulo 5 y Capítulo 6).

## 2. Métodos y modelos

### 2.1. Modelo de Zona Cohesiva para fisuras

El concepto de Zona Cohesiva, concebido por [58, 77, 119] entre otros, considera la fractura como un fenómeno gradual en el cual se produce una separación entre dos superficies virtuales adyacentes, a lo largo de una extensión del extremo de la fisura (zona cohesiva). Esta separación es resistida por la presencia de fuerzas cohesivas que se plasman en leyes de tracción-separación, vinculando el mecanismo microestructural de falla al campo de deformación del continuo.

Mientras que una fisura convencional en el marco de la mecánica de fractura clásica no cuenta con transmisión de fuerzas entre las superficies que la encierran, la discontinuidad virtual descrita por la zona cohesiva es un campo activo de tensión interactiva entre las superficies virtuales. Las tracciones entre las potenciales superficies de fisura ejercen una resistencia tanto a la formación como a la propagación de las grietas, por lo que el modelo puede describir el proceso completo de fractura, sin requerir un iniciador (necesario en los modelos clásicos de mecánica de fractura). Las variaciones en la tracción cohesiva reflejan las modificaciones en la estructura atómica del material al ser sometido a tensiones y/o deformaciones. Esta fuerza se incrementa hasta una distancia crítica de separación de las superficies virtuales, luego de la cual disminuye gradualmente. Al anularse las tracciones, las superficies cohesivas se separan formando una fisura macroscópica real.

El estado de tensiones entre las superficies cohesivas evoluciona de acuerdo con una ley de ablandamiento del material, llamada ley cohesiva o de tracción-separación ( $T(\delta)$ ). Existen diversas leyes que pueden ser aplicadas dependiendo de las características del material y el contexto en el que se encuentre, descritas en detalle en la [Subsección 2.1.1](#). Independientemente de la ley que se utilice, los parámetros principales que la componen son la tensión máxima  $\sigma_c$  o  $\tau_c$  (en dirección normal o tangencial, respectivamente) y la distancia crítica de separación  $\delta_c$ . Siguiendo a [120, 121], se puede establecer una equivalencia entre la teoría de Griffith de propagación de fisuras basada en energía [122] y el modelo cohesivo de Barenblatt [77], siempre que la densidad de energía superficial cohesiva sea igual a la resistencia a la fractura, usualmente denotadas como  $\gamma$  y  $\gamma'$  respectivamente. De esta forma, la densidad de energía superficial para la zona cohesiva se puede calcular integrando la ley cohesiva ([Ecuación 2.1](#)) que, a su vez, puede ser utilizada para compararse con el valor crítico establecido para el material (considerando parámetros como la temperatura y la geometría). Adicionalmente, permite calcular el factor de intensidad de tensiones crítico, frecuentemente simbolizado como  $K_{IC}$  para el modo  $I$  de fractura ([Figura 2.1](#)), donde la separación de las superficies virtuales es en dirección normal ( $n$ ) al plano de fisura ([Ecuación 2.2](#)).

$$\gamma = \gamma' = \frac{1}{2} \int_0^\infty T_n(\delta_n) d\delta_n \quad (2.1)$$

$$K_{IC} \propto \sqrt{\pi E' \gamma} \quad (2.2)$$

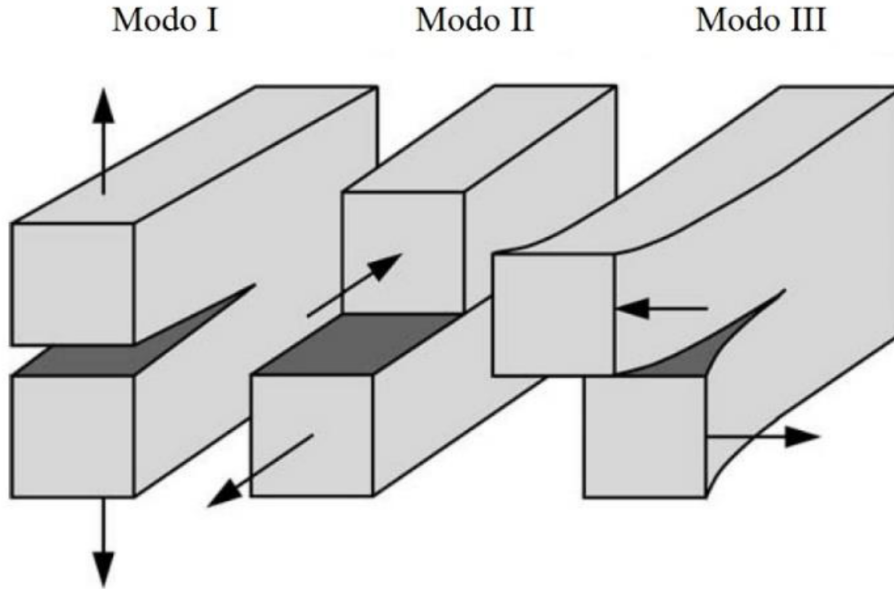


Figura 2.1: Esquema de los modos de fractura. Modo I: apertura. Modo II: cizalla. Modo III: rasgado.

### 2.1.1. Leyes cohesivas para fisura

Numerosas leyes han sido desarrolladas produciendo diversas formas para la función de tracción-separación de modelos cohesivos, de modo tal que describan con precisión el comportamiento del cuerpo de acuerdo a su composición, geometría y condiciones a las que se encuentra sometido (temperatura, atmósfera, corrosión, por mencionar algunos ejemplos). La ley cohesiva a aplicar puede ser de tipo acoplada, en donde los desplazamientos normales y tangenciales son considerados en conjunto para todas las direcciones de la tracción, usualmente utilizada para casos de fractura en modo mixto (*mixed mode*). Por el contrario, se suele aplicar un esquema desacoplado cuando la fisura ocurre con un modo predominante, donde cada componente de tracción solo es afectada por el desplazamiento en su dirección.

Otra categorización que puede hacerse de los enfoques cohesivos, principalmente en casos de materiales frágiles, da lugar a leyes intrínsecas y extrínsecas (Figura 2.2). La primera de ellas incluye un endurecimiento inicial con pendiente creciente (respuesta elástica inicial) hasta alcanzar el valor máximo, luego del cual se produce el ablandamiento hasta que la tensión desaparece, habiéndose formado la fisura. Una desventaja prominente de estas funciones es que el comportamiento elástico inicial de la zona cohesiva altera la respuesta elástica efectiva del material antes de la formación de la fractura, causando una

ductilidad artificial. Para reducir este efecto secundario, se puede incrementar la pendiente inicial elástica de la ley cohesiva, lo que conlleva a restricciones severas para procurar un paso de tiempo estable. Por el contrario, una ley extrínseca no cuenta con endurecimiento, sino que su respuesta inicial es rígida. La zona cohesiva no actúa mientras no se alcance un determinado criterio de inicio de fractura, luego del cual se sucede el ablandamiento, lo que evita la ductilidad artificial. A pesar de sus ventajas, las leyes extrínsecas también presentan dificultades tanto físicas como numéricas. Pueden producir ductilidad artificial ante cargas compresivas luego de iniciada la formación de una fisura, al tiempo que introducir los elementos cohesivos sobre la marcha al alcanzar el criterio de falla es algorítmicamente complejo y dificulta la escalabilidad del código para ser implementado en paralelo en un conjunto de nodos de cómputo [94].

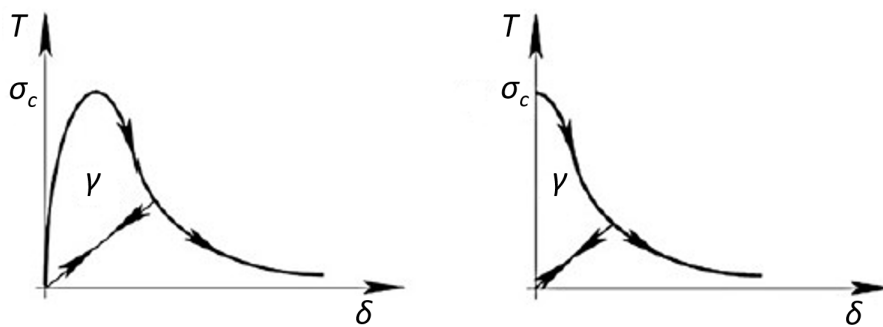


Figura 2.2: Esquema de leyes cohesivas intrínseca (izquierda) y extrínseca (derecha).

En la [Figura 2.3](#) se presentan normalizadas algunas de las funciones de mayor notoriedad que han sido utilizadas en modelos cohesivos. Las funciones del tipo puro ablandamiento bilineal ([Figura 2.3a](#)) se suelen utilizar para cerámicos como el concreto [123,124]. Funciones del tipo bilineal ([Figura 2.3b](#)) son aplicadas a materiales frágiles y compuestos [125-127]. Para materiales que presentan deformación plástica con propagación de fisura estable (no catastrófica), usualmente se eligen formas como la trapezoidal ([Figura 2.3c](#)) o su versión suavizada ([Figura 2.3d](#)) que dan cuenta de la ductilidad del material [128,129]. Los casos que tratan metales pueden hacer uso de estas últimas o aplicar funciones de la forma polinómica cúbica ([Figura 2.3e](#)) o exponencial ([Figura 2.3f](#)) [130,131].

### 2.1.2. Tratamiento de los elementos cohesivos en DIONISIO

El nuevo modelo de fractura incluido en DIONISIO genera las interfaces virtuales dentro de la malla antes de dar inicio a la historia de potencia simulada, permitiendo al usuario definir su tamaño y posición. En aquellos casos excepcionales en los que existe un criterio de falla conocido, como la condición de *burst* en ensayos controlados de explosión de vainas, se permite la inserción de la zona cohesiva en el momento y la ubicación en los cuales se alcanza esta condición.

Para incorporar los elementos cohesivos, se realiza una búsqueda de todas las caras de elementos finitos (EF) que se encuentren en su totalidad dentro de la delimitación

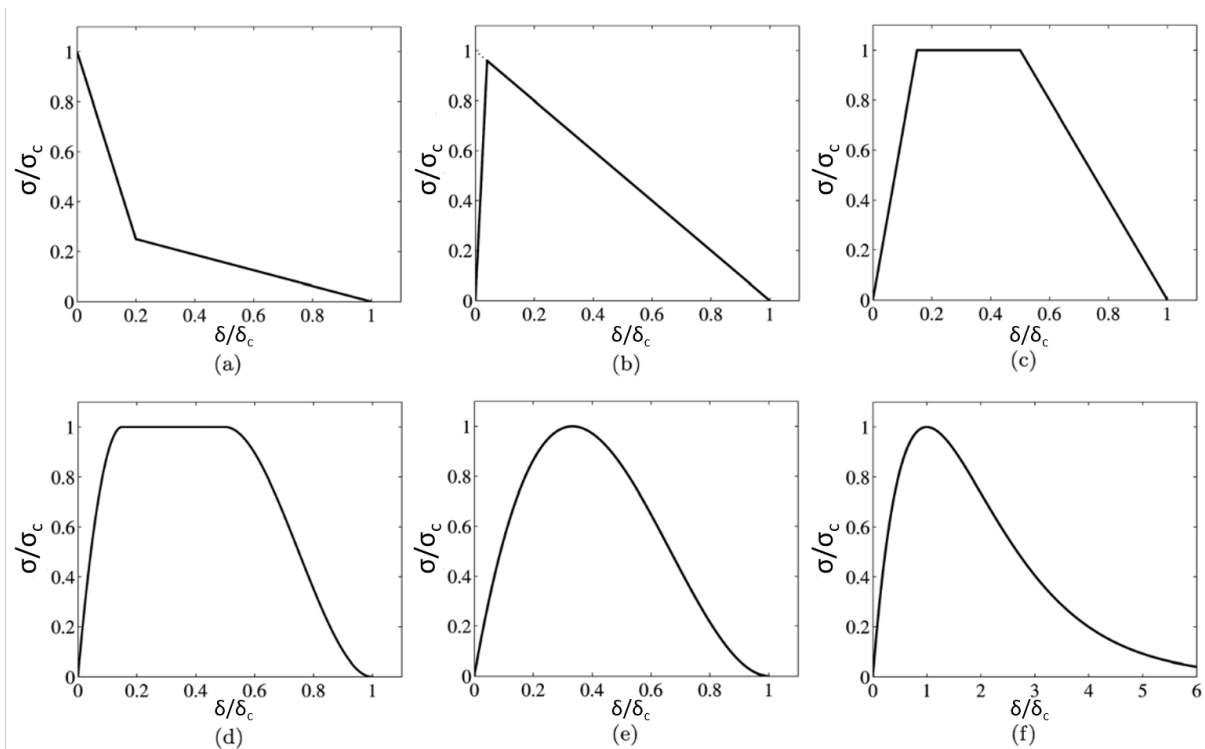


Figura 2.3: Leyes de tracción-separación: (a) ablandamiento bilineal; (b) bilineal; (c) trapezoidal; (d) trapezoidal suavizada; (e) polinómica cúbica; (f) exponencial.

del usuario (eximiendo a aquellas que componen el contorno del cuerpo). A continuación, para cada cara, se duplican los nodos que la componen, desplazándolos una distancia infinitesimal definida por el código, pero rectificable por el usuario, como se muestra en la [Figura 2.4](#). Adicionalmente, se actualiza la conectividad de todos los elementos intervinientes, incluyendo a los EF que demarcan el elemento cohesivo creado, otros EF que comparten alguno de los nodos que fueron modificados y las caras que darán lugar a elementos cohesivos que aún no han sido creados (ya que alguna de las caras de un futuro elemento cohesivo adyacente puede haber sido creada con el actual elemento cohesivo). Es importante destacar que, al modificar efectivamente la malla del dominio, las condiciones de contorno deben ser ajustadas para considerar los nuevos nodos que fueron agregados.

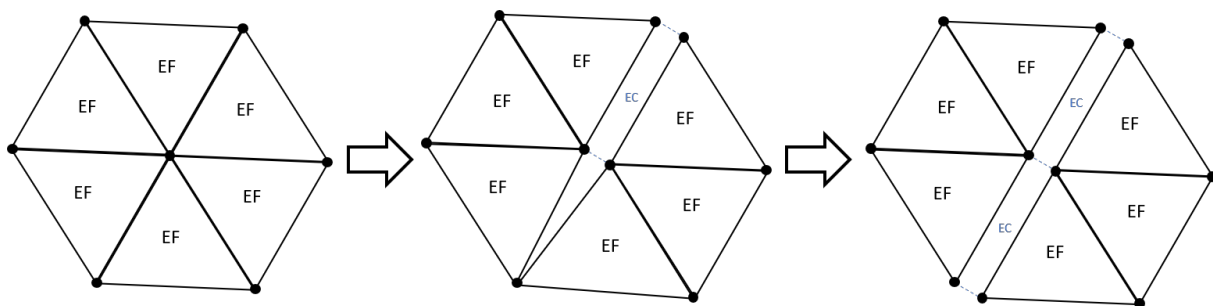


Figura 2.4: Ejemplo del proceso de inserción de elementos cohesivos en una malla en dos dimensiones.

Al considerar un dominio tubular con una malla estructurada en tres dimensiones, DIONISIO ordena la conectividad de los EF empezando por la cara de menor coordenada

axial, avanzando primero por la coordenada radial para continuar por la coordenada angular. Por otro lado, los elementos cohesivos requieren considerar el desplazamiento relativo entre las caras separadas por la dirección normal al plano de la fisura, es decir, el plano de la cara original que generó el elemento cohesivo. Para una fisura axial que atraviesa el espesor de la vaina, estas son las caras del elemento cohesivo normales a la dirección angular. Esta discrepancia requirió contar con una doble conectividad para los elementos cohesivos (Figura 2.5), donde una de ellas sigue las reglas originales del mallado para no alterar cálculos como la transmisión de calor dentro de la vaina a través de la interfaz virtual (que anterior a la formación de la fractura, representa parte del material) y la otra se encuentra ordenada de forma tal que separa las caras del elemento cohesivo paralelas al plano de fisura.

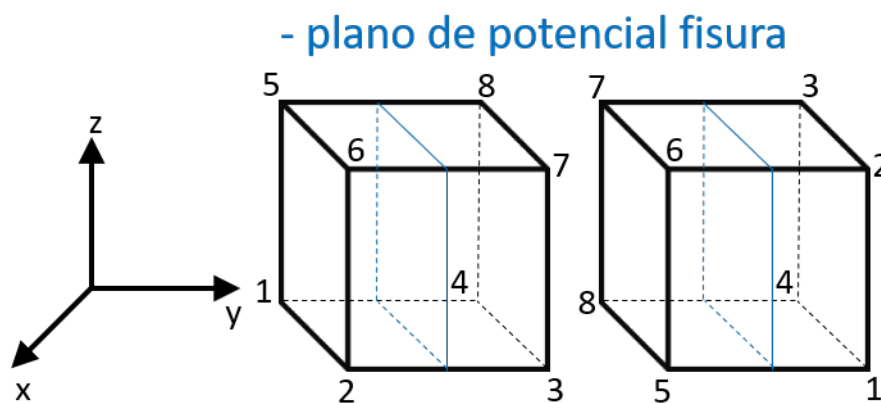


Figura 2.5: Ejemplo de la numeración original (izquierda) y la numeración requerida por un elemento cohesivo de fisura axial (derecha).

A partir de todos los elementos cohesivos creados, se generan estructuras llamadas “caminos cohesivos”, en donde se consideran todos los conjuntos de elementos cohesivos conectados entre sí que atraviesan el espesor de la vaina; en otras palabras, los posibles caminos que podría tener una fisura que haga fallar la barra. En cada paso de la simulación, se evalúan estos caminos y en caso de que exista alguno de ellos donde todos los elementos han dado lugar a una fisura, el código notifica al usuario el momento y las condiciones en las que se produjo la falla de la contención que provee la vaina.

Tanto en un plano bidimensional como en un espacio de tres dimensiones, los elementos cohesivos tienen una ubicación potencialmente aleatoria. Debido a que las fuerzas producidas por cada elemento dependen de las orientaciones de sus caras, una gran cantidad de elementos puede derivar en una complejidad extrema para determinar correctamente el sentido de las tracciones. A partir de esta dificultad, el primer paso del algoritmo para estos elementos consiste en rotar el elemento hasta una posición ideal en la que la arista compuesta por el primer y segundo nodo (1-2) resulte paralela al eje  $x$  y la cara 1-2-3-4 del elemento coincida con el plano  $xy$ . Luego se calculan las tracciones en esta posición ideal, donde aquellas en dirección normal coinciden inequívocamente con el eje axial  $z$ ,

para finalmente rotarlas en el sentido inverso al que fue girado el elemento original.

Para realizar esta rotación en el espacio, en primer lugar, se calcula el vector normal al plano que forman la arista 1-2 y el eje  $x$ . En conjunto, se obtiene el ángulo ( $\alpha$ ) entre la misma arista 1-2 y el eje  $x$ , para así poder rotar el elemento alrededor de la normal calculada, en la cantidad determinada por  $\alpha$  (Figura 2.6a). A continuación, se obtiene el ángulo ( $\beta$ ) que queda formado entre la cara 1-2-3-4 y el plano  $xy$  (Figura 2.6b), rotando el elemento en esta cantidad para aproximarse a que la dirección normal a la cara 1-2-3-4 sea paralela al eje  $z$  (Figura 2.6c). En dos dimensiones, basta con obtener el ángulo entre la arista 1-2 y el eje  $x$  y rotar el elemento esta cantidad para que ambos resulten paralelos, y la normal a la arista 1-2 sea paralela al eje  $y$ .

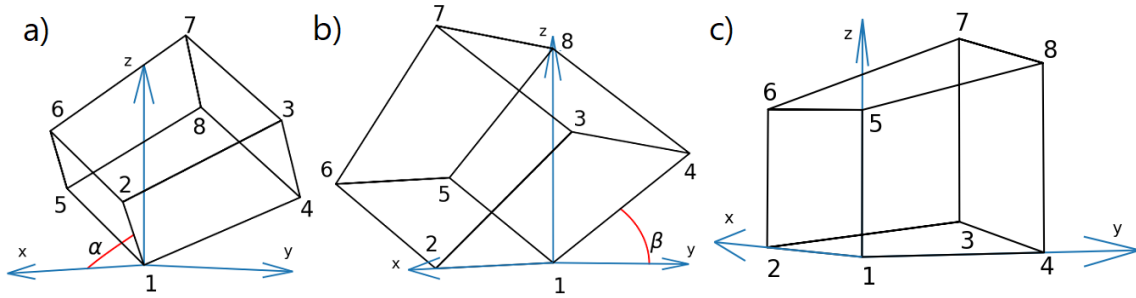


Figura 2.6: Representación visual de las rotaciones para un elemento cohesivo genérico. a) Posición original y primera rotación en  $\alpha$ . b) Segunda rotación en  $\beta$ . c) Posición final.

Una vez que el elemento se encuentra en la posición ideal, se promedian los pares de nodos 1-5, 2-6, 3-7 y 4-8 para obtener una superficie media (para un cuadrilátero lineal, los pares 1-4 y 2-3 permiten obtener el segmento medio). Esta nueva superficie media no necesariamente será plana ni paralela al plano  $xy$ , por lo cual se transforman los desplazamientos globales de los nodos ( $\tilde{U}$ ) en desplazamientos locales ( $\tilde{u}$ ), mediante tres matrices de rotación  $R$  (una respecto de cada eje de coordenadas) de  $24 \times 24$  elementos, teniendo tres grados de libertad para ocho nodos (Ecuación 2.3). La submatriz  $R'$  para cada  $R$  se define en la Ecuación 2.4, siendo  $\theta$  el ángulo entre  $\tilde{U}$  y  $\tilde{u}$  respecto de cada eje.

$$R = \begin{bmatrix} R' & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & R' & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R' & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & R' \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

$$R'_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_x & \sin \theta_x \\ 0 & -\sin \theta_x & \cos \theta_x \end{bmatrix}; R'_y = \begin{bmatrix} \cos \theta_y & 0 & -\sin \theta_y \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta_y & 0 & \cos \theta_y \end{bmatrix}; R'_z = \begin{bmatrix} \cos \theta_z & \sin \theta_z & 0 \\ -\sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

A partir de los desplazamientos nodales en coordenadas locales obtenidos, se calcula la distancia entre los nodos del elemento original en posición ideal ( $\tilde{\Delta}$ ) en las direcciones



$$N = \begin{bmatrix} N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & 0 & N_1 & 0 & 0 & N_2 & 0 & 0 & N_3 & 0 & 0 & N_4 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$\tilde{\delta} = N\tilde{\Delta} = N L \tilde{u} = N L R_z R_y R_x \tilde{U} = B \tilde{U} \quad (2.8)$$

La ley cohesiva desarrollada *ad hoc* y utilizada dentro del código DIONISIO, es una aproximación bilineal de la forma polinómica cúbica. Las curvas polinómicas o exponenciales son apropiadas para casos que tratan metales como los que componen las vainas (Zircaloy, Zr-1 %Nb) reproduciendo su comportamiento dúctil con gran potencial de deformación plástica a las temperaturas de operación. Sin embargo, cuentan con una gran cantidad de parámetros que dificultan realizar un ajuste apropiado derivado de resultados experimentales de propiedades complementarias. Por este motivo, se optó por utilizar una aproximación bilineal, simplificando la cantidad de parámetros y obteniendo una curva cuya pendiente elástica inicial resulta menos abrupta que la de la curva bilineal esquematizada en la [Figura 2.3b](#).

$$T_n(\delta_n) = \begin{cases} \frac{\sigma_y \delta_n}{\delta_c} & , \delta_n \leq \delta_c \\ -\frac{\sigma_y \delta_n}{f_{ab} \delta_c} + \frac{\sigma_y (f_{ab} + 1)}{f_{ab}} & , \delta_n > \delta_c \end{cases} \quad (2.9)$$

En la [Ecuación 2.9](#) se plasma la función aplicada a la tracción en sentido normal al plano de la fisura, donde  $\sigma_y$  es la tensión de fluencia o *yield* del material ([Tabla 1.2](#)), que depende de la temperatura;  $\delta_c$  es la distancia crítica de separación de las superficies virtuales, que coincide con el punto de máxima fuerza cohesiva ( $\sigma_y$ ) y depende de la geometría y el límite de deformación elástico;  $\delta_n$  es la distancia instantánea de separación de las superficies en la dirección normal (en el caso de una fisura axial en la vaina, la dirección angular) y  $f_{ab}$  es un factor adimensional que establece la tasa de ablandamiento hasta la falla en relación con la pendiente elástica inicial y depende del material y la temperatura. En las direcciones tangenciales, se aplica la misma función con relación al deslizamiento ( $\delta_t$ ), multiplicada por un coeficiente  $\mu$ . Para Zircaloy en condiciones normales de operación, se han definido estos dos factores como  $f_{ab} = \mu = 1$ . La separación crítica se ha establecido como  $\delta_c = 0,002 \times 2\pi r/q$ , donde  $r$  es el radio medio y  $q$  la cantidad de elementos en los que se discretiza la circunferencia de la geometría tubular. En aquellos casos en los que las definiciones de  $f_{ab}$ ,  $\delta_c$  o  $\mu$  difieran, se indican explícitamente sus valores.

## 2.2. Modelo de Zona Cohesiva para contacto

Bajo los mismos conceptos que los desarrollados para reproducir la formación y evolución de fisuras, el CZM puede ser aplicado para representar las fuerzas que resultan del contacto entre dos superficies. Con este fin, el espacio entre las superficies (sea el *gap* entre

pastilla y vaina o la distancia infinitesimal que pudiera haber entre dos pastillas apiladas) puede ser tratado como una separación virtual. Las funciones que definen el comportamiento de tracción-separación involucran leyes particulares que no tienen efecto mientras las superficies se encuentran separadas. Estas determinan el momento en el que los cuerpos comienzan a experimentar el contacto y definen la evolución de las fuerzas de repulsión y rozamiento en función de la distancia de interpenetración y los deslizamientos [132].

$$T_n(\delta_n) = \begin{cases} E' \delta_n, & \delta_n \leq 0,0 \\ 0,0, & \delta_n > 0,0 \end{cases} \quad T_{t1}(\delta_{t1}) = T_{t2}(\delta_{t2}) = \begin{cases} E' \delta_t \mu, & \delta_n \leq 0,0 \\ 0,0, & \delta_n > 0,0 \end{cases} \quad (2.10)$$

La Ecuación 2.10 contiene las funciones lineales de tracción en direcciones normal y tangenciales, donde  $E'$  representa el máximo coeficiente de rigidez entre ambos cuerpos en contacto y  $\mu$  es el coeficiente de fricción entre ambas superficies. Sus formas quedan exhibidas en la Figura 2.7. Se puede notar que las funciones solo influyen en el caso de que la distancia normal entre ambos cuerpos sea igual o menor que cero. En caso contrario, no tienen incidencia en el comportamiento del resto de los modelos acoplados. El tratamiento numérico de los cohesivos de contacto no difiere de aquel presentado para los elementos de fisura, aplicando cada uno su respectiva ley que describe las fuerzas involucradas.

Como fue mencionado en la Sección 1.5, este modelo presentó ventajas notables respecto del enfoque utilizado para resolver el contacto pastilla-vaina en la versión 2.0 de DIONISIO mediante multiplicadores de Lagrange. No requiere introducir nuevos nodos ni nuevas ecuaciones que modificarían las propiedades del sistema de ecuaciones (perdiendo la dominancia de la diagonal de la matriz o su simetría), ya que los elementos cohesivos se construyen con los nodos que existen en las superficies de contacto. Asimismo, el modelo provee una respuesta natural en caso de que las superficies se separen luego de estar en contacto y el ciclo de contacto y separación puede ser ejecutado tantas veces como el caso lo requiera.

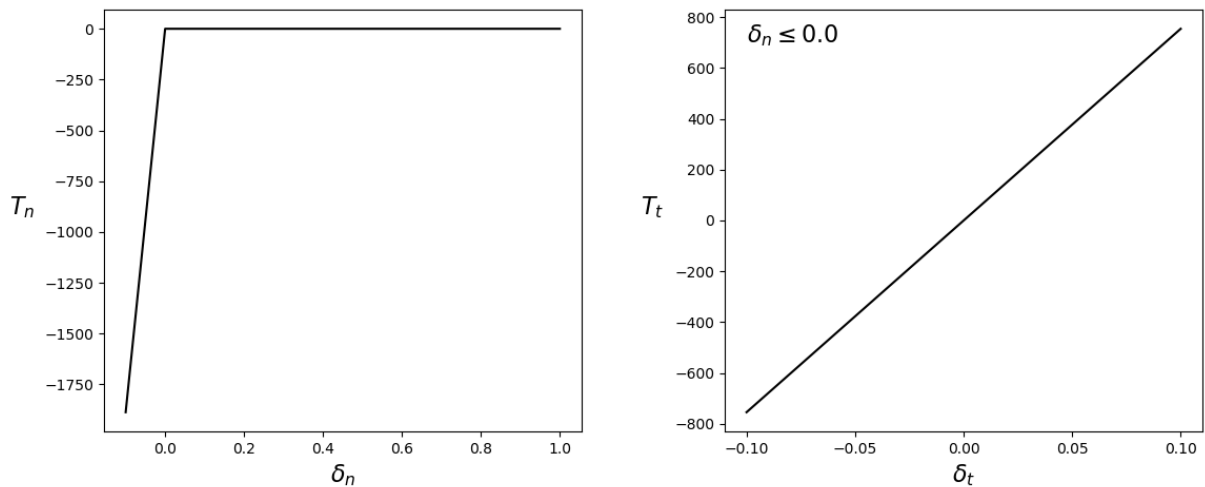


Figura 2.7: Esquema de las leyes de tracción de contacto.

Este desarrollo permitió llevar el código a su versión actual 3.0, en la cual el usuario puede elegir realizar simulaciones con un dominio en tres dimensiones o uno bidimensional con simetría de revolución sobre el eje axial. Si bien el estudio en dos dimensiones posee menor costo en términos de tiempo y exigencia computacional, numerosas situaciones a simular poseen asimetrías que exigen expandir los estudios considerando las tres dimensiones espaciales. Adicionalmente, las capacidades del modelo 3D nos han permitido estudiar el contacto entre dos pastillas, para lo cual el usuario puede elegir entre incluir una o dos pastillas en el dominio *pastilla-gap-vaina*, representativo de cada sector axial. En la [Figura 2.8](#) se observa un ejemplo de elementos cohesivos de contacto insertados en el espacio entre las superficies para los casos de *pastilla-vaina* y *pastilla-pastilla*, coincidiendo con el dominio mostrado en la [Figura 1.3b](#). En el primero de los casos, el *gap* posee un espesor aproximado de  $70\ \mu\text{m}$ . Por otro lado, el espacio entre las pastillas es sumamente pequeño hacia el radio exterior, pero es posible notar que ambas pastillas poseen *dishing* (conca-vidad en el centro de una o ambas caras paralelas). Esto da lugar a una ampliación de la distancia que las separa en la zona cercana al centro radial, produciendo un crecimiento en el espesor de los elementos que ocupan esta zona.

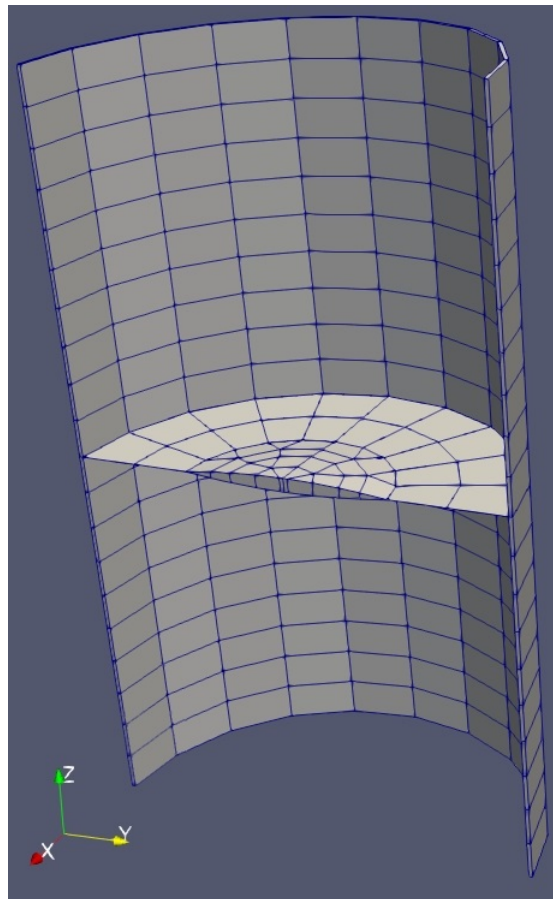


Figura 2.8: Esquema de elementos cohesivos de contacto *pastilla-vaina* y *pastilla-pastilla*.

### 2.3. Crecimiento bajo irradiación de aleaciones base circonio

Uno de los fenómenos físicos que más influyen en el comportamiento de las aleaciones base circonio en situaciones de operación dentro del reactor, como se menciona en la [Sección 1.1](#), es el crecimiento debido a la irradiación neutrónica (IG). Este comportamiento en las aleaciones de Zr debe tenerse en cuenta en las etapas de diseño del núcleo con el fin de mantener la integridad física del reactor, ya que, al sufrir cambios dimensionales sin fuerzas externas, puede presentar problemas de estancamiento o fracturas. Siendo un fenómeno que ocurre a volumen constante, un crecimiento axial excesivo puede derivar en un adelgazamiento del espesor de la barra que la fragilice y propicie su falla. Por este motivo es importante contar con un código que permita predecir el crecimiento en función de las condiciones de operación y las propiedades del material.

Los modelos más difundidos y empleados para el cálculo del crecimiento por irradiación se basan en leyes empíricas sencillas, en general en función de la fluencia de neutrones rápidos, obtenidas a partir de la parametrización e interpolación de datos experimentales. Algunos modelos incluyen la dependencia del factor de textura ( $f$ ), la fracción del trabajado en frío (CW, del inglés *cold work*) y la temperatura ( $T$ ) [[52](#),[133](#)]. Sin embargo, el uso de modelos empíricos tiene restricciones en cuanto al rango de validez de sus predicciones. Se presenta aquí una breve descripción del modelo más reciente de crecimiento inducido por irradiación incluido en DIONISIO, basado en la difusión de defectos puntuales y la generación de lazos de dislocaciones de intersticiales, alcanzando buenos resultados al ser comparado con datos experimentales [[134](#)].

En este modelo, basado en otros desarrollos reportados en la literatura [[135-138](#)] con nuevas consideraciones *ad hoc*, se asume que la migración de defectos puntuales es afectada por sumideros como dislocaciones de borde, lazos de dislocaciones de intersticiales y bordes de grano. El cálculo de concentración de dislocaciones que dependen del CW fue obtenido a partir del ajuste de datos experimentales para considerar tanto casos de material recocido como muestras con diferentes grados de trabajado en frío. La anisotropía de las aleaciones base circonio es incluida a través de los factores de Kearns.

Los coeficientes de difusión para defectos puntuales generados en la red por las sucesivas colisiones con los neutrones se representan mediante una ecuación de Arrhenius ([Ecuación 2.11](#)), donde los subíndices  $v$  e  $i$  indican vacancia o intersticial respectivamente (para todos los términos de este modelo),  $D_{0(v,i)}$  es la constante preexponencial,  $-E_{v,i}^m$  es la energía de migración para cada tipo de defecto,  $k$  es la constante de Boltzmann en  $[eV/K]$  y  $T$  es la temperatura absoluta. La tasa de recombinación de vacancias e intersticiales ( $Re_{vi}$ ), en caso de que se encuentren suficientemente cerca, está dada por la [Ecuación 2.12](#), donde  $C_v$  y  $C_i$  son las concentraciones adimensionales,  $r_{vi}$  es la distancia de recombinación y  $\Omega$  es el volumen atómico del Zr.

$$D_{v,i} = D_{0(v,i)} \exp(-E_{v,i}^m/kT) \quad (2.11)$$

$$Re_{vi} = (4\pi r_{vi}/\Omega)(D_i + D_v)C_v C_i \quad (2.12)$$

En caso de que los defectos puntuales se encuentren dentro del radio de influencia de una dislocación, las vacancias son atraídas por su campo compresivo y los intersticiales por su campo de tracción, considerado mediante los factores definidos en la [Ecuación 2.13](#), donde el subíndice  $l$  corresponde a los lazos,  $r_{md}$  es la media distancia promedio entre dos dislocaciones,  $r_l$  es el radio de un lazo de dislocación,  $a$  es el parámetro de red,  $b$  es el vector de Burgers, considerando el radio del núcleo de la dislocación igual a  $3b$  y el término  $\Delta R$  da cuenta de la mayor distancia de interacción con el campo elástico producida por un intersticial respecto de una vacancia (medido en  $[m]$ ). Aquí  $k_b$  es la constante de Boltzmann en  $[J/K]$  y  $G$  es el módulo de corte del material.

$$\begin{aligned} Z_v &= 2\pi / \ln(r_{md}/3b) \\ Z_i &= 2\pi / \ln(r_{md}/[3b + \Delta R]) \\ Z_{vl} &= 2\pi / \ln(8r_l/3b) \\ Z_{il} &= 2\pi / \ln(8r_l/[3b + \Delta R]) \\ \Delta R &= 0,014ba^3G/k_bT \end{aligned} \quad (2.13)$$

La evolución temporal de la concentración de defectos queda definida en la [Ecuación 2.14](#) para las vacancias y en la [Ecuación 2.15](#) para los intersticiales.  $\dot{K}$  es la tasa de producción de pares de Frenkel (vacancias e intersticiales en iguales proporciones) que resulta del producto de la sección eficaz de captura neutrónica del circonio y el flujo neutrónico rápido;  $\rho$  y  $\rho_l$  son las densidades de dislocación de borde y de lazos de dislocación, respectivamente;  $K_{bgv}$  es la fuerza de sumidero de los bordes de grano para las vacancias, mientras que  $K_i$  es la fuerza de sumidero total para los intersticiales;  $C_v^{eq}$  representa la concentración de vacancias en equilibrio termodinámico;  $f_{el}$  es un parámetro geométrico que depende de las constantes elásticas del material y del tamaño de un lazo de dislocación y  $\varepsilon$  es la tasa de escape de los intersticiales respecto de la zona de daño para formar un nuevo núcleo de lazo.

$$\frac{dC_v}{dt} = \dot{K} - Re_{vi} - (Z_v\rho D_v + K_{bgv}D_v) \times (C_v - C_v^{eq}) - Z_{vl}\rho_l D_v(C_v - C_v^{eq}f_{el}) \quad (2.14)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \dot{K}(1 - \varepsilon) - Re_{vi} - K_i D_i C_i \quad (2.15)$$

Una vez formados, los lazos de dislocación pueden expandirse por la incorporación de intersticiales y contraerse al capturar vacancias liberando intersticiales hacia los nuevos núcleos. La tasa de cambio del radio de un lazo está dada por la [Ecuación 2.16](#). Finalmente, la deformación total del material ( $\dot{\varepsilon}_{tot,j}$ , [Ecuación 2.17](#)) para la dirección  $j$  está compuesta

por el trepado de dislocaciones de borde ( $\dot{\epsilon}_d$ ), los cambios de dimensión y concentración de lazos de dislocación ( $\dot{\epsilon}_l$ ) y la recombinación de defectos puntuales en los bordes de grano ( $\dot{\epsilon}_{bg}$ ), para los cuales  $N_l$  es la cantidad de lazos de dislocación por unidad de volumen y  $f_j$  es el factor de Kearns para la dirección  $j$  que se esté considerando.

$$\frac{dr_l}{dt} = \frac{1}{b}[Z_{il}D_iC_i - Z_{vl}D_v(C_v - C_v^{eq}f_{el})] + \frac{\varepsilon\dot{K}}{\rho_l} \left(1 - \frac{r_l^2}{r_{l0}^2}\right) \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{tot_j} &= (1 - 3f_j) \times (\dot{\epsilon}_d + \dot{\epsilon}_l + \dot{\epsilon}_{bg}) \\ \dot{\epsilon}_d &= \frac{\rho}{2}[Z_iD_iC_i - Z_vD_v(C_v - C_v^{eq})] \\ \dot{\epsilon}_l &= 2\pi bN_l r_l \frac{dr_l}{dt} \\ \dot{\epsilon}_{bg} &= \frac{1}{6}[K_{bg_i}D_iC_i - K_{bg_v}D_v(C_v - C_v^{eq})] \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para resolver las ecuaciones diferenciales acopladas de este modelo se emplearon diferentes métodos numéricos. Para la evolución temporal de los defectos puntuales (Ecuación 2.14 y Ecuación 2.15) se utilizó el método de cálculo de Euler implícito, mientras que para el cálculo de la variación del radio de lazo (Ecuación 2.16) se utilizó el método de Runge-Kutta de cuarto orden [139].

## 2.4. Solución numérica y eficiencia computacional

Tal como se ha establecido en esta tesis, el método numérico principal utilizado en DIONISIO es el Método de los Elementos Finitos, en el cual se transforman las ecuaciones diferenciales que se buscan resolver en sistemas algebraicos de ecuaciones lineales. Estos sistemas se conforman mediante estructuras matriciales que cuentan con características particulares, dado que las matrices son cuadradas, dispersas (ralas, con gran cantidad de elementos nulos), de diagonal dominante y generalmente simétricas. En la Figura 2.9 se muestra un ejemplo de una matriz utilizada en DIONISIO. Se puede observar la dispersión de elementos no nulos, así como la simetría.

Debido al tamaño de estos sistemas, para alcanzar la solución en tiempos razonables deben utilizarse métodos iterativos que además aprovechen las propiedades mencionadas, como el método de gradiente conjugado y otros derivados de este. De este modo, en cada paso temporal discreto se resuelve el sistema de ecuaciones generando soluciones de estado estacionario a lo largo de la simulación, integrando implícitamente el sistema. En estas condiciones la aceleración y la velocidad del sistema son nulas, lo que lleva a la ecuación general de equilibrio (Ecuación 2.18) a simplificarse en la forma de la Ecuación 2.19. En estas ecuaciones  $M$  es la matriz de masa,  $C$  la matriz de amortiguación,  $K$  la matriz de rigidez,  $F$  representa el vector de fuerzas externas,  $R$  los residuos y  $U$ ,  $\dot{U}$  y  $\ddot{U}$  los desplazamientos, velocidades y aceleraciones, respectivamente.

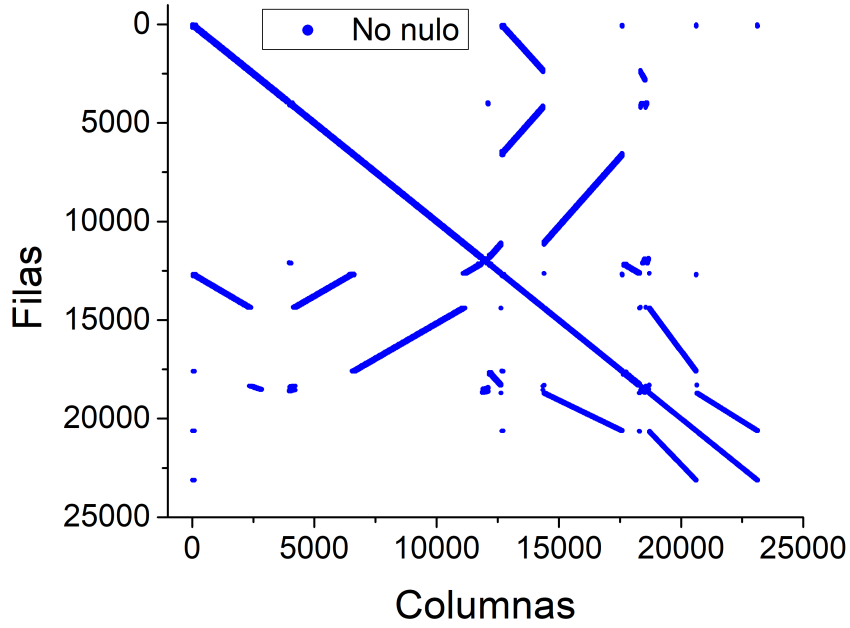


Figura 2.9: Representación de una matriz real utilizada en DIONISIO. Los puntos indican los elementos no nulos.

$$M\ddot{U} + C\dot{U} + KU = F + R \quad (2.18)$$

$$KU = F + R \quad (2.19)$$

Cuando se utilizan elementos cohesivos para representar discontinuidades, existe una alta sensibilidad respecto de los desplazamientos de los nodos del sistema, lo que dificulta aplicar las ecuaciones en estado estacionario. Por este motivo, al incluir una zona cohesiva en el dominio, resulta más efectivo utilizar métodos explícitos de integración resolviendo dinámicamente el sistema. Para ello se integra en pasos discretos buscando satisfacer el equilibrio únicamente en determinados instantes de tiempo, asumiendo una variación de desplazamientos, velocidades y aceleraciones en dicho intervalo  $\Delta t$ . Si bien este tipo de enfoque no siempre presenta estabilidad y tiene un mayor costo computacional, utilizar intervalos de tiempo pequeños permite resolver el sistema incluyendo la zona cohesiva. A partir de la solución hallada en el paso  $t$ , es posible por integración explícita hallar las soluciones en el paso  $t + \Delta t$  directamente. Para hacerlo, seleccionamos el método de las Diferencias Centrales, de sencilla implementación a pesar de ser solo condicionalmente estable. En nuestro caso, la amortiguación dependiente de la velocidad puede ser ignorada y la matriz de rigidez resulta innecesaria [45], lo que simplifica el equilibrio a la segunda ley de Newton, como se muestra en la [Ecuación 2.20](#).

La condición de estabilidad del método determina que el paso de tiempo  $\Delta t$  debe ser menor o igual que un determinado valor crítico  $\Delta t_{cr}$ , relacionado con la máxima frecuencia de vibración del sistema  $\omega_n^{max}$  ([Ecuación 2.21](#)), calculable a partir de los autovalores que se obtienen al resolver el sistema generado por la malla de elementos finitos. Este método se aplica en conjunto con un esquema de relajación dinámica, donde se utilizan pseudo pasos de tiempo, iterando dentro de un instante de tiempo real, que permiten alcanzar

la convergencia de manera uniforme limitando las superposiciones no físicas que pueden llegar a ocurrir en las interfaces cohesivas [76, 80, 94, 140, 141].

$$M\ddot{U} = F + R \quad (2.20)$$

$$\Delta t \leq \Delta t_{cr} = \frac{2}{\omega_n^{max}} \quad (2.21)$$

Como esta metodología posee un alto costo computacional, se implementó una paralelización mediante la interfaz de memoria compartida OpenMP [142], aprovechando las características de los actuales procesadores multinúcleo. Esto permite dividir un conjunto de instrucciones en bloques para que cada uno sea ejecutado por una unidad de cómputo del procesador, compartiendo la memoria disponible. En la [Figura 2.10](#) se muestran resultados de aceleración (*speedup*) en la ejecución para un mismo caso típico con el código DIONISIO en función del grado de paralelización. Se puede notar que la paralelización alcanza una mejora de aproximadamente 3,5 veces respecto de la instancia secuencial. En términos de tiempo nominal, la simulación en geometrías tridimensionales de una barra bajo irradiación en condiciones normales requiere desde unos diez o veinte minutos hasta unas dos o tres horas. Otros casos, como experimentos en condiciones extremas emulando escenarios de accidente, precisan de pasos de tiempo en el orden de los milisegundos y pueden requerir entre doce y veinticuatro horas de ejecución. Estos valores de referencia consideran una computadora de escritorio con un procesador Intel Xeon E3-1240 V6 de 4 núcleos, 8 hilos, con 8 MB de memoria caché y una frecuencia media de 3,7 GHz, junto a 16 GB de memoria RAM de tipo DDR4 a 1200 MHz.

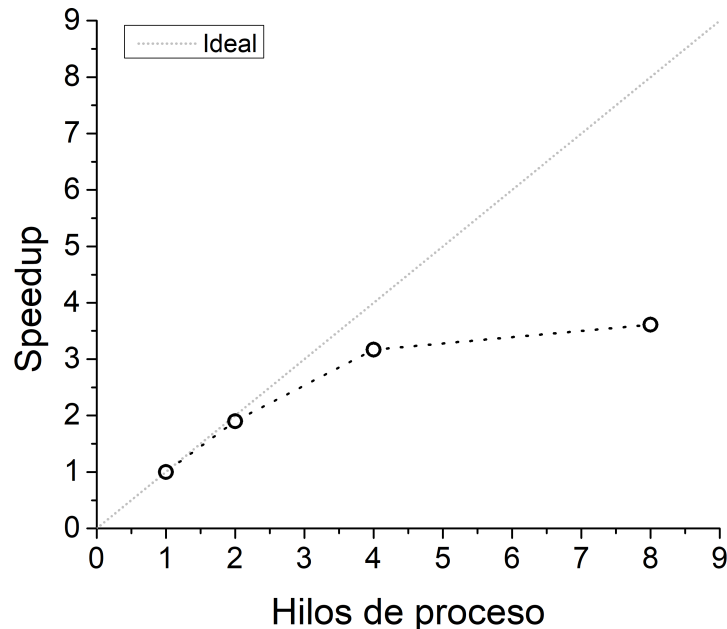


Figura 2.10: Resultados de aceleración (*speedup*) en la ejecución paralela del programa en función de la cantidad de hilos de proceso.

## 3. Ensayos y validación

Con el objetivo de someter a prueba todos los modelos desarrollados para cada una de las situaciones que se deseaban modelar, se llevaron a cabo ensayos numéricos de conocida solución analítica y/o experimental, para comprobar la respuesta de nuestro sistema bajo condiciones controladas. Para eso seleccionamos una serie de ensayos de fractura y contacto altamente difundidos en la literatura especializada, así como otros provistos por laboratorios que se abocan a ensayar materiales destinados a la industria nuclear. Asimismo, en algunos casos utilizamos otros programas para comparar nuestros resultados numéricos con aquellos provistos por simuladores comerciales.

### 3.1. Ensayos de fisura

#### 3.1.1. Flexión de viga en tres puntos

El ensayo de flexión de viga en tres puntos es un experimento usual en la caracterización de un material bajo sollicitación mecánica. Elegimos reproducirlo numéricamente para comprender el CZM, dominar su aplicación y posteriormente adaptarlo a las geometrías de nuestro interés. En este tipo de ejercicio, se sujeta la viga (en posición horizontal) en los dos extremos inferiores, y se impone un desplazamiento en la parte media superior, en dirección vertical con sentido descendente, donde empuja la máquina en el ensayo, hasta alcanzar los 0,2 cm de deflexión (Figura 3.1a). El dominio fue mallado en forma no estructurada con tetraedros de cuatro nodos [143]. Posee 200 cm de ancho ( $S$ ), 20 cm de alto ( $W$ ) y 5 cm de profundidad ( $B$ ). La muestra cuenta con una prefisura desde la base hasta la mitad de la altura ( $a$ ), ubicada exactamente en la mitad de la longitud. Desde el extremo de la fisura hasta la parte superior de la viga, se introduce la zona cohesiva con elementos de tipo prisma triangular de seis nodos. En la parte inferior de la Figura 3.1, se pueden ver ampliaciones a la zona central para diferentes instantes del ensayo, con 0,066 cm (Figura 3.1b), 0,133 cm (Figura 3.1c) y 0,20 cm de deflexión de la viga (Figura 3.1d). Los desplazamientos transversales están incrementados veinticinco veces para poder visualizarlos.

El material está caracterizado por un módulo de Young  $E = 30$  GPa, con un coeficiente de Poisson  $\nu = 0,15$ , una resistencia a la tracción  $\sigma_t = 3,33$  MPa y una separación normal crítica  $\delta_c = 0,00345$  cm, determinada mediante la relación entre la energía de fractura ( $G_F = 1,15 \times 10^{-2}$  MPa cm) y  $\sigma_t$ . Dado que este espécimen es significativamente diferente del resto de los casos estudiados, precisa una ley cohesiva exponencial reflejada en la Ecuación 3.1. El modelo considera iguales las tracciones en ambas direcciones tangenciales. En la Figura 3.2 se puede ver que el comportamiento de la gran mayoría de los elementos cohesivos para la tracción en dirección normal se superpone con la curva teórica utilizada,

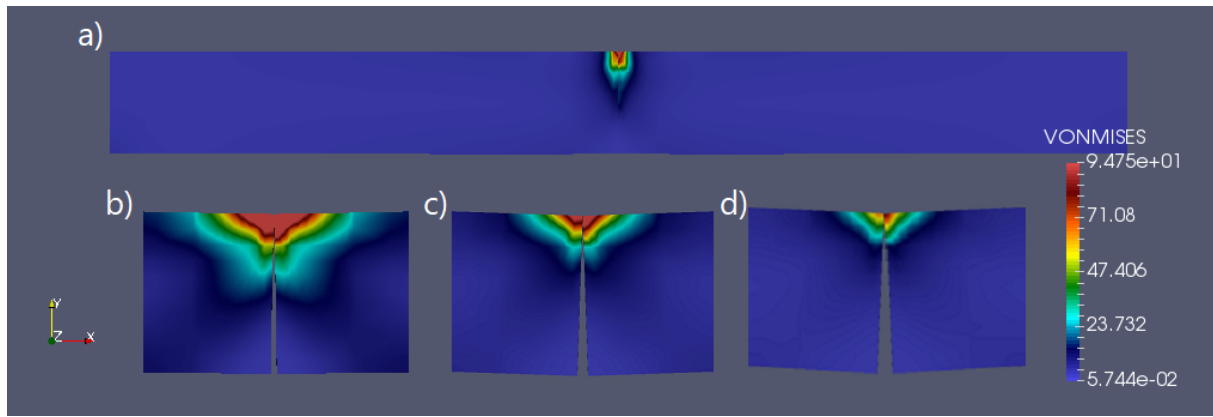


Figura 3.1: a) Esquema de la viga en tres dimensiones con tensión efectiva de Von Mises en color. b), c) y d) Ampliaciones con 0,066 cm, 0,133 cm y 0,20 cm de desplazamiento vertical, respectivamente.

del tipo exponencial siguiendo la literatura [132]. La excepción corresponde a los elementos que se encuentran en el extremo superior, condicionados por encontrarse en el borde del cuerpo.

$$T_n(\delta_n) = \frac{\sigma_t \times \delta_n}{\delta_c} e^{1-\delta_n/\delta_c} \quad (3.1)$$

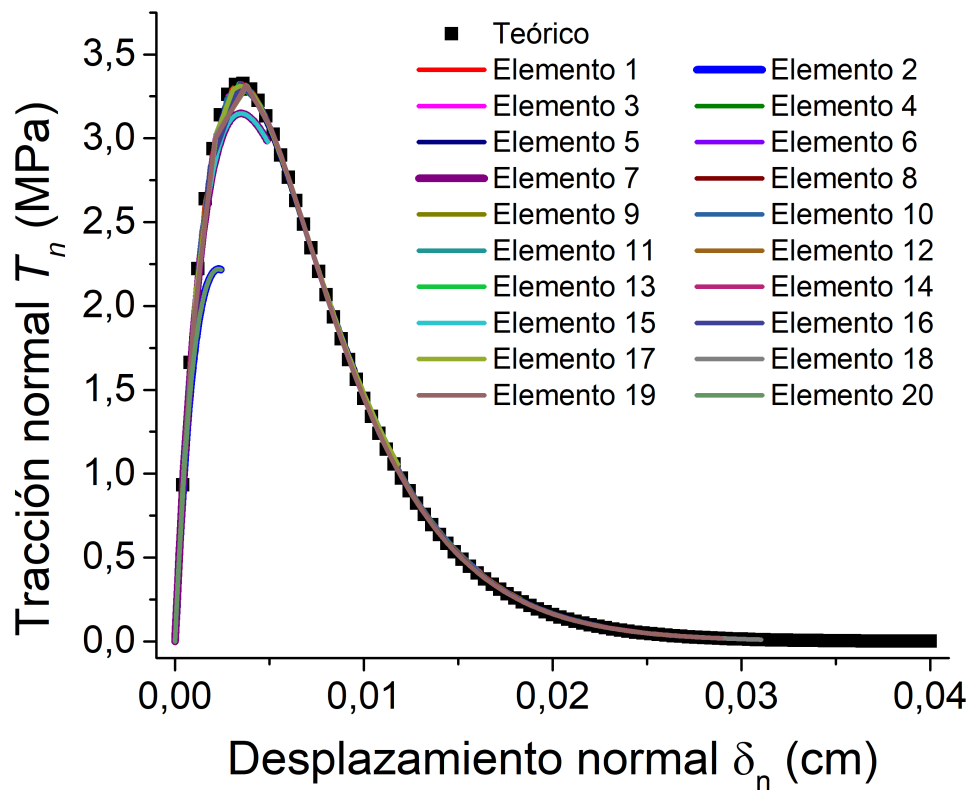


Figura 3.2: Curvas de tracción-desplazamiento en dirección normal por elemento cohesivo.

Para validar teóricamente este problema, se toma la expresión analítica para el factor de intensidad de tensiones y la distancia de apertura de la fisura [60]. En la Figura 3.3a, se muestra el factor de intensidad de tensiones en función de la deflexión de la viga

calculado numéricamente y comparado con el valor teórico crítico  $K_{Ic}$  obtenido mediante la Ecuación 3.2 [60], donde  $P$  es la carga que ejerce la máquina sobre la viga. En la figura se observa que los valores del modelo cohesivo sobrepasan a los de la curva analítica aproximadamente desde que la zona cohesiva alcanza el valor de separación crítica  $\delta_c$ , hasta que la curva analítica sufre un crecimiento exponencial debido al crecimiento de la fisura. En la Figura 3.3b, el gráfico compara los valores numéricos de apertura del extremo de la fisura (CTOD, del inglés *crack tip opening displacement*) con valores teóricos obtenidos mediante la Ecuación 3.3. Esta ecuación se compone de un término elástico y un término plástico en el cual  $r_p = 0,44$  representa un factor rotacional que define la posición relativa de un punto bisagra ficticio a partir del cual las dos mitades de la viga rotan y  $V_p$  es la llamada apertura de la boca de la fisura (CMOD, del inglés *crack mouth opening displacement*). Ambos gráficos de la Figura 3.3 muestran un buen acuerdo entre los resultados numéricos y los teóricos.

$$K_I = \frac{P}{B\sqrt{W}} f\left(\frac{a}{W}\right) \quad (3.2)$$

$$f\left(\frac{a}{W}\right) = \frac{3\frac{S}{W}\sqrt{\frac{a}{W}}}{2\left(1+2\frac{a}{W}\right)\left(1-\frac{a}{W}\right)^{3/2}} \left\{ 1,99 - \frac{a}{W} \left(1 - \frac{a}{W}\right) \left[ 2,15 - 3,93 \left(\frac{a}{W}\right) + 2,7 \left(\frac{a}{W}\right)^2 \right] \right\}$$

$$\delta_{\text{analítico}} = \frac{K^2(1-\nu^2)}{2\sigma_y E} + \frac{r_p(W-a_0)V_p}{r_p(W-a_0) + a_0} \quad (3.3)$$

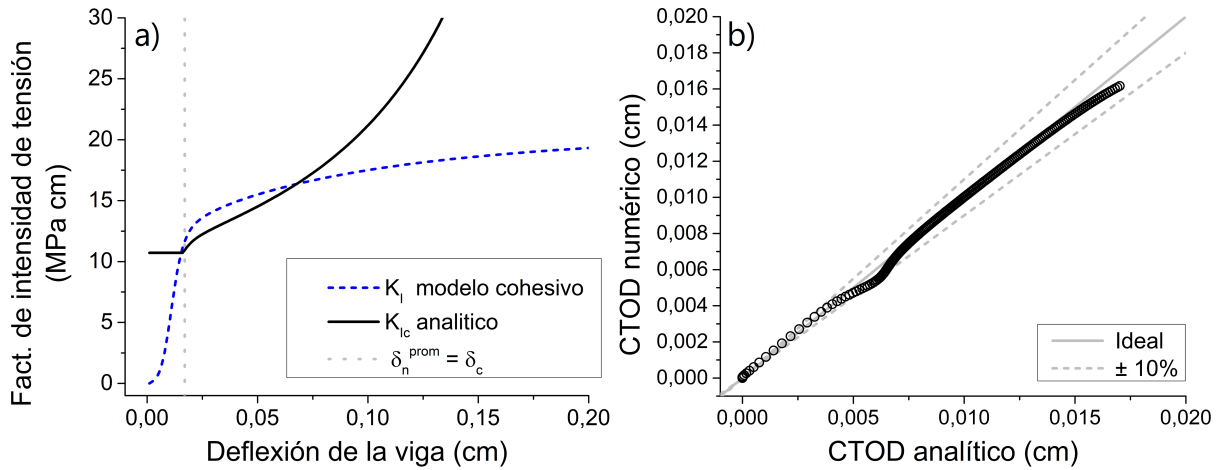


Figura 3.3: a) Factor de intensidad de tensiones  $K_I$  en función de la deflexión de la viga. b) Apertura del extremo de la fisura calculado numéricamente en función de los valores analíticos obtenidos.

### 3.1.2. Ensayo de tracción de anillos de Zr-1 %Nb

Posteriormente se procedió a comparar el modelo numérico de fractura con mediciones de experimentos controlados propios de la industria nuclear, más cercanos con relación a los parámetros termomecánicos y geométricos que se utilizarían en el código DIONISIO en su versión tridimensional. Para ello se eligió el realizado por L. A. Yegorova et al. [51],

donde los autores fabricaron especímenes anulares de vainas de Zr-1 %Nb, típicamente utilizados en reactores del tipo VVER, para calcular propiedades mecánicas del material y estudiar cómo varían a causa de la irradiación. Las muestras sin irradiar poseían un diámetro externo de entre 0,9136 cm y 0,9149 cm, un diámetro interno de 0,772 cm y una altura de entre 0,27 cm y 0,28 cm. Cada muestra era colocada alrededor de mandriles semicilíndricos que luego eran separados con una velocidad de cabezal constante. Esta condición fue representada imponiendo un desplazamiento fijo en donde el mandril empujaría al anillo, considerando los nodos internos del cuerpo dentro de un ángulo de 40 grados centrado a cada lado del eje de desplazamiento. Para los ensayos seleccionados, la velocidad constante seleccionada derivaba en una tasa de deformación de  $0,002 \text{ s}^{-1}$  y la temperatura, constante en cada caso, variaba entre 293 K y 1223 K, lo que implica que en algunos casos ocurría un cambio de fase parcial del Zr, considerado al calcular el *creep* de alta temperatura en nuestro modelo (Tabla 1.2) [144]. En este caso, se aplica la Ecuación 2.9, con un  $\delta_c$  incrementado con un factor de 8 debido a la ausencia de irradiación. El valor para  $\sigma_y$  es tomado de la Tabla 1.2 y  $f_{ab}$  fue ajustado mediante algunos de los casos reportados en el experimento, tomando los valores exhibidos en la Ecuación 3.4.

$$\delta_c = 1,2 \times 10^{-3}$$

$$f_{ab} = a + b \times T + c \times T^2 + d \times T^3$$

$$288 \text{ K} < T \leq 873 \text{ K} \rightarrow a = 2,56; b = 3 \times 10^{-1}; c = -6,94 \times 10^{-4}; d = 5,14 \times 10^{-7} \quad (3.4)$$

$$873 \text{ K} < T \leq 1018 \text{ K} \rightarrow a = -2,8 \times 10^3; b = 6,21; c = -3,325 \times 10^{-3}; d = 0,0$$

$$1018 \text{ K} < T \leq 1223 \text{ K} \rightarrow a = 3,34 \times 10^2; b = -4,37 \times 10^{-1}; c = 1,73 \times 10^{-4}; d = 0,0$$

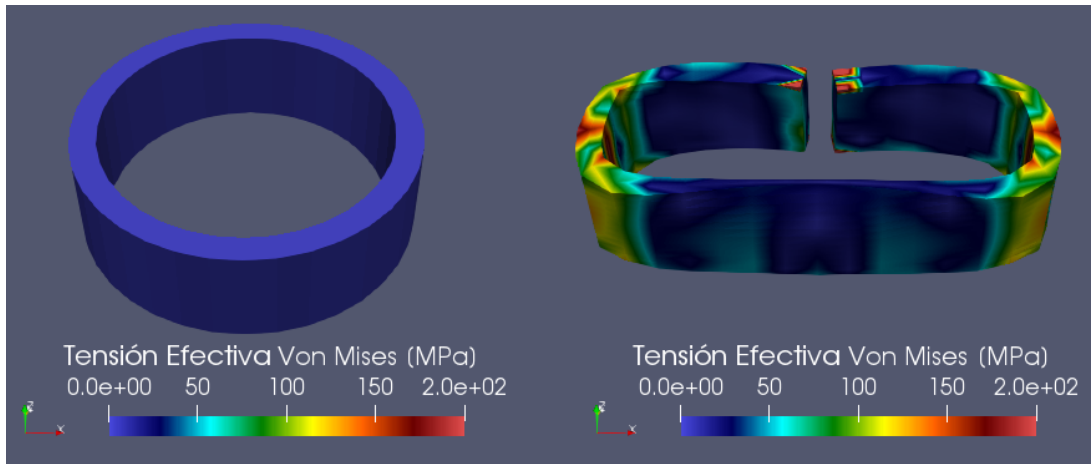


Figura 3.4: Estado inicial (izquierda) y final (derecha) del dominio de la simulación para las muestras de Zr-1 %Nb a 793 K.

En la Figura 3.4 se muestra el dominio en su estado inicial (izquierda) y en el instante de la falla (derecha) para el caso a 793 K, con la tensión efectiva de Von Mises en MPa en color. La Figura 3.5 exhibe los resultados de elongación total para todos los casos

calculados en relación con su medición experimental, con el rótulo de temperatura que corresponde a cada punto. Se puede observar que todos los resultados se encuentran dentro de la banda de variación de 2% de elongación total incluida en el gráfico.

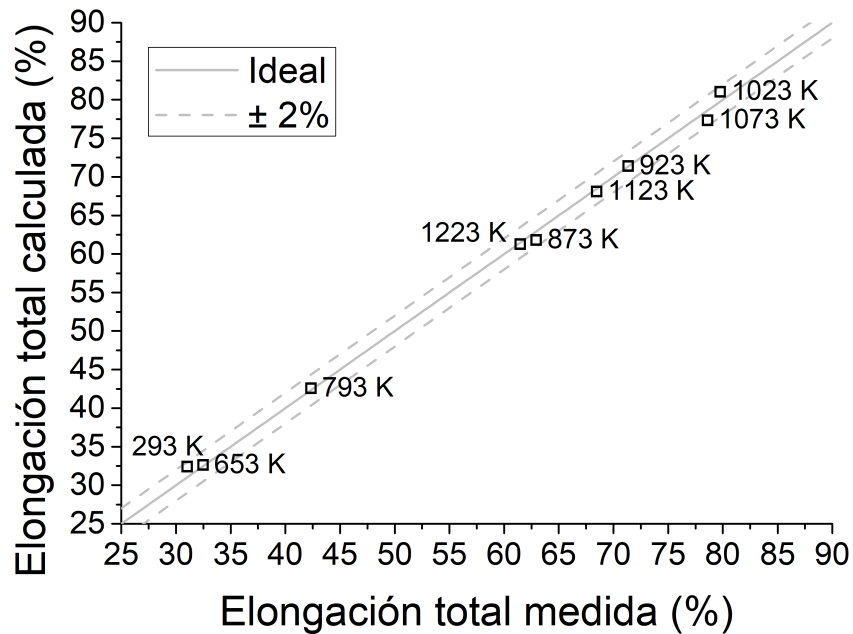


Figura 3.5: Elongación total calculada en relación con su valor experimental para todas las temperaturas consideradas. La línea llena representa el resultado ideal y las punteadas, una desviación del 2%.

## 3.2. Ensayos de contacto

### 3.2.1. Problema de Hertz

El problema de contacto de Hertz, o alguna de sus múltiples variaciones, es utilizado regularmente para poner a prueba y validar modelos numéricos, ya que posee solución analítica y existen numerosos experimentos sobre el mismo. En esta tarea, optamos por la variante de una cáscara semiesférica rígida con módulo de rigidez de 100 MPa, un radio exterior de 20 cm y un espesor de 4 cm, que presiona sobre un semiespacio elástico cuyo módulo de rigidez es un orden de magnitud menor [145-147]. Esta acción es producto de una fuerza (en este caso de 1 N) sobre dicha cáscara, alineada con el centro del semiespacio en dirección perpendicular al plano de contacto (Figura 3.6). Las Figuras 3.6a, b y c contienen esquemas del dominio del problema y la fuerza aplicada. En la Figura 3.6d se ven los elementos cohesivos, exhibiendo en color la fuerza de contacto que ejercen sobre ambos cuerpos. Se puede notar que la mayor fuerza de contacto ocurre bajo la aplicación de la fuerza, disminuyendo a medida que aumenta el radio de acción. La porción exterior de la zona cohesiva no alcanza a experimentar contacto.

La Figura 3.7a contrasta la ley teórica de tracción-desplazamiento utilizada (línea negra con cuadrados) con los valores calculados de tracción normal para los elementos de la zona cohesiva que perciben contacto (línea continua roja para los elementos centrales

y línea punteada azul para aquellos adyacentes a los centrales). Los elementos cohesivos comienzan a producir fuerza de contacto sin alcanzar una separación negativa, debido a que poseen algunos nodos en contacto y otros que no lo están, resultando en un promedio de distancia positivo pero un valor de fuerza de contacto no nulo. En las Figuras 3.7b, c y d, se comparan los resultados analíticos y calculados de desplazamiento axial (en dirección  $z$ ), tensión radial y tensión circunferencial, respectivamente, en función del radio de la cáscara semiesférica.

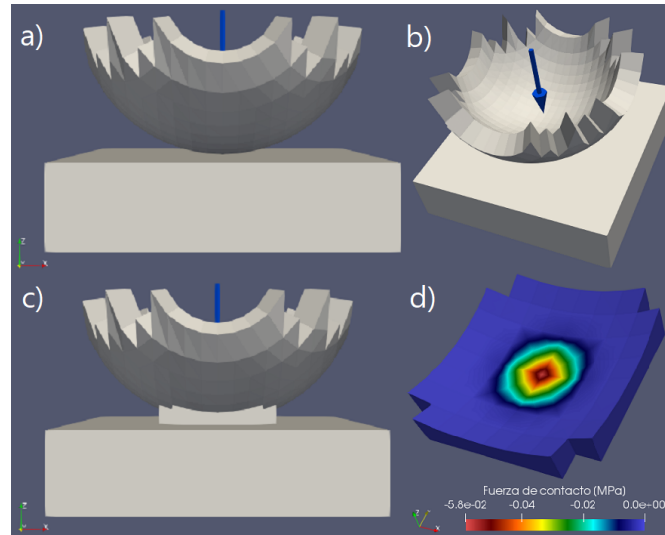


Figura 3.6: Esquema del dominio del problema de Hertz. a) Cáscara y semiespacio (sin zona cohesiva) de frente. b) Cáscara, semiespacio y fuerza desde otro ángulo. c) Malla completa (cáscara, semiespacio y zona cohesiva). d) Zona cohesiva, fuerza de contacto en color.

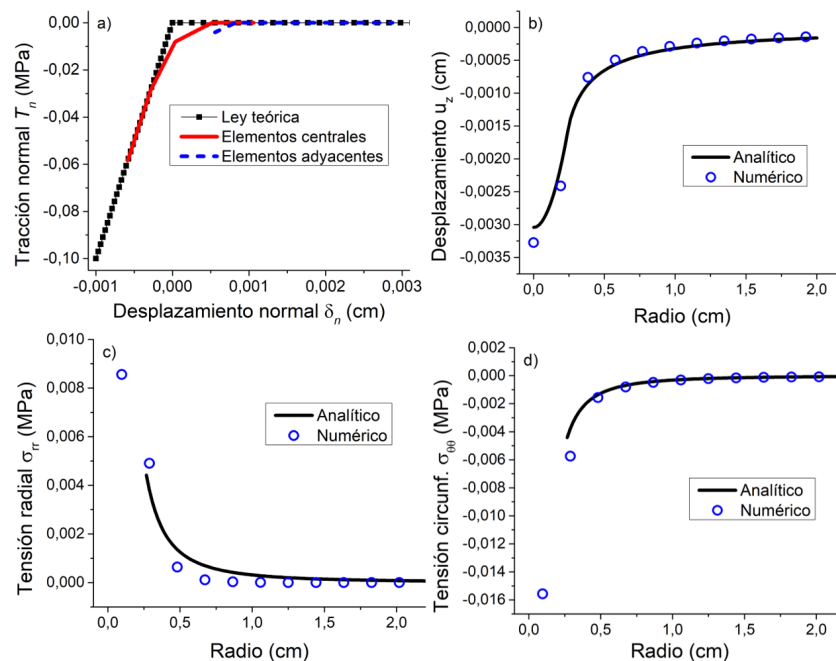


Figura 3.7: Resultados del problema de Hertz. a) Tracción-separación normal de la zona cohesiva. b) Desplazamiento axial ( $z$ ) del semiespacio en función del radio. c) Tensión radial del semiespacio en función del radio. d) Tensión tangencial del semiespacio en función del radio.

### 3.2.2. Contacto entre tubo y cilindro embutido

Otro tipo de problema repetidamente resuelto en la literatura y con solución conocida es el que concierne a un cilindro sólido de radio  $r_c$  con una distribución no-uniforme de temperatura, en contacto con un tubo de radio interno  $r_c$  y radio externo  $r_b$ , sometido a una presión externa  $P_b$ . Ante un determinado perfil de temperatura  $T(r)$ , se alcanza una solución analítica para los desplazamientos radiales integrando numéricamente. Para las condiciones de borde se asume que la solución no puede tender a infinito y se considera que la tensión en el radio externo es igual a la presión de contacto. En la [Ecuación 3.5](#) se exhibe la ecuación para los desplazamientos en función del radio.

$$u(r) = \frac{\alpha(1+\nu)}{1-\nu} \left[ \frac{1}{r} \int_0^r T(r)r dr + \frac{(1-2\nu)r}{r_c^2} \int_0^{r_c} T(r)r dr \right] - \frac{P_c(1+\nu)(1-2\nu)r}{E} \quad (3.5)$$

Por otro lado, la solución para el cuerpo exterior es aquella de un tubo delgado sujeto a una presión interna  $P_c$  y una presión externa  $P_b$ . Al ocurrir el contacto, el desplazamiento de ambos sólidos en ese punto debe coincidir, condición de la que se obtiene la expresión para la presión de contacto del ejercicio ([Ecuación 3.6](#)).

$$P_c = \left( \frac{\frac{\alpha(1+\nu)}{1-\nu} \left[ \frac{1}{r} \int_0^r T(r)r dr + \frac{(1-2\nu)r}{r_c^2} \int_0^{r_c} T(r)r dr \right] \frac{E(r_b^2-r_c^2)}{r_c} + 2P_b r_b^2}{(1+\nu)(1-2\nu)(r_b^2-r_c^2) + (1-\nu)r_c^2 + (1+\nu)r_b^2} \right) \quad (3.6)$$

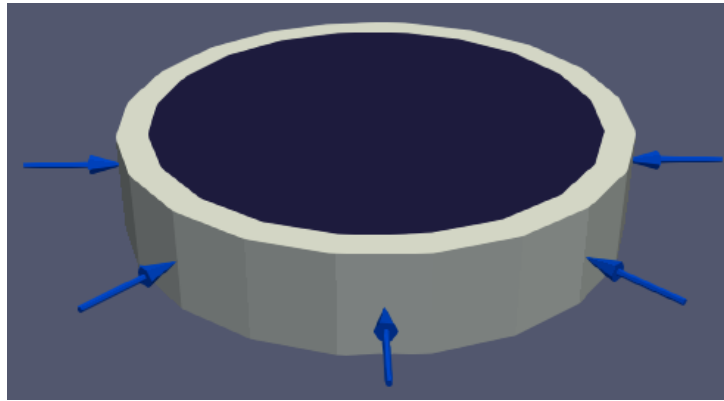


Figura 3.8: Dominio de tubos embutidos con presión externa

La [Figura 3.8](#) contiene la geometría del dominio utilizada para el problema, donde las flechas representan la presión uniforme ejercida en la cara externa del tubo. En la [Figura 3.9](#) se muestran los resultados obtenidos al aplicar una temperatura constante de 2273 K en el cilindro y una fuerza externa constante de 10000 N sobre el tubo, en conjunto con los procurados mediante el software comercial de elementos finitos COMSOL [148]. En las [Figuras 3.8a](#) y [b](#) se grafican las tensiones radial y circunferencial, respectivamente, en función del radio, desde el centro hasta el extremo del dominio. En la [Figura 3.8c](#), se puede observar la fuerza de contacto en relación con la altura del dominio. Todos

los valores obtenidos resultan de buen acuerdo con aquellos producidos por el programa comercial.

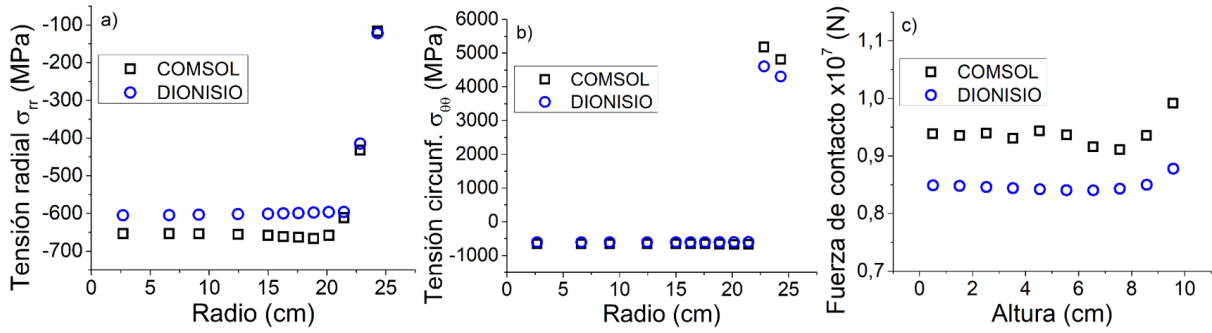


Figura 3.9: Resultados de simulación de tubos embutidos. a) Tensión radial en función del radio. b) Tensión circunferencial en función del radio. c) Fuerza de contacto en función de la altura.

### 3.2.3. Comportamiento termomecánico de compuesto de SiC

Con el objetivo de someter el modelo de contacto a procesos similares a los que ocurren en el dominio pastilla-*gap*-vaina y reproducir situaciones de mayor exigencia, decidimos compararlo con un caso desarrollado por L. Alva et al. [149]. En ese trabajo, los autores estudian un compuesto de grado nuclear con matriz de carburo de silicio ( $\text{SiC}_m$ ) reforzado con fibras de carburo de silicio ( $\text{SiC}_f$ ) como material candidato para vainas de combustibles tolerantes a accidentes (ATF, del inglés *Accident Tolerant Fuels*).

En el experimento, un cilindro sustituto de alúmina se coloca dentro de la muestra de SiC, fijados mediante un adhesivo cerámico. El cilindro presenta un radio externo de 7,95 mm con un espesor de 1,2 mm, una longitud de 140 mm, un módulo de elasticidad de 359 GPa y un coeficiente de Poisson de 0,25. Los coeficientes de dilatación y conductividad térmica son tomados del *National Institute of Standards and Technology* (NIST, [www.ceramics.nist.gov](http://www.ceramics.nist.gov)). Por su lado, la muestra de SiC tiene un radio externo de 10,63 mm con un espesor de 1,4 mm, una longitud de 12,7 mm, un módulo de elasticidad anisotrópico  $E_{11} = 3,2 \times 10^{11}$  GPa;  $E_{22} = E_{33} = 2,86 \times 10^{11}$  GPa y un coeficiente de Poisson de 0,2, junto a un coeficiente de dilatación térmica  $\alpha = 1,8276 + 0,0178T - 1,554 \times 10^{-5}T^2 + 4,5246 \times 10^{-9}T^3 [10^{-6}K^{-1}]$  y un coeficiente de conductividad térmica  $k_p = (-0,0003 + 1,05 \times 10^5 T)^{-1} [Wm^{-1}K^{-1}]$ . El sistema se calienta de forma eléctrica desde el centro, resultando en una presión ejercida sobre el compuesto a causa de la dilatación térmica. Los resultados experimentales son comparados por los autores con un modelo de elementos finitos desarrollado en el software comercial COMSOL [148]. Dado que nuestro objetivo es estudiar la interacción mecánica de dos superficies en contacto, nuestro modelo excluye la capa adhesiva, ya que funciona como un amortiguador, acumulando tensiones y deformaciones.

En la Figura 3.10, se muestran los estados iniciales y finales del dominio. Los desplazamientos radiales fueron aumentados veinticinco veces para poder visualizarlos, lo cual

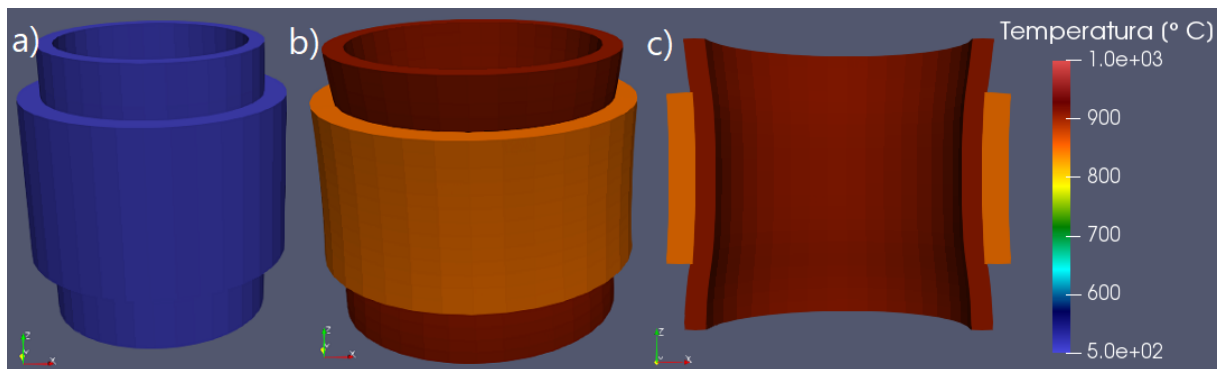


Figura 3.10: Dominio para compuesto de SiC en su estado inicial (a) y estado final (b y c).

causa que la interpenetración de los cuerpos en la [Figura 3.10c](#) parezca considerablemente mayor de lo que es, siendo que los valores se encuentran en el rango de las unidades de micrómetro (aproximadamente 0.5 % del espesor de la vaina).

En las [Figuras 3.11a](#) y [b](#), puede verse que nuestros resultados para las componentes tangencial y radial de la deformación mecánica pura y la total (mecánica y térmica combinadas) tienen una buena correlación con aquellos obtenidos con el programa comercial, excluyendo el adhesivo (desde 0.9 mm hasta 1.2 mm del centro radial), dado que esta capa absorbe la mayor parte de la deformación radial por asumir que su módulo de elasticidad es 0,05 veces el del cilindro de alúmina. Respecto de la tensión en función tanto del espesor como de la altura de la muestra ([Figuras 3.11c](#) y [d](#), respectivamente) presentan valores muy similares entre ambos modelos, exceptuando el escalón que causa el adhesivo.

Para estudiar con mayor profundidad el comportamiento de nuestro modelo respecto del deslizamiento de las superficies y las fuerzas de rozamiento plausibles dentro del contexto de PCMI, realizamos una modificación al caso original. Como se muestra en la [Figura 3.12a](#), aplicamos una fuerza uniforme en dirección axial sobre la base del tubo de alúmina una vez que se produjo el contacto, para provocar una fricción entre las superficies de contacto en esta dirección. Adicionalmente, impusimos un desplazamiento axial inicial del cuerpo interior de forma que las caras de los elementos de contacto no se encuentren perfectamente alineadas, simulando un deslizamiento previo al contacto. Los resultados de deformación y tensión de los materiales no presentaron variaciones significativas. Sin embargo, como se exhibe en la [Figura 3.12b](#), se genera un incremento previsto en el valor absoluto de la fuerza de fricción axial que ejerce la zona cohesiva de contacto.

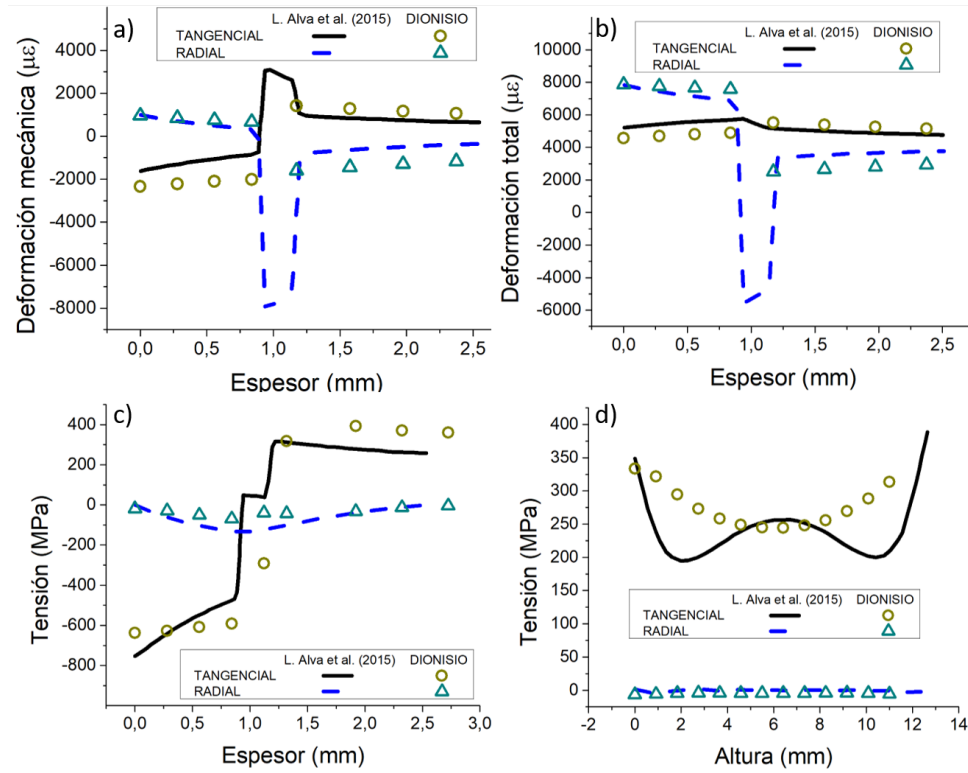


Figura 3.11: Resultados de nuestra simulación comparados con Alva et al. [149]. a) Deformación mecánica radial y tangencial en función del espesor. b) Deformación total (mecánica y térmica) radial y tangencial en función del espesor. c) Tensión radial y tangencial en función del espesor. d) Tensión radial y tangencial en función de la altura.

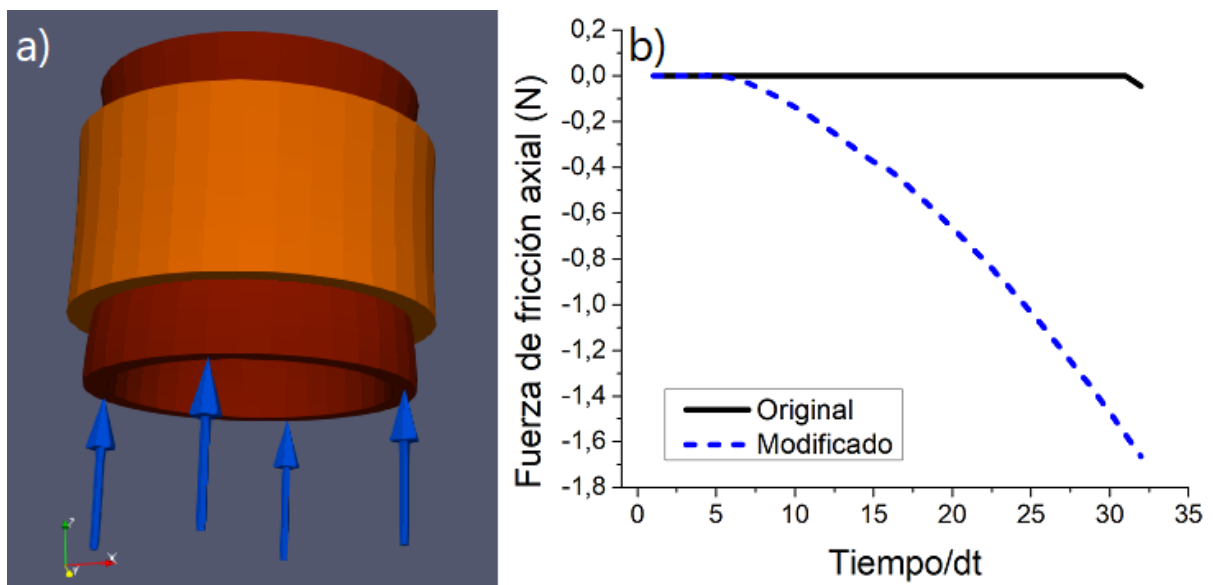


Figura 3.12: a) Esquema del dominio con una fuerza uniforme en la base para simular fricción axial. b) Variación en la fuerza de fricción axial de la zona cohesiva respecto del caso original.

### 3.3. Ensayos de crecimiento bajo irradiación

#### 3.3.1. Probetas de Zircaloy-2

Antes de incluir el nuevo modelo de IG dentro del código DIONISIO y proceder a evaluarlo con datos correspondientes a experimentos bajo irradiación, se realizaron pruebas con ensayos controlados realizados sobre probetas rectangulares de Zircaloy-2 de  $12,7 \times 1,2$  cm con un espesor de 0,37 cm, obtenidas de componentes de reactores, con distintos recocidos y/o distintos grados de CW. Las muestras fueron irradiadas con flujos neutrónicos rápidos de entre  $4,1$  y  $10,8 \times 10^{17}$  n m<sup>-2</sup> s<sup>-1</sup>, con fluencias de entre  $1,13$  y  $17,3 \times 10^{25}$  n m<sup>-2</sup>. Las muestras con trabajado en frío presentaban granos equiaxiales de  $20 \mu\text{m}$  en promedio, mientras que para las muestras recocidas los granos eran columnares de  $8 \mu\text{m}$  de tamaño promedio. El factor de textura axial para ambos casos era de 0,1.

En la **Figura 3.13** se incluyen algunos de los resultados de la validación realizada para aleaciones con una fracción de CW de 0,25 (a y b) y para aleaciones recocidas (c y d) a diferentes temperaturas. Los datos experimentales fueron tomados de Rogerson [150,151]. Se puede observar un buen acuerdo entre los cálculos y las mediciones experimentales, tanto para los casos con trabajado en frío como aquellos en los que las tensiones fueron aliviadas mediante el recocido. Algunas desviaciones fueron observadas en las comparaciones con las mediciones, debido a la ocurrencia del fenómeno del *breakaway* en el que la tasa de crecimiento se incrementa, el cual no es considerado actualmente por el modelo.

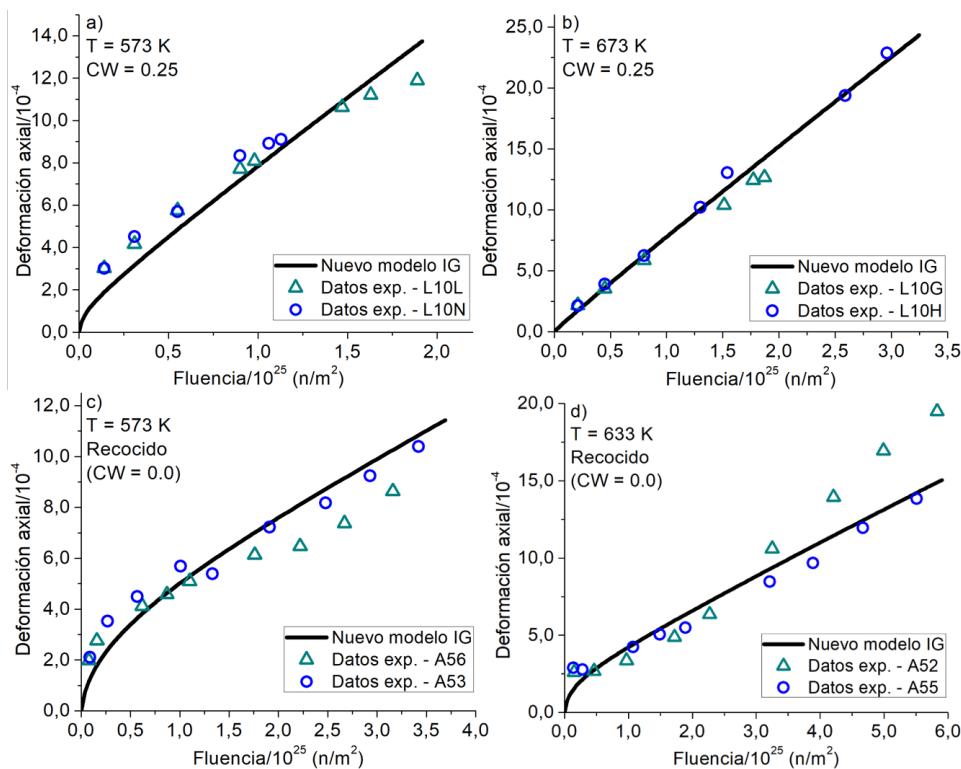


Figura 3.13: Resultados de deformación axial en función de la fluencia neutrónica para el nuevo modelo de IG comparados con datos experimentales para muestras de Zircaloy-2 con trabajado en frío (a y b) y recocidas (c y d).

### 3.3.2. Placa de Zircaloy-4 bajo flujo neutrónico no uniforme

A raíz de una solicitud originada en la División Diseño e Ingeniería de Elementos Combustibles de la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear de la CNEA, se desarrolló un modelo de crecimiento bajo irradiación para una placa de Zircaloy-4 sometida a un campo de irradiación no uniforme. Siendo materiales que se han sugerido como candidatos para los elementos combustibles de reactores de investigación, el fenómeno de IG debe ser considerado en el diseño y desarrollo de las cubas y soportes que contienen a dichos elementos. Resulta necesario comprobar la posibilidad de ocurrencia del *breakaway* del Zircaloy recristalizado durante la vida útil prevista de los componentes. En este suceso, la tasa de deformación se acelera producto de las elevadas fluencias neutrónicas [152].

La literatura cuenta con escasa información respecto de modelos que den cuenta del IG para bajas temperaturas y altas fluencias. Para temperaturas de 353 K, los datos muestran un comportamiento estacionario hasta fluencias de  $1,8 \times 10^{18}$  n cm<sup>-2</sup> [152]. Otros modelos señalan crecimientos apreciables a bajas temperaturas hasta fluencias de  $10^{20}$  n cm<sup>-2</sup> [153, 154], punto en el que se alcanza una condición estacionaria de muy bajo crecimiento, hasta comenzar el mencionado *breakaway*.

Las dimensiones del dominio están dadas por un ancho  $w$ , un largo  $L = 3,9120w$  y un espesor  $h = 0,0611w$ . La placa se encuentra texturada en su dirección longitudinal y se considera el origen del eje longitudinal a una distancia  $Z_i = 0,3034L$  del borde inferior (zona de mayor flujo neutrónico). La Figura 3.14a contiene la distribución axial de flujo neutrónico rápido (energías superiores a 0,8 MeV) para cada una de las cinco franjas en las que se divide el ancho de la placa. La definición de la deformación en función de la fluencia está dada por la relación empírica de la Figura 3.14b, provista en el requerimiento del estudio. Los modelos y datos experimentales hallados en la literatura [152, 153] acuerdan con los valores estimados mediante esta relación. A causa de la textura del material en este caso, la deformación resultará en una expansión en la dirección axial (longitudinal) y una contracción en el ancho. Para preservar la conservación del volumen, se supone una deformación creciente en el espesor de la placa. Basándonos en lo establecido experimentalmente para Zircaloy [155], el crecimiento en la dirección axial se considera del 82 % de aquel predicho en la Figura 3.14b. De igual forma, la deformación equivalente en la dirección transversal se considera plana, homogénea y decreciente, con valores absolutos del orden del 20 % de lo representado en la figura.

Respecto de la ley constitutiva utilizada, cabe destacar que el comportamiento del material bajo irradiación está influido por su textura, la fluencia neutrónica, la temperatura y el grado de trabajado en frío del material. El límite de crecimiento se produce aproximadamente entre  $10^{21}$  y  $3 \times 10^{21}$  n cm<sup>-2</sup>, según lo observado en [156]. Para muestras de placas recocidas, el valor máximo de crecimiento en la dirección paralela a la de laminación es de aproximadamente entre 0.04 y 0.05 % para una temperatura de 373 K. El material trabajado en frío presenta un mayor crecimiento por irradiación que aquel recocido y la

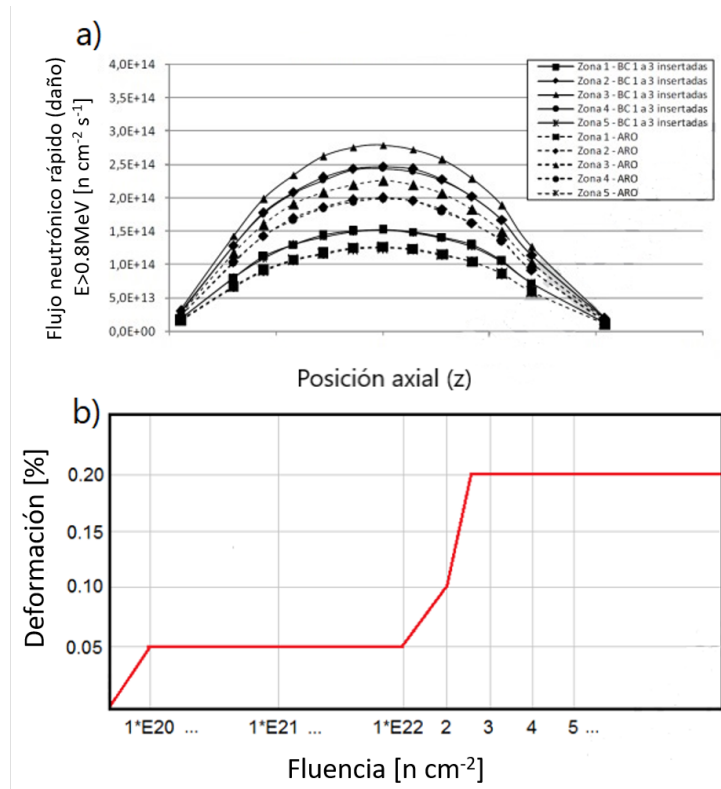


Figura 3.14: a) Flujo neutrónico a través de la placa. b) Ley de deformación axial en función de la fluencia considerada para el ensayo.

magnitud depende de la cantidad de deformación en frío. De forma esquemática, el material con CW crece linealmente con la fluencia, mientras que el material recrystalizado crece en tres etapas con el *breakaway* como instancia final. Esta última etapa no se registra para temperaturas por debajo de 353 K y hasta fluencias de  $10^{21} \text{ n cm}^{-2}$ . En caso de ocurrir, no se vería el efecto de saturación de crecimiento que se observa en la Figura 3.14b (segunda meseta). Por debajo de  $3 \times 10^{21} \text{ n cm}^{-2}$  y para 353 K, el comportamiento se condice con el indicado en la ley seleccionada para esta tarea. Para temperaturas del orden de 333 K, el comportamiento con valores de crecimiento inferiores a 0.1 % se observa hasta fluencias de  $1,4 \times 10^{22} \text{ n cm}^{-2}$  [152, 157, 158].

De acuerdo con las características de la placa y las condiciones de evaluación, se realizó un mapa de distribución de flujo en volumen en la zona activa, es decir, un rectángulo de  $w \times 1,9560w$  a partir de una altura de  $0,0534L$  desde el borde inferior de la placa, que corresponde a valores de  $z$  entre  $-0,9780 w$  y  $+0,9780 w$ . En las zonas fuera del sector de irradiación, se estableció un flujo residual mínimo, entre esos valores y  $10^9 \text{ n cm}^{-2}$  (ver Figura 3.14a). En la Figura 3.15 se han graficado dos versiones del mapa de flujo en la zona activa. El primero de ellos (Figura 3.15a) establece valores discretos de flujo por cada una de las cinco zonas en las que se divide el ancho de la placa. El segundo (Figura 3.15b) resulta de ajustar el primero mediante una función cosenoidal, logrando una variación suave del flujo en el ancho de la placa.

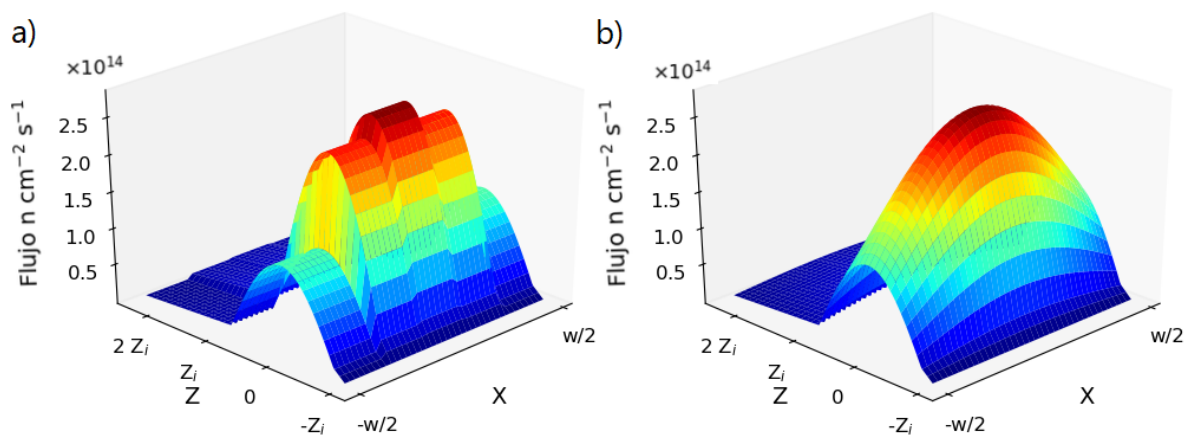


Figura 3.15: a) Flujo aplicado sobre la placa con función discreta. b) Ajuste suavizado utilizando una función cosenoidal.

En la [Figura 3.16](#), se puede ver claramente que, al cabo de 10 años de irradiación, la placa alcanza un crecimiento longitudinal (dirección  $z$ ) de aproximadamente 0,1 %, acompañado de un decrecimiento transversal (dirección  $x$ ) de aproximadamente 0,025 % y del correspondiente incremento del espesor (dirección  $y$ ) de aproximadamente 0,05 %.

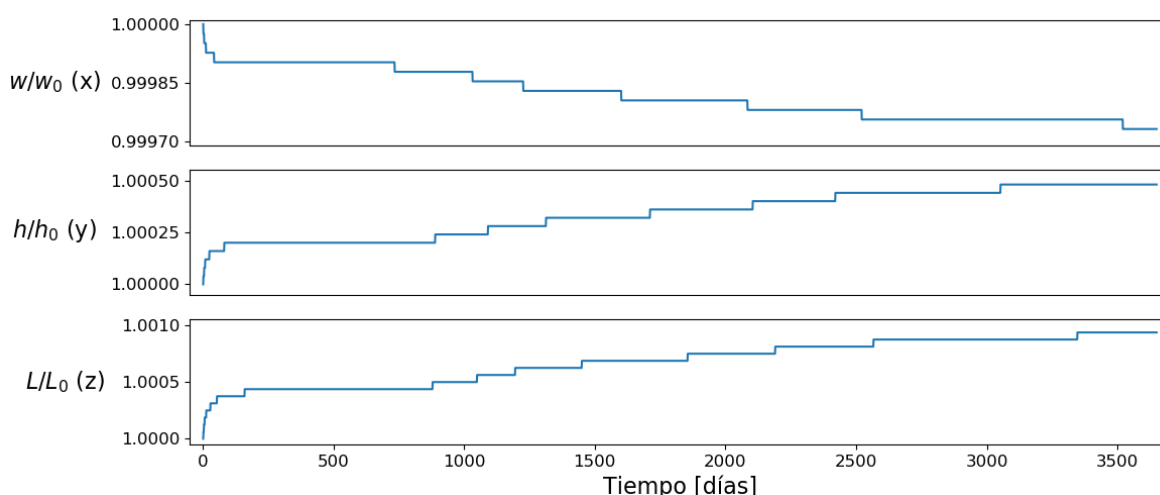


Figura 3.16: Variación relativa en las dimensiones promedio de la placa en función del tiempo para una irradiación de 10 años.

En la [Figura 3.17](#), se muestra la distribución de tensión efectiva de Von Mises en la placa para tres instantes de la historia de irradiación en 1000 (a), 2000 (b) y 3650 días (c). Debido a la textura del material, la mayor deformación ocurre en la dirección longitudinal de la placa y, en consecuencia, esa componente ( $\sigma_{zz}$ ) es la predominante del tensor de tensiones, definiendo su distribución. En la figura se puede notar un incremento inicial de la tensión en la zona de máxima fluencia y una posterior propagación hacia el contorno de la zona activa, alcanzando allí los mayores valores.

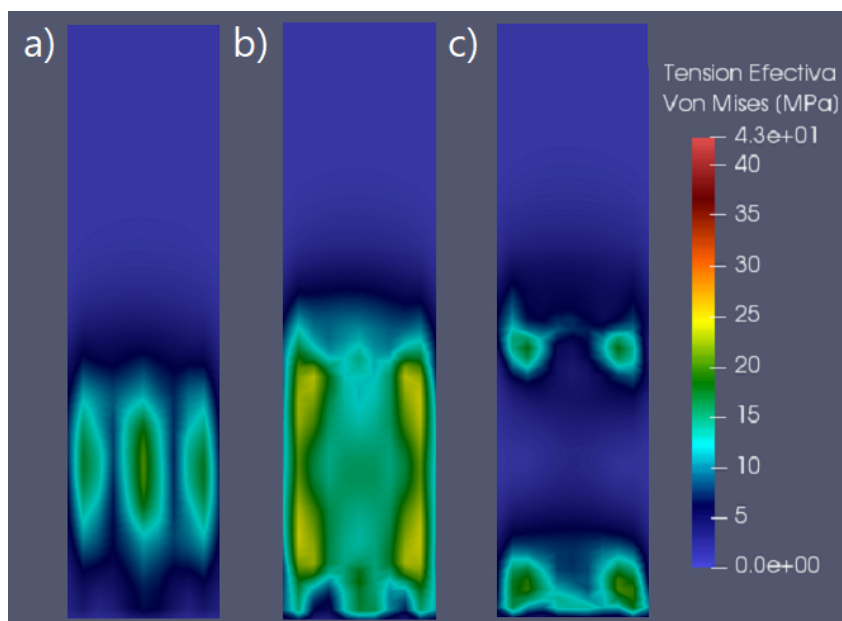


Figura 3.17: Distribución de tensión efectiva de Von Mises en la placa. a) 1000 días; b) 2000 días; c) 3650 días.

## 4. Experimentos de fisura sin irradiación

Uno de los avances más destacados de los últimos años en el código DIONISIO incluye la posibilidad de modelar condiciones de accidente de tipo LOCA en geometrías bidimensionales con simetría de revolución [37, 159]. Este módulo describe, en primer lugar, el comportamiento termohidráulico del canal del refrigerante durante el accidente, determinando las condiciones de contorno que luego aplicará en el resto de los modelos (térmicos, químicos, mecánicos) sobre la barra, eximiendo de la necesidad de utilizar un código externo para este fin. La incorporación de estos modelos llevó a que DIONISIO fuera seleccionado como código representante de la Argentina en el Proyecto de Investigación Coordinado (CRP, del inglés *Coordinated Research Project*) FUMAC, organizado por la IAEA [160]. Esta experiencia permitió tanto contrastar los resultados del código con mediciones experimentales como compararlo con otros códigos de combustible desarrollados en el mundo, con excelente acuerdo.

Una gran variedad de experimentos diseñados para emular las condiciones de accidente es realizada fuera del reactor. Denominados *out-of-pile* en inglés, estos ensayos, tanto en escenarios experimentales como computacionales, permiten estudiar ciertas propiedades omitiendo la influencia de la irradiación para distinguir otros fenómenos que tienen lugar en los materiales. Para las vainas de combustibles en particular, se realizan experimentos en donde estas son sujetas a historias térmicas, de presurización o simples pruebas termomecánicas orientadas a determinar su comportamiento bajo situaciones extremas. En ocasiones, se modifican las condiciones atmosféricas en las que se realizan los ensayos, exponiendo las muestras a vapor o elevadas concentraciones de yodo o hidrógeno para analizar su influencia en el material ensayado [35, 42, 161-167].

Para analizar este tipo de experimentos, se desarrolló un nuevo módulo dentro de DIONISIO que utiliza el núcleo existente del código incluyendo las bibliotecas de elementos finitos, los generadores de mallas, los métodos de resolución de ecuaciones y la biblioteca de materiales. El módulo, separado del principal modo de ejecución del código, resuelve un problema termomecánico con la geometría requerida basándose en la evolución térmica, mecánica o química a la que se somete la probeta. Una de sus ventajas reside en la posibilidad de evaluar el comportamiento de diversos materiales en condiciones exigentes sin considerar los efectos de la irradiación, que incrementan la complejidad del análisis, ofuscando el impacto de cada proceso. Se han incluido modelos para describir problemas mecánicos propensos a ocurrir en una barra combustible en condiciones de accidente tipo LOCA, como el denominado *ballooning* y la explosión (*burst*), teniendo en cuenta el *creep* a elevada temperatura. Asimismo, se evalúa la evolución química del material de acuerdo con la atmósfera en la que se encuentra inmerso y su historia térmica.

## 4.1. Modelos mecánicos de *ballooning* y *burst*

Los modelos que evalúan la rotura cuentan con condiciones de *burst* tanto para la tensión como para la deformación de la vaina. Se asume que la vaina falla si la tensión circunferencial excede la tensión de rotura ( $\sigma_B$ , Ecuación 4.1) o si la deformación alcanza el criterio de falla de deformación plástica ( $\varepsilon_B$ , Ecuación 4.2). Se conocen varias correlaciones empíricas para el *burst*, de las cuáles seleccionamos la ley de Rosinger para Zircaloy-4 [168] y la ley de Van Uffelen [169] o la alternativa de Yegorova [51] para el Zr-1 %Nb (ver Tabla 4.1). Las leyes de *creep* de alta temperatura se encuentran definidas junto con el resto de los modelos termomecánicos del código en la Tabla 1.2. En la Tabla 4.1, se listan los valores de las constantes involucradas en las ecuaciones de tensión y deformación de *burst* (4.1 y 4.2, respectivamente), donde  $w_{fO}$  es la fracción en peso de oxígeno capturado en las reacciones metal-agua de alta temperatura en los casos de atmósfera de vapor [37].

$$\sigma_B = C_1 e^{-C_2 T} e^{-(C_0 w_{fO})^2} \quad (4.1)$$

$$\varepsilon_B = C_3 T^4 - C_4 T^3 + C_5 T^2 - C_6 T + C_7 \quad (4.2)$$

El componente mecánico de este modo particular del código aplica una Formulación Lagrangiana Actualizada (ULF, del inglés *Updated Lagrangian Formulation*) que permite una descripción eficiente de los efectos cinemáticos no lineales producto de grandes desplazamientos, grandes rotaciones y grandes deformaciones. En este enfoque, la posición de los puntos materiales en el continuo y su movimiento se describen usando una configuración de referencia que evoluciona dinámicamente con la deformación del dominio. Es decir, la configuración mecánica de referencia cambia en cada paso de tiempo, siendo actualizada con la última posición del cuerpo. Por este motivo, es necesario diferenciar la configuración inicial de aquella actualizada de referencia [45, 94]. El uso de esta formulación introduce severas dificultades para la convergencia del algoritmo cohesivo, especialmente previo a la formación de la fisura. Sin embargo, la existencia de criterios de falla independientes de la ley cohesiva presentados en las Ecuaciones 4.1 y 4.2, nos permiten reproducir el avance de la fisura introduciendo la zona cohesiva en el continuo al ocurrir la rotura de la vaina, en las proximidades de los elementos que cumplen con la condición alcanzada. La ley cohesiva mantiene los valores originales de los parámetros  $\delta_c$  y  $f_{ab}$ , pero su dependencia de la tensión de fluencia que varía con la temperatura y del estado de tensiones, causado aquí por una presión interna creciente y distribuida uniformemente, producen una curva que difiere respecto del resto de las circunstancias expuestas. Cabe destacar que previo al suceso del *burst*, el modelo debe simular varios segundos, es decir, prácticamente la duración total del experimento, mientras que el CZM debe resolver un fenómeno que acontece en fracciones de segundo, desde que se alcanza el criterio de falla e inicia la fisura hasta que se igualan las presiones interna y externa y se relajan las tensiones en la vaina.

Tabla 4.1: Valores de constantes para tensión y deformación de *burst*.

Zircaloy	Zr-1 %Nb
$[C_0] = \text{adim}; [C_1] = \text{Pa}; [C_2] = K^{-1}$ $[C_3] = K^{-4}; [C_4] = K^{-3}; [C_5] = K^{-2}; [C_6] = K^{-1}; [C_7] = \text{adim}$	
$C_0 = 1052,6$	$C_0 = 0$
$T < 1085 K$ $C_1 = 8,3 \times 10^8 \text{ [Pa]}; C_2 = 0,001$	$T < 1033 K$ $C_1 = 1,419 \times 10^9; C_2 = 0,002545$
$1085 K \leq T \leq 1166 K$ $C_1 = 8,3 \times 10^8 + 2,17 \times 10^5(T - 1085)/81$ $C_2 = 0,001 + 0,002(T - 1085)/81$	$1033 K \leq T \leq 1176 K$ $C_1 = 4,103 \times 10^{14}$ $C_2 = 0,01472$
$1166 K \leq T \leq 1248 K$ $C_1 = 3 \times 10^9 - 7 \times 10^4(T - 1166)/82$ $C_2 = 0,003$	$T > 1176 K$ $C_1 = 2,703 \times 10^8$ $C_2 = 0,002622$
$T > 1248 K$ $C_1 = 2,3 \times 10^9; C_2 = 0,003$	Coeficientes alternativos $T < 973 K$ $C_1 = 1,99522 \times 10^9$ $C_2 = 0,002622$
$940 K \leq T \leq 1200 K$ $C_3 = 1,587979 \times 10^{-9}$ $C_4 = 6,692798 \times 10^{-6}$ $C_5 = 1,053049 \times 10^{-2}; C_6 = 7,331051$ $C_7 = 1906,17$	$973 K \leq T \leq 1108 K$ $C_4 = -2,08674 \times 10^{-7}$ $C_5 = -6,7244 \times 10^{-4}$ $C_6 = -0,717577$ $C_7 = -252,941$
$1200 K < T < 1700 K$ $C_3 = 0; C_4 = 1,67939 \times 10^{-8}$ $C_5 = 6,23050 \times 10^{-5}$ $C_6 = 7,360497 \times 10^{-2}$ $C_7 = 28,1199$	$1108 K < T < 1473 K$ $C_4 = 0; C_5 = 9,42895 \times 10^{-6}$ $C_6 = 0,0243805; C_7 = 15,8911$
$T \geq 1700 K$ $C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = 0; C_7 = 0,544589$	$T \geq 1473 K$ $C_4 = C_5 = C_6 = 0$ $C_7 = 0,44$

## 4.2. Validación experimental

Para comparar la eficacia de nuestros modelos, seleccionamos ensayos de explosión de barras individuales desarrollados con vainas de Zircaloy-4 y Zr-1 %Nb cuyo objetivo era investigar los fenómenos de *ballooning* y *burst* en condiciones que emulan las de un accidente por pérdida de refrigerante. Estos experimentos fueron realizados en dos

esquemas principales, con presión interna inicial fija y rampa de temperatura o a temperatura constante con una rampa de presión interna aumentando el volumen de gas a una tasa constante. En la [Tabla 4.2](#) se resume la caracterización de cada uno de los experimentos. Dentro del primer esquema se encuadra el denominado REBEKA, llevado a cabo en KfK (*Kernforschungszentrum Karlsruhe*, actualmente Instituto Tecnológico de Karlsruhe) en el Instituto IRB (*Institute for Reactor Components*) [35, 161] para vainas obtenidas de NRG (Alemania) y CONUAR (Argentina) y la serie BALL 1 [165, 166] del Instituto AEKI (KFKI Atomic Energy Research Institute, predecesor de MTA EK). Para el segundo esquema, se consideraron las series BALL 2 [165, 166], PUKI [162, 163, 170] y PUZRY [163, 167], todas efectuadas en el Instituto AEKI [42]. En la [Figura 4.1](#) se muestra un esquema del dispositivo experimental utilizado para la serie PUZRY, con el horno que contiene las probetas, las fuentes de gas inerte y de vapor y los instrumentos para incrementar y controlar la presión interna y la temperatura en las pequeñas barras.

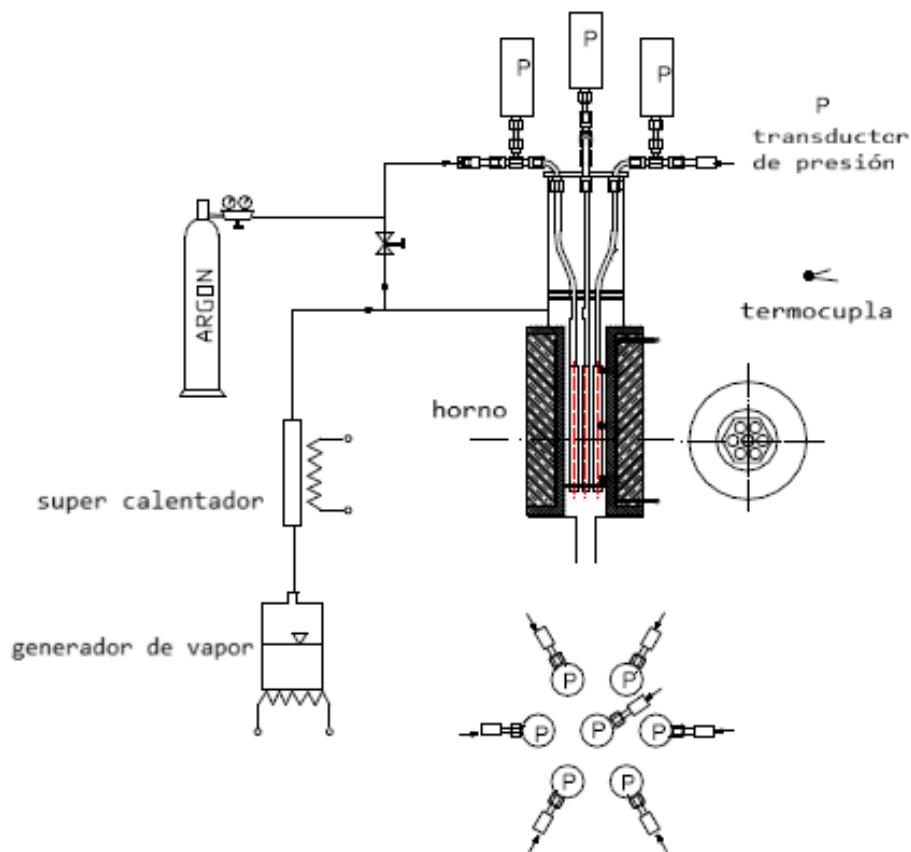


Figura 4.1: Esquema del dispositivo experimental para la serie PUZRY.

Tabla 4.2: Caracterización de los experimentos de explosión de vainas.

	REBEKA	BALL 1	BALL 2	PUKI	PUZRY
Material	Zircaloy-4	Zr-1 %Nb			Zircaloy-4
Tipo de Reactor	PHWR	VVER			PWR
Ensayos (simulados/total)	44/44	12/12	11/11	27/54	31/31
Diámetro [mm]	11,9	9,1			10,75
Espesor [mm]	0,55	0,65			0.725
Longitud [mm]	500	150		30-50	50
Temperatura	Rampa 1 K s <sup>-1</sup>	Rampa 6,4-13,5 K s <sup>-1</sup>	Constante 1073-1473 K	Constante 923-1473 K	Constante 973-1473 K
Presión	Constante (inicial) 0,65-9,8 MPa	Constante (inicial) 1-4 MPa	Rampa 0,06-0,66 MPa s <sup>-1</sup>	Rampa 0,0007-0,017 MPa s <sup>-1</sup>	Rampa 0,0007-0,026 MPa s <sup>-1</sup>
Atmósfera	Vapor	Vapor & Ar.	Ar.		

La Figura 4.2a presenta el tiempo de *burst* simulado comparado con los valores medidos experimentalmente. Se incluye la línea llena de acuerdo perfecto junto a líneas punteadas indicando una variación de  $\pm 10\%$ , evidenciando que la mayoría de los resultados presentan una desviación menor a la demarcada. Por su lado, las Figuras 4.2b y 4.2c representan ampliaciones de la Figura 4.2a para los rangos de 0-1000 s y 0-160 s, respectivamente. En la Figura 4.3 se exhibe una comparación similar pero referida a la presión de *burst* para las series BALL, PUKI y PUZRY (Figura 4.3a, ejes en escala logarítmica) y la temperatura de *burst* para los experimentos REBEKA y BALL (Figura 4.3b). En los casos de BALL, se informa la presión interna inicial de las vainas, pero su valor final se monitorea durante el experimento y su incremento se condice con los cambios de volumen y temperatura.

En la mitad superior de la Figura 4.4, se grafican curvas para la presión y el tiempo de *burst* en función de la temperatura de cada ensayo, para casos seleccionados de los experimentos PUZRY (4.4a) y PUKI (4.4b), comparadas con las mediciones experimentales. Se puede observar que las curvas siguen la disminución esperada con el aumento de la temperatura que predice la teoría [161]. En la mitad inferior se muestra la evolución de la tensión circunferencial de las vainas para los mismos casos junto a la tensión de *burst* teórica. Los valores entre paréntesis en la figura indican la diferencia en tiempo de *burst* en segundos entre los resultados experimentales y numéricos para cada caso. Ambos experimentos incluyen casos (973 K y 1173 K en PUZRY, Figura 4.4c; 973 K y 1073 K en PUKI, Figura 4.4d) que fallan con una tensión menor que el valor crítico teórico, dado que previamente alcanzan el límite de deformación. Estos casos no presentan una línea vertical al final de la curva. Las líneas para los casos a 1373 K y 1473 K del experimento PUKI (4.4d) se superponen. Todos los gráficos presentan un buen acuerdo entre los resultados numéricos y aquellos experimentales, considerando que el tiempo total que

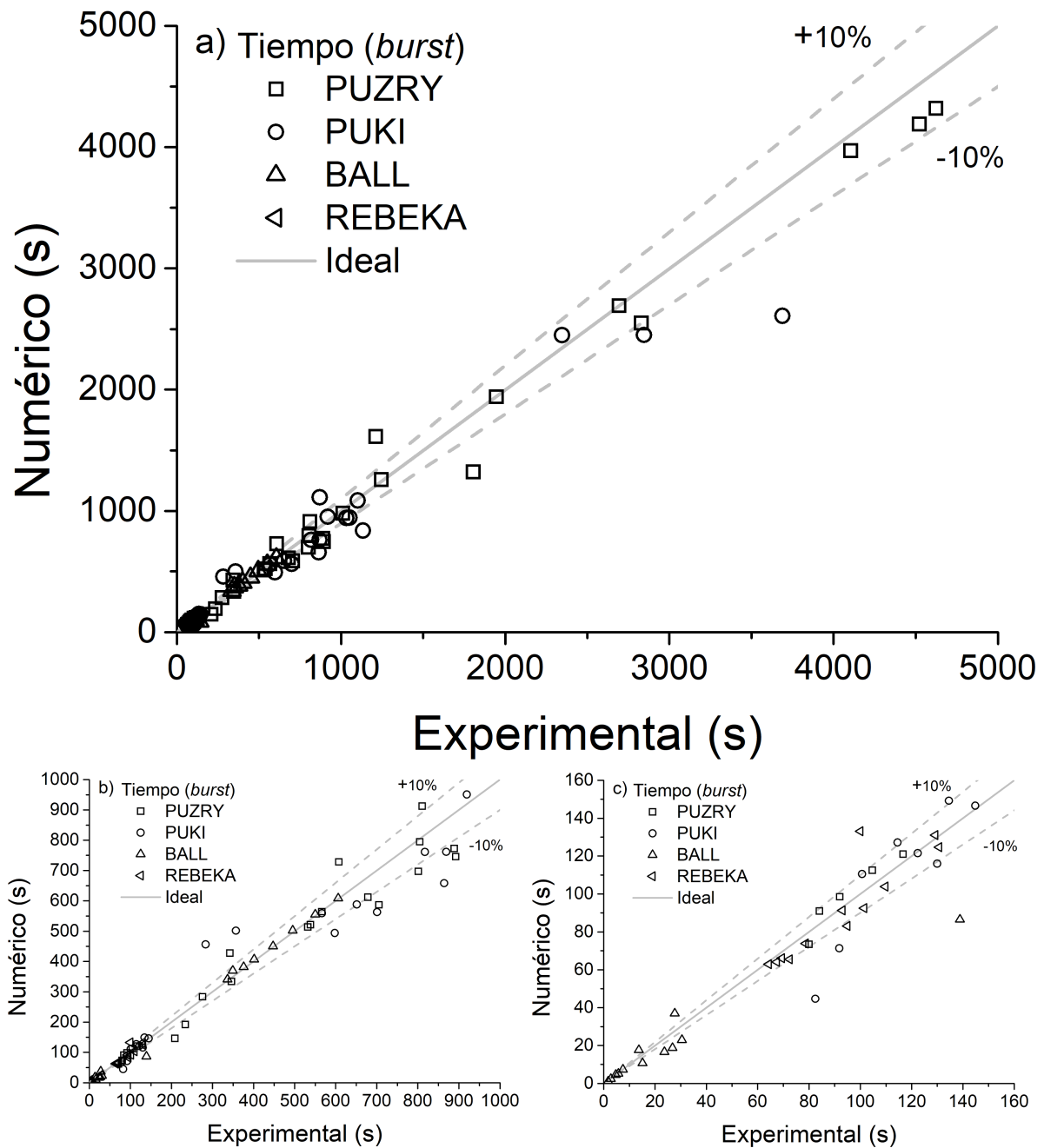


Figura 4.2: Tiempo de *burst* numérico de todos los casos simulados en relación con las mediciones experimentales. a) Gráfico completo. b) Ampliación en rango 0-1000 s. c) Ampliación en rango 0-160 s.

involucra cada ensayo es del orden de los segundos. Se puede notar cierta dispersión para las series BALL y PUKI. Estos ensayos usan vainas de Zr-1%Nb y las leyes usadas para predecir el *creep* a alta temperatura presentan algunas dificultades en la zona de cambio de fase para el circonio. Por este motivo, fue necesario ajustar la ley en este rango específico de temperaturas (ver Tabla 1.2). En particular para el experimento PUZRY, las simulaciones producen buenos resultados respecto del tiempo de *burst* para el rango más alto de temperaturas (1273 K a 1473 K), mientras que el rango inferior (973 K a 1223 K) alcanzan la condición crítica con anterioridad a lo reportado experimentalmente.

Por otro lado, en los casos PUKI se produce un escenario espejado, observándose buena precisión en el rango inferior de temperaturas ensayadas (973 K a 1173 K) y una demora en alcanzar el *burst* para los casos entre 1273 K y 1473 K.

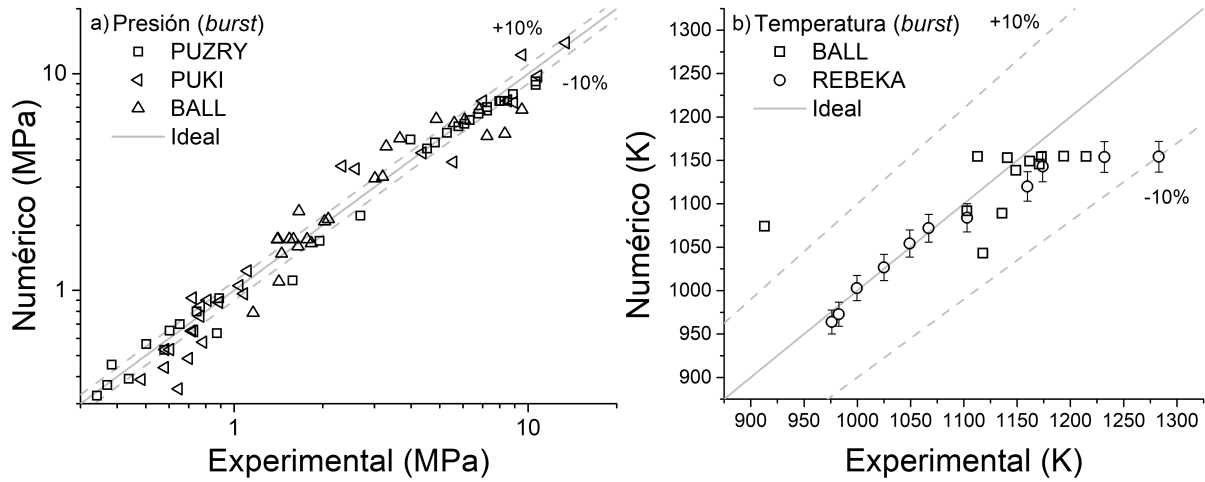


Figura 4.3: a) Presión de *burst* para los experimentos BALL, PUKI y PUZRY (ejes en escala logarítmica). b) Temperatura de *burst* para los experimentos REBEKA y BALL.

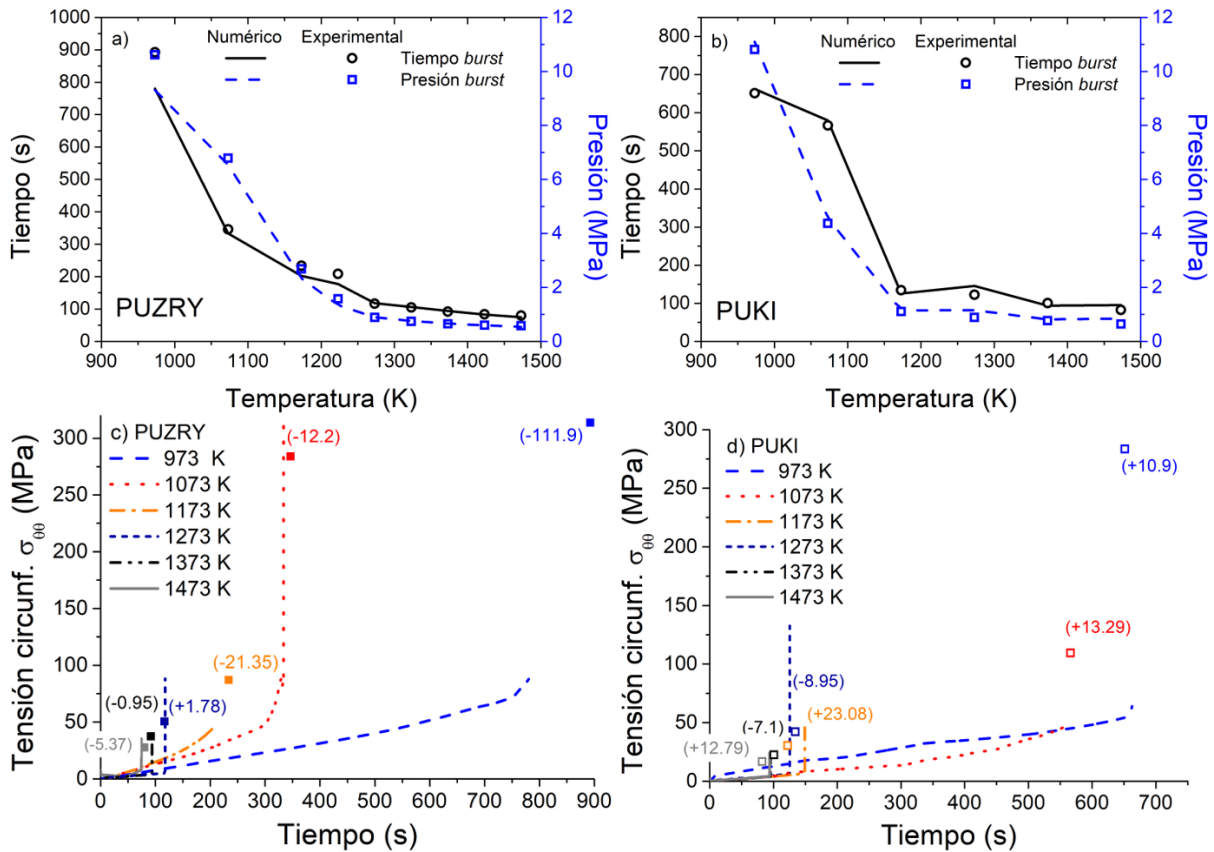


Figura 4.4: Tiempo y presión de *burst* en función de la temperatura para los experimentos PUZRY (a) y PUKI (b). Evolución de la tensión circunferencial de la vaina para casos seleccionados de PUZRY (c) y PUKI (d).

Las Figuras 4.5 y 4.6 muestran visualizaciones de los casos PUZRY 8 y PUZRY 26, respectivamente. Se incluyen fotografías de los especímenes tomadas luego de los ensayos

(a), tomadas de [42], junto con el estado final de la simulación (b y c), representando la tensión circunferencial de la vaina en MPa en color. Las imágenes de las simulaciones se muestran quitando los elementos cohesivos que han dado lugar a la fisura (b), permitiendo ver la rotura de la vaina, así como sin quitar estos elementos (c). El caso PUZRY 8 fue realizado a 1273 K, con un tiempo de *burst* experimental de 116,70 s a una presión de 0,890 MPa, mientras que la simulación resulta en un tiempo de 117,63 s a una presión de 0,894 MPa. Por su lado, para el PUZRY 26, a 973 K, el tiempo de explosión reportado es de 888,80 s a una presión de 10,605 MPa, con la simulación indicando un tiempo de 780,15 s con una presión de 9,307 MPa. Se puede notar que existe una variación considerable en la apertura de la fisura entre ambas figuras, relacionado con las diferencias en las condiciones de cada caso, como la temperatura, la deformación y el estado de tensiones.

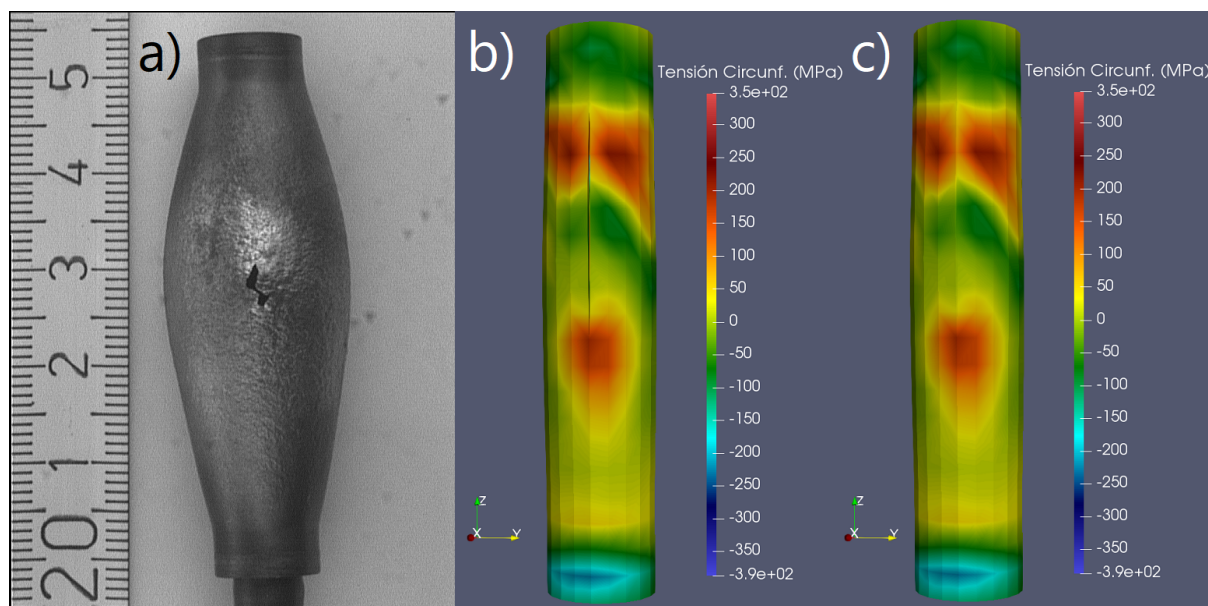


Figura 4.5: Visualización del PUZRY 08. a) Fotografía tomada después del ensayo. b) Estado final de la simulación quitando los elementos cohesivos “fisurados”, mostrando la rotura. c) Estado final de la simulación sin quitar los elementos cohesivos “fisurados”.

De forma similar a las figuras anteriores, en la Figura 4.7 se incluyen fotografías de las probetas ensayadas (izquierda) [42] con visualizaciones del estado final de las simulaciones (derecha) para los casos 8, 12 y 53 del experimento PUKI y los casos 14, 18 y 30 de la serie PUZRY, mostrando la tensión circunferencial de la vaina en color. Entre las dos imágenes de cada caso y junto a la temperatura correspondiente, se comparan el tiempo y la presión al momento de la explosión obtenidos mediante la simulación con los valores reportados experimentalmente. Si bien es cierto que un modelo en dos dimensiones con simetría de revolución puede ejecutar estos experimentos de forma correcta, definiendo la deformación y la tensión en conjunto con el momento de *burst* dependientes de la temperatura o la presión según el caso estudiado, las simetrías asumidas provocan que la simulación concluya al alcanzar la condición de falla, sin poder reproducir la fisura en la probeta. En cambio, un modelo en tres dimensiones, aún con el aumento en exigencia

computacional que supone, permite desarrollar tanto la creación de la fisura en el punto de falla como su evolución en los instantes finales del ensayo.

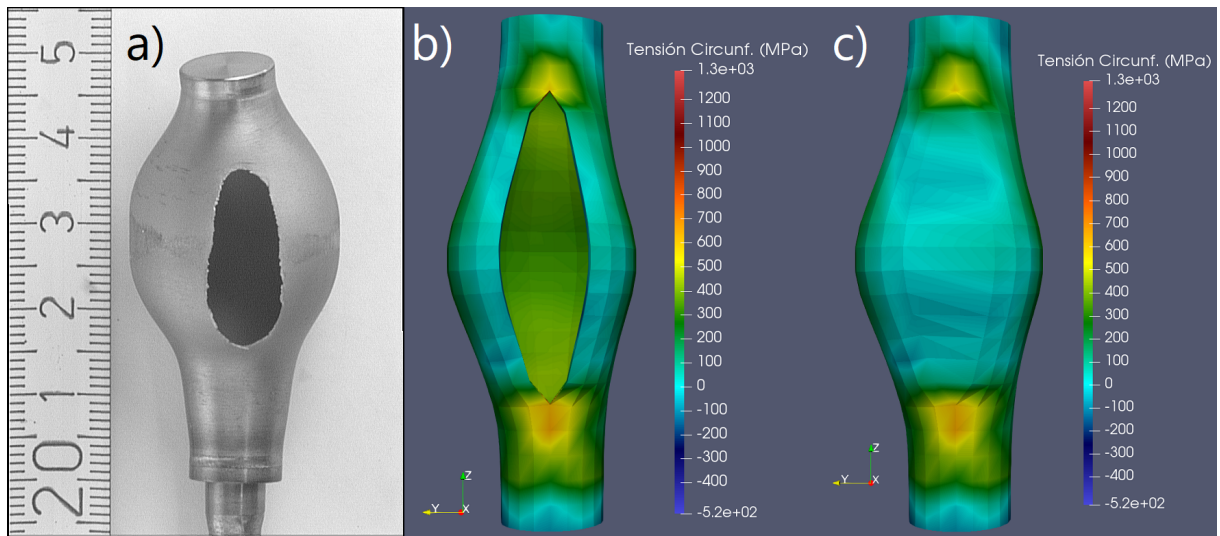
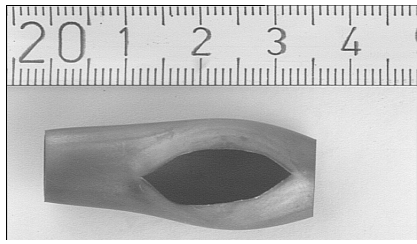
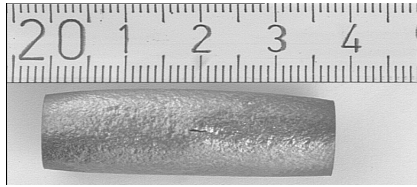
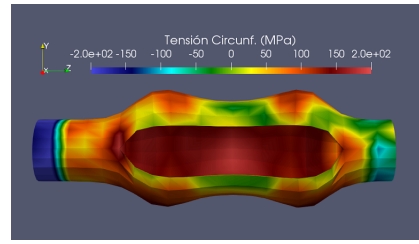


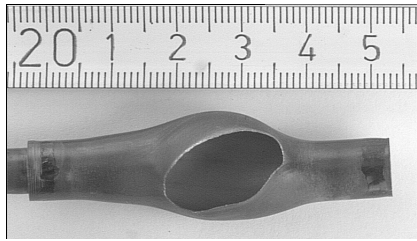
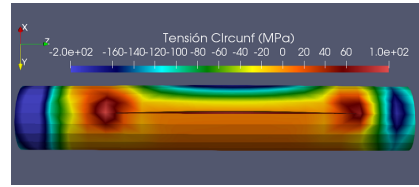
Figura 4.6: Visualización del PUZRY 26. a) Fotografía tomada después del ensayo. b) Estado final de la simulación quitando los elementos cohesivos “fisurados”, mostrando la rotura. c) Estado final de la simulación sin quitar los elementos cohesivos “fisurados”.



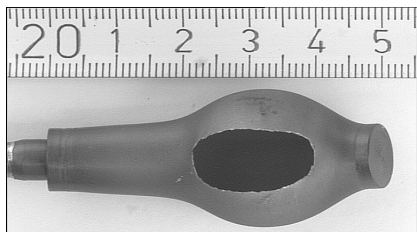
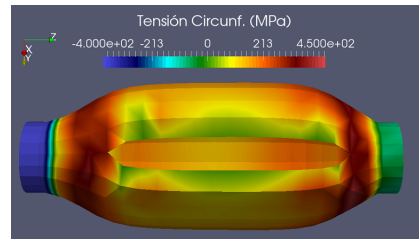
PUKI 8  
 Temperatura [K]  
 1073  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 566,40      564,50  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 4,37      4,36



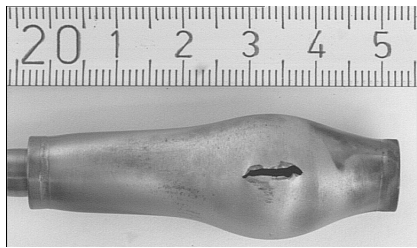
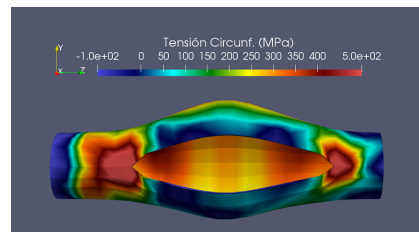
PUKI 12  
 Temperatura [K]  
 1273  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 122,40      121,59  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 0,89      0,88



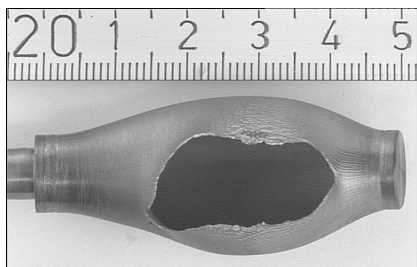
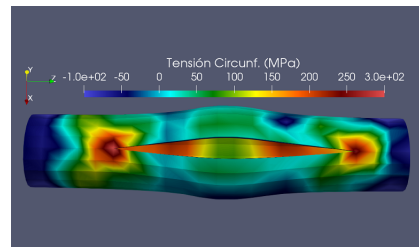
PUKI 53  
 Temperatura [K]  
 973  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 651,40      662,50  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 10,81      10,99



PUZRY 14  
 Temperatura [K]  
 973  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 892,40      778,50  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 10,61      9,29



PUZRY 18  
 Temperatura [K]  
 1173  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 233,70      194,28  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 2,69      2,24



PUZRY 30  
 Temperatura [K]  
 1073  
 Tiempo (*burst*) [s]  
 275,70      249,72  
 Presión (*burst*) [MPa]  
 7,25      6,57

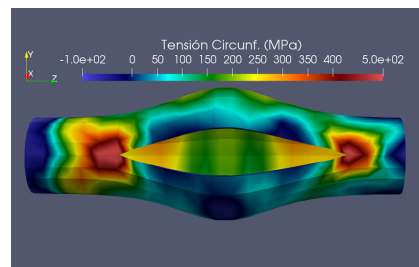


Figura 4.7: Visualizaciones y resultados experimentales (izquierda) y numéricos (derecha) para barras 8, 12 y 53 de serie PUKI y 14, 18 y 30 de serie PUZRY.

## 5. Experimentos de fisura con irradiación

Ha sido mencionado en la [Sección 1.4](#) que el modelo incluido previamente en DIONISIO para determinar el avance de una fractura utilizaba el método de la integral J de Rice. Entre las limitaciones que este método posee mencionadas en dicha sección, para su aplicación requiere en el dominio a tratar la presencia de un iniciador de la fisura, de modo de que exista un punto que concentre las tensiones y sobre el que se pueda calcular la integral de contorno correspondiente. Por ese motivo, se consideraba para ese caso un cuarto de sección de vaina en dos dimensiones con deformación plana y un iniciador que debe suponerse desde el comienzo del cálculo, seleccionando el extremo del espesor de la vaina desde el cual se origina la fisura [13, 171]. Esto se puede observar en la [Figura 5.1a](#), donde se muestra el dominio completo, junto a una ampliación a la zona que incluye el iniciador (marcado en rojo) en la [Figura 5.1b](#). Allí, las condiciones de contorno se definen de forma que aquellos nodos que corresponden al iniciador se encuentran libres mientras que el resto de los nodos de la base están impedidos en su desplazamiento vertical, dado que se suponen unidos al material que continua luego de este eje de simetría. Dentro de las ventajas especificadas previamente, el tratamiento del CZM elimina este requerimiento y no es necesario incluir ninguna entalla o iniciador. En nuestro modelo, empleamos dominios tridimensionales en donde, previo a iniciar los cálculos, se insertan elementos cohesivos que se suponen originalmente cerrados en una zona de la vaina a determinar por el usuario.

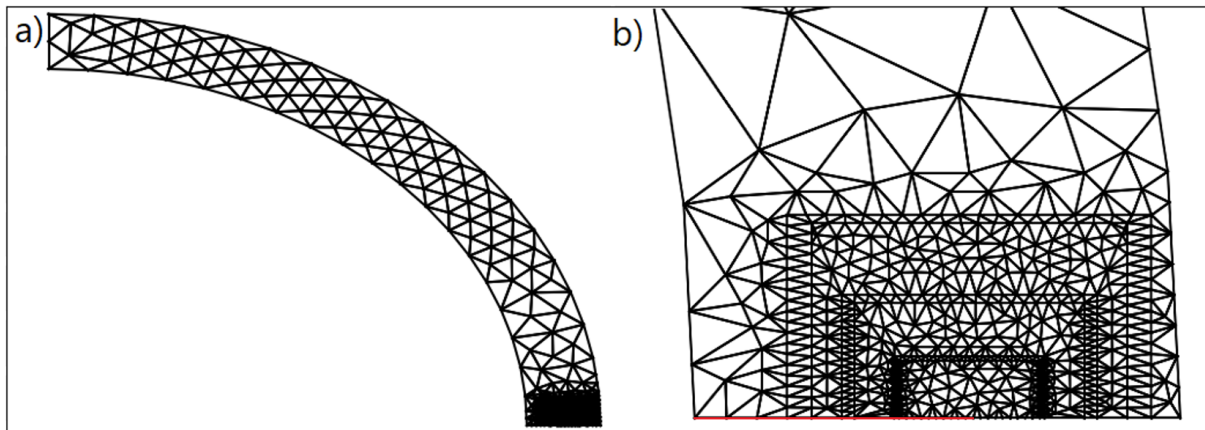


Figura 5.1: a) Esquema de la malla del dominio 2D del modelo de fractura mediante Integral J. b) Ampliación a la zona de la fisura.

La [Figura 5.2a](#) representa un ejemplo de mallado para el dominio, incluyendo dos pastillas en verde y la vaina en naranja junto a los elementos cohesivos de contacto (levemente visibles en rojo oscuro) y los elementos cohesivos de fisura, color azul oscuro, que no se llegan a apreciar en esta escala por su extrema delgadez. En la [Figura 5.2b](#), se realiza un corte vertical que permite ver el interior de la malla donde se observan claramente los

elementos cohesivos de contacto entre pastillas en color celeste y un poco más aquellos elementos cohesivos rojo oscuro que tratan el fenómeno de PCMI. Para la [Figura 5.2c](#), se produjo una ampliación extrema del grosor de los cohesivos de fractura para que se puedan apreciar en el mallado, al igual que en la [Figura 5.2d](#) donde se realizó un corte horizontal en aproximadamente el 70% de la altura del dominio, dejando ver que la zona cohesiva ocupa la vaina desde su superficie externa hasta el interior.

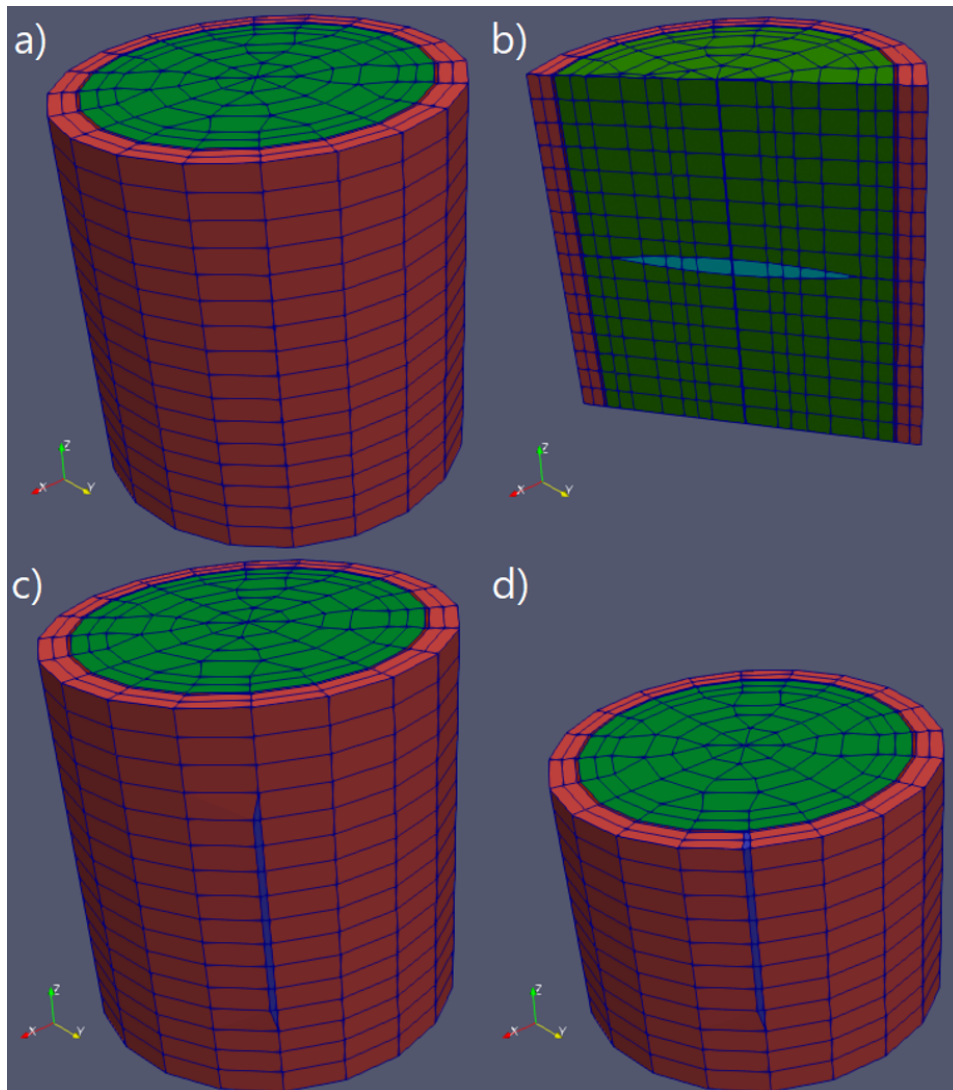


Figura 5.2: Esquemas de la malla del dominio 3D del modelo de fractura mediante zona cohesiva. a) Malla original con pastilla (verde), vaina (naranja) y cohesivos. b) Corte vertical; se observan cohesivos de contacto pastilla-vaina (rojo oscuro) y pastilla-pastilla (celeste). c) Cohesivos de fractura (azul oscuro) ampliados. d) Corte horizontal; se observa que los cohesivos de fractura (azul oscuro) ocupan el espesor completo de la vaina.

Al incluir los elementos cohesivos en el mallado original, el código construye una estructura de datos para cada uno de los elementos insertados que se encuentre en un extremo determinado, en la cual se almacenan todos los potenciales caminos que podría seguir una fisura desde este elemento hasta alcanzar el extremo opuesto. Esto permite al modelo detectar la existencia de una falla en la vaina, si en un determinado paso de simulación

existe alguno de estos caminos compuestos por elementos cohesivos conectados en el cual todos ellos se encuentren “abiertos” o “fisurados”, significando que existe una fisura que atraviesa el espesor de la vaina. Utilizando el modo principal de ejecución del código, se aplica la Ecuación 2.9 con las propiedades detalladas en la Tabla 1.2. Para determinar la sensibilidad del modelo respecto del mallado, se realizaron pruebas con diferentes densidades de malla respecto de la dirección radial. Tal como muestra la Figura 5.3, aumentar la cantidad de elementos en el radio de la vaina no produce diferencias significativas.

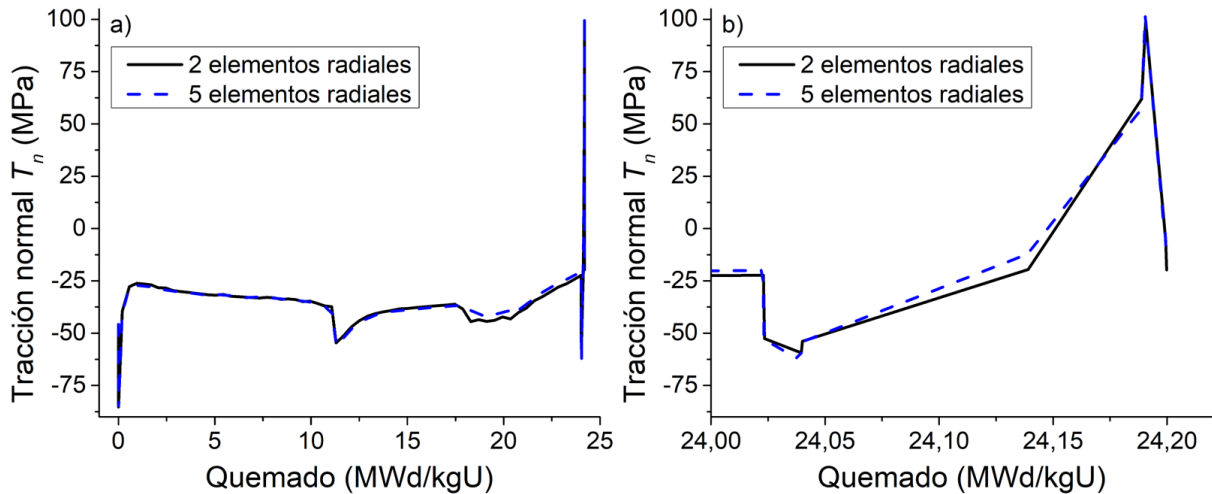


Figura 5.3: a) Tracción normal promedio de los cohesivos que dieron lugar a fisura en función del quemado para una discretización radial de la vaina en 2 y 5 elementos. b) Ampliación del final de las curvas.

## 5.1. Ensayos de rampas de potencia

En pos de analizar el comportamiento del módulo de fractura incorporado al código, junto con el resto de los modelos incluidos en DIONISIO, seleccionamos una gran variedad de casos dentro de experimentos en los que se sometieron barras completas de combustible a ensayos de rampas de potencia. El objetivo era evaluar su respuesta y establecer límites de potencia y tasa de variación en el tiempo a partir de los cuales se puede producir la falla de la vaina. Tal como fue desarrollado en la Sección 1.3, actualmente el código cuenta, entre otros, con modelos de *swelling* en la pastilla y de *creep* [55] y crecimiento bajo irradiación [134] para la vaina, dentro de los considerados para el dominio principal (pastilla-gap-vaina). Todos estos fenómenos, combinados con la dilatación térmica y la presión externa sobre la vaina, provocan el PCMI [47], que a su vez es la principal causa de la tensión circunferencial en la vaina pudiendo inducir la falla.

Los experimentos seleccionados incluyen a los proyectos SUPER-RAMP [116], OVER-RAMP [115], INTER-RAMP [118] y los DEMO-RAMP I [114] y II [113], todos ellos llevados a cabo por Studsvik con patrocinio internacional para estudiar la propensión a fallas debido a rampas de potencia que ocasionen PCMI en barras de combustible

típicas de reactores de agua liviana (LWR, del inglés *Light Water Reactor*) con diferentes características, luego de determinados procesos de irradiación base. Una vez concluida la etapa de irradiación base, los ensayos consistieron en una fase de condicionamiento inicial, una fase de rampa con un crecimiento veloz y pronunciado y una fase final de espera en el nivel final de la rampa (RTL, del inglés *Ramp Terminal Level*). La [Tabla 5.1](#) incluye una breve caracterización de cada uno de los proyectos. En todos ellos se utilizaron pastillas de  $\text{UO}_2$  en variados tamaños y cantidades (acorde a la longitud de las barras). Cabe mencionar que elegimos simular principalmente aquellos grupos que contenían al menos una barra que resulte en falla (evitando los grupos donde esto no había ocurrido en ninguna de las barras). En la [Figura 5.4](#) se muestran esquemas de los circuitos 1 y 2 del reactor R2 de Studsvik (actualmente decomisado) utilizado para ejecutar las rampas de potencia de todos los experimentos, junto a una fotografía del recinto del reactor tomada en 1965 [172].

Tabla 5.1: Caracterización de proyectos experimentales de rampas de potencia.

Proyecto	SUPER-RAMP	OVER-RAMP	INTER-RAMP	DEMO-RAMP I	DEMO-RAMP II
Ensayos (simulados/total)	14/28	35/39	20/20	5/5	8/8
Tipo de barra	PWR (subprograma)	PWR	BWR	BWR (diseño especial)	BWR
Material de vaina	Zry-4		Zry-2		
Largo de barra [cm]	39 y 113,5		53,8	47,5	39
Cantidad de pastillas	29 y 73		31	43 (huecas)	26
Quemado de irradiación base [MWd kgU <sup>-1</sup> ]	>30	12–31	10–20	14–17	25–29
Instalación de irradiación base	KWO Alemania y BR-3 Bélgica		R2 Studsvik	Ringhals I Suecia	KWW BWR Alemania
Instalación de rampa de potencia	R2 Studsvik				
Tasa de rampa de potencia [W cm <sup>-1</sup> min <sup>-1</sup> ]	100		40	40 y 100	40 y 170–220

Las barras fueron divididas en diferentes cantidades de sectores, acorde a las longitudes de cada una. Sin embargo, cada sector era representado mediante dos pastillas con la correspondiente fracción de vaina y el *gap*, junto a la zona cohesiva, incluida desde el inicio de la simulación en una porción angular de la vaina, comprendiendo desde el 25 %

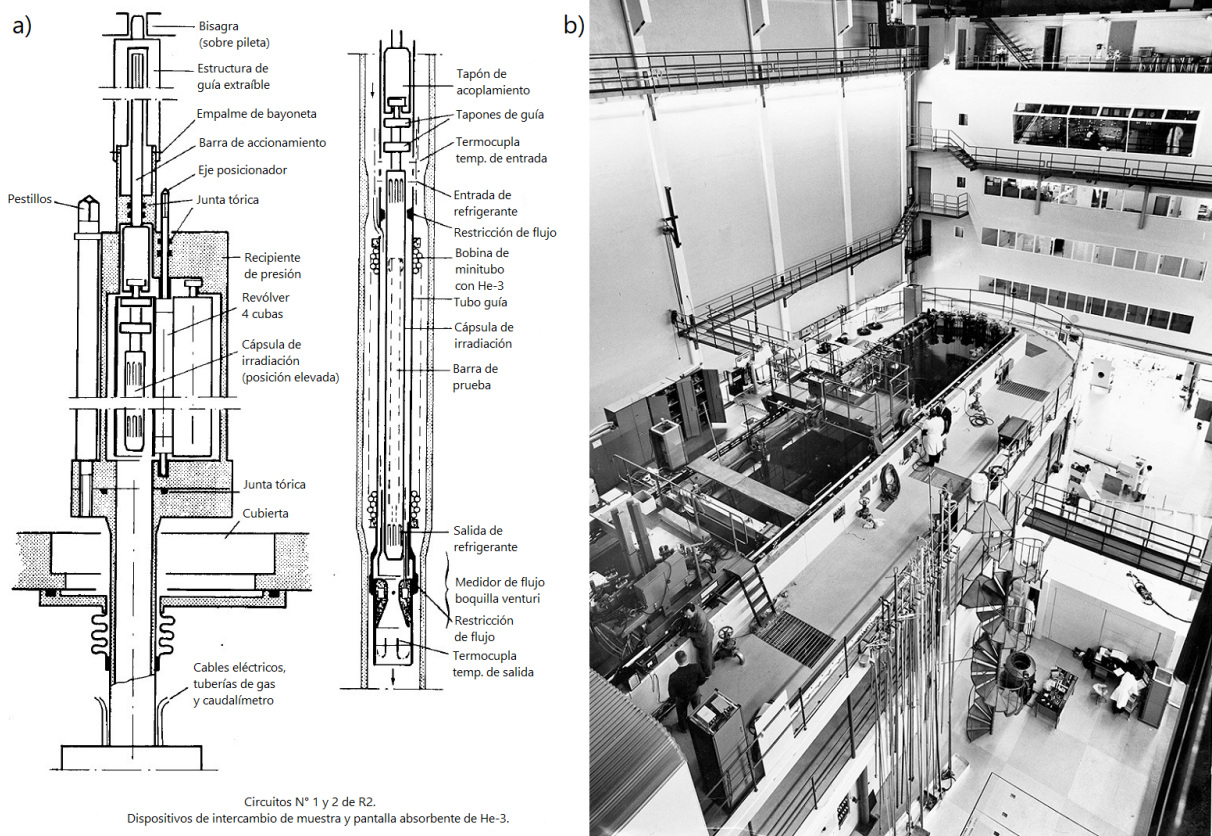


Figura 5.4: a) Esquemas de circuitos 1 y 2 del reactor R2, dispositivos de intercambio de muestras y pantalla absorbente de He-3. b) Fotografía del recinto del reactor R2 [172].

hasta el 75 % de la altura del dominio. De esta forma, nos aseguramos de que la CZ incluya siempre la interfaz de contacto entre ambas pastillas, ubicación propensa a que se inicien las fisuras por PCMI. Los estacionarios de la historia de potencia fueron divididos en pasos de un día, mientras que los transitorios se dividieron en pasos de  $10 \text{ W cm}^{-1}$ . Si bien los parámetros  $\delta_c$  y  $f$  mantienen los valores presentados en la [Subsección 2.1.2](#), un estado de tensiones en dirección circunferencial de la vaina particular, en este caso causado por el contacto con la pastilla, junto con las condiciones de presión y temperatura, producen variaciones en la ley cohesiva utilizada. La [Figura 5.5](#) presenta los resultados para todos los casos simulados con DIONISIO, indicando si la simulación resultó en falla de la vaina (F) o no (NF) para cada barra. Los círculos y triángulos (para F y NF, respectivamente) se corresponden con resultados correctos respecto de lo reportado en los experimentos mientras que las cruces y asteriscos expresan lo opuesto. Los cálculos resultan acertados para 74 de los 82 casos simulados, resultando en una precisión por sobre el 90 %. El modelo fue desarrollado de forma conservadora, considerando que es preferible una sobrepredicción de falla en la vaina en lugar de predicciones insuficientes. En otras palabras, al modificar algunos parámetros del modelo, se puede lograr una mejoría para algunos casos en los que el código resulta incorrectamente en falla en la [Figura 5.5](#), pero eso también altera el resultado para casos que son correctamente señalados como falla, llevando a un



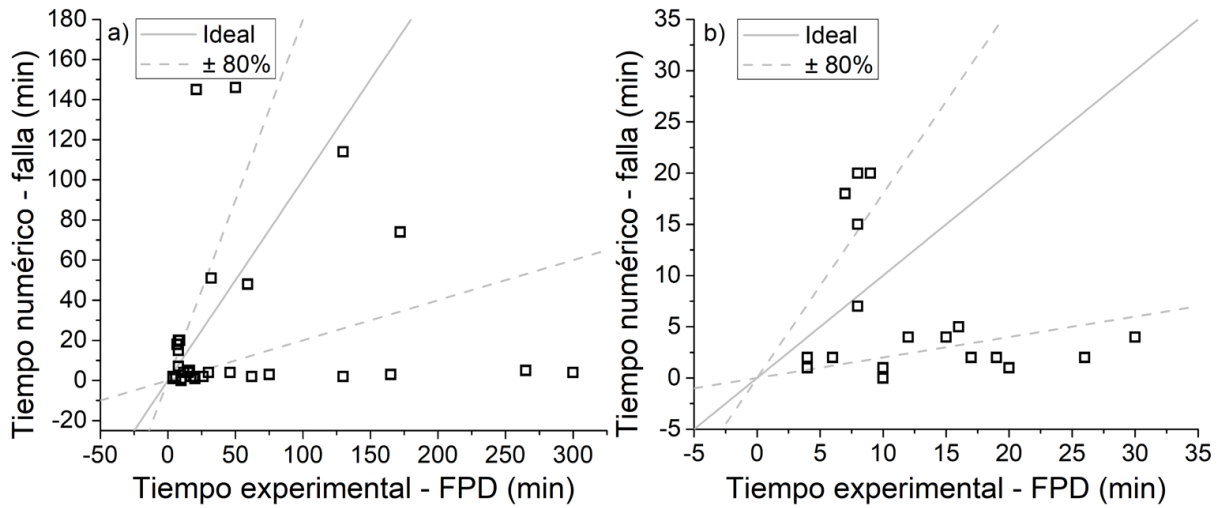


Figura 5.6: Tiempo de falla calculado en relación con los valores experimentales reportados de detección de productos de fisión (FPD) para los casos de falla correctos. Las líneas llenas y punteadas representan coincidencia perfecta y una desviación del 80 %, respectivamente. a) Gráfico completo. b) Ampliación en rango 0-35 minutos.

Para hacer un análisis más detallado de los resultados, seleccionamos las barras A20/2 y A20/3 del proyecto OVER-RAMP, incluidas en la Figura 5.5. Estas dos barras permiten hacer una comparación de interés ya que la primera resulta en falla y su contraparte no, a pesar de tener características prácticamente iguales y ser expuestas a condiciones experimentales similares, con una notable excepción en la historia de potencia, dado que el RTL es  $27 \text{ W cm}^{-1}$  mayor para el caso A20/2. En la Figura 5.7, se grafica la tracción normal  $T_n$  de la zona cohesiva en función del desplazamiento normal  $\delta_c$  para ambas barras. La barra fallada (línea negra llena) presenta un mayor desplazamiento con la fuerza cohesiva decreciendo hacia cero hasta producirse la fisura luego de alcanzar el valor máximo. Esta curva es un promedio de todos los elementos que alcanzaron el criterio de falla. Por otro lado, la curva que corresponde a la barra A20/3 (línea azul punteada) no alcanza el mencionado criterio de falla, dado que su separación normal se detiene aproximadamente en el máximo. Dado que en este caso ningún elemento alcanza la fisura, la curva representa un promedio de todos los elementos de la CZ. Los valores negativos en el inicio de las curvas son consecuencia de la compresión de la vaina antes de que ocurra el contacto con la pastilla.

La Figura 5.8 incluye una comparación de la tensión circunferencial de la vaina entre las barras A20/2 (línea negra llena) y A20/3 (línea azul punteada) en la última etapa del quemado. Las curvas presentan los valores negativos esperados antes de la rampa final, ya que la vaina se encuentra en compresión. Estos valores se revierten a positivos al producirse la interacción mecánica con la pastilla, producto de la pronunciada rampa de potencia al final del caso. En la figura se puede observar cómo las diferencias en las historias de potencia conducen a condiciones que ocasionan distintas intensidades en el fenómeno de PCMI, causando suficiente variación entre la tensión circunferencial de las

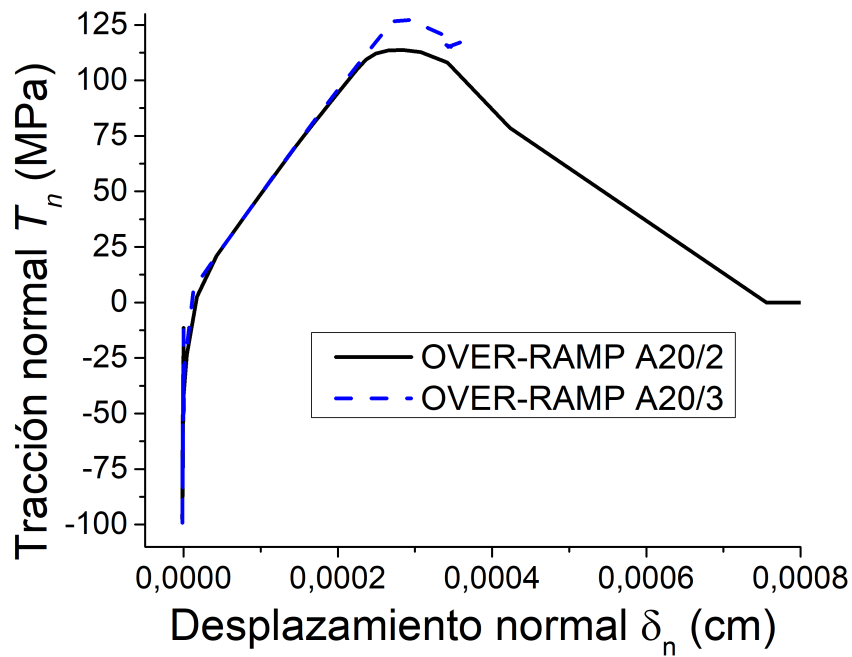


Figura 5.7: Tracción normal en función del desplazamiento normal para la zona cohesiva de las barras A20/2 y A20/3 del experimento OVER-RAMP.

vainas para inducir la falla en la barra A20/2 pero no en la barra A20/3.

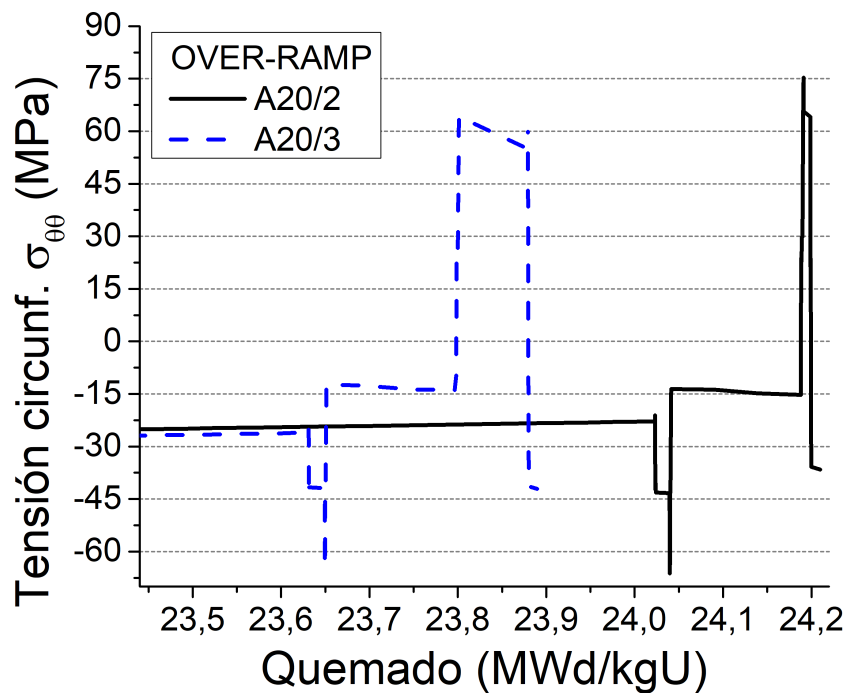


Figura 5.8: Comparación de la tensión circunferencial de la vaina en función del quemado en el final de la simulación entre las vainas A20/2 (línea negra llena) y A20/3 (línea azul punteada).

La Figura 5.9 presenta la densidad de energía superficial  $\gamma$  (Ecuación 2.1) de la CZ para las barras A20/2 (línea negra llena) y A20/3 (línea naranja de guion-punto) del proyecto OVER-RAMP en conjunto con los límites de fractura (valores críticos, línea verde de guiones para A20/2 y línea azul de guion-punto-punto para A20/3) en función

del desplazamiento normal de la CZ (Figura 5.9a) y en función del quemado (Figura 5.9b). Al igual que en la Figura 5.8, esta última figura se encuentra ampliada para ver con mayor claridad la etapa final del ensayo. El decrecimiento que se aprecia para los límites críticos a medida que avanza la simulación es producto de la variación de parámetros de los cuáles este depende, como la temperatura. Tal como en la Figura 5.7, el desplazamiento normal para A20/3 concluye con  $\gamma$  sin alcanzar el valor crítico necesario para formar una fisura, lo que también se puede observar al final del quemado. Esto contrasta con la situación de A20/2, donde la tensión superficial alcanza el valor crítico al ser sometida a la brusca rampa de potencia al final del caso, lo que también evidencia que prácticamente la totalidad del desplazamiento normal de la CZ es causada en este momento.

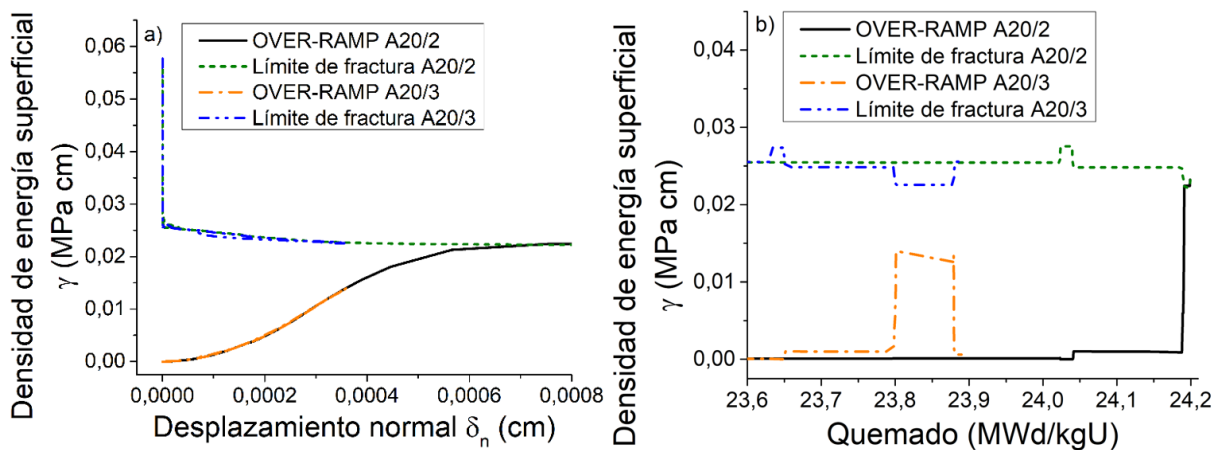


Figura 5.9: Densidad de energía superficial ( $\gamma$ ) en función del desplazamiento normal de la zona cohesiva (a) y en función del quemado (b, ampliación al final de la simulación) junto al límite de fractura para las barras A20/2 y A20/3 del experimento OVER-RAMP.

## 5.2. Modelo de fragilización por hidrógeno

Con el objetivo de ampliar el rango de aplicación del modelo de fractura, se comenzó a desarrollar una variante que permitiría representar la fragilización de la vaina causada por la captura de hidrógeno a través de la superficie externa en contacto con el agua a alta temperatura. Este fenómeno es posible de ocurrir en diversas circunstancias, por ejemplo, ante la rotura de la capa externa de óxido por fricción de partículas que se pueden encontrar presentes en el refrigerante circulando a velocidad considerable [173]. Para lograr este comportamiento en el modelo, se procedió a debilitar las funciones de cohesión de algunos elementos que componen la CZ, reduciendo tanto el desplazamiento normal permitido antes de formar la fisura ( $\delta_c$ ) y la tensión máxima de la ley cohesiva. Esta fragilización se produjo de forma gradual, aumentando la cantidad de elementos modificados y el factor debilitante de forma proporcionalmente directa respecto del radio medio del elemento cohesivo. A modo de ejemplo, en la Figura 5.10 se presenta un esquema de zona cohesiva fragilizada. Se pueden observar elementos de color azul que aplican la

ley original y otros en distintas intensidades de rojo, que usarán una función debilitada. El tono de rojo denota el grado de modificación, con un color más oscuro para elementos más débiles. También se puede notar que, hacia el radio externo, hay una mayor cantidad de elementos que usarán una función alterada. Ambas graduaciones responden a que la cara externa de la vaina es la que se encuentra en contacto con el agua, por ende, sufrirá el efecto de la hidruración con mayor intensidad y en un área más extensa, reduciéndose a medida que se adentra en el volumen del metal.

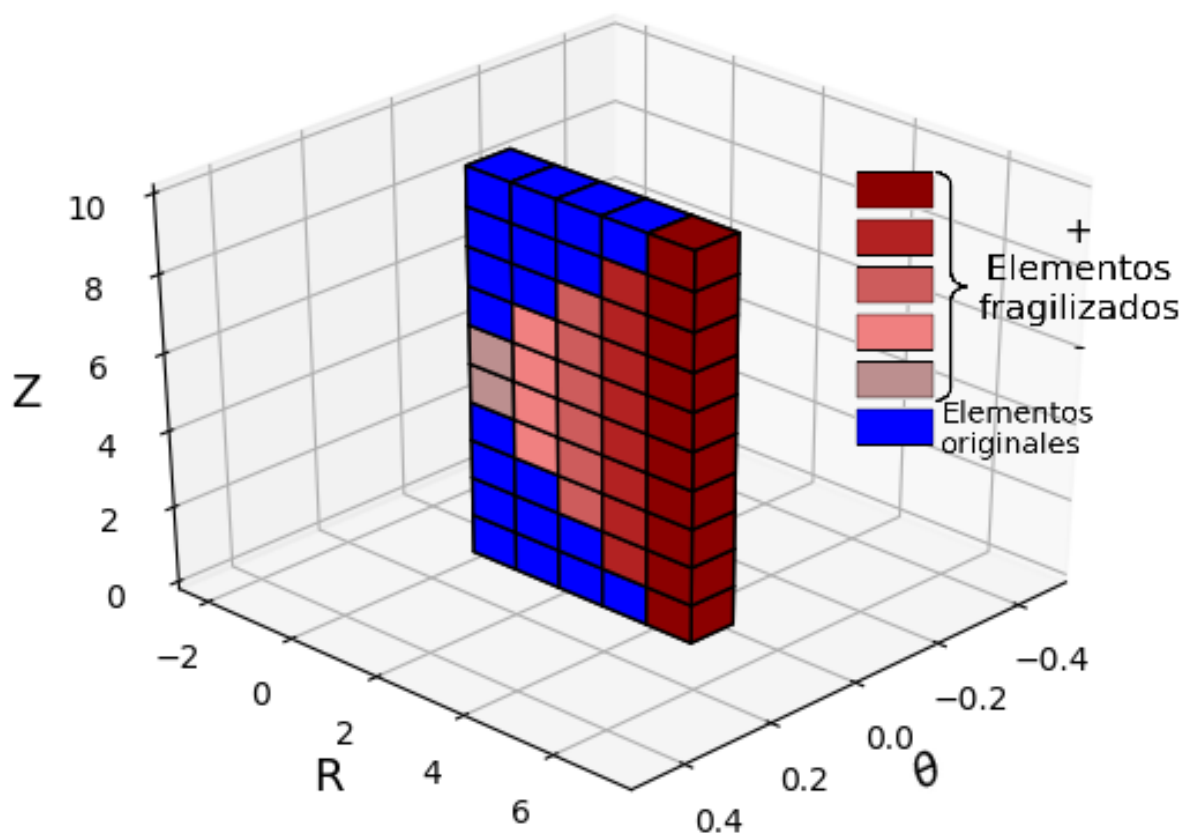


Figura 5.10: Esquema de implementación de la fragilización por hidrógeno en la zona cohesiva.

Para realizar pruebas del enfoque de fragilización desarrollado, se utilizó una barra típica de un reactor PHWR con una historia de potencia genérica. En una primera instancia, se comprobó que la historia de potencia no producía la rotura de la vaina con el modelo de fractura original, sin modificaciones. Se aplicó un factor de fragilización con una variación lineal desde 9% para los elementos internos hasta 4% para los externos, en función de experimentos reportados en la literatura [174]. En la Figura 5.11 se puede observar el comportamiento de la zona cohesiva con la función original y con la función debilitada. Ambos casos sufren una compresión similar y comienzan a diferir cuando se produce el aumento sostenido de la tensión causado por el contacto con la pastilla. El caso fragilizado incrementa su resistencia con mayor velocidad y alcanza rápidamente la tensión máxima, seguida de la posterior relajación con la formación de la fisura hacia el final de la simulación, mientras que, en el caso original, la CZ continúa aumentando su

tensión de resistencia a una tasa menor, sin alcanzar el valor máximo. En la [Figura 5.12](#) se muestra una imagen del dominio, compuesto por dos pastillas, la vaina y el *gap*, con mapas de color representando la tensión efectiva de Von Mises. Se llega a distinguir la zona cohesiva, con una ampliación sobre la misma en la [Figura 5.12b](#).

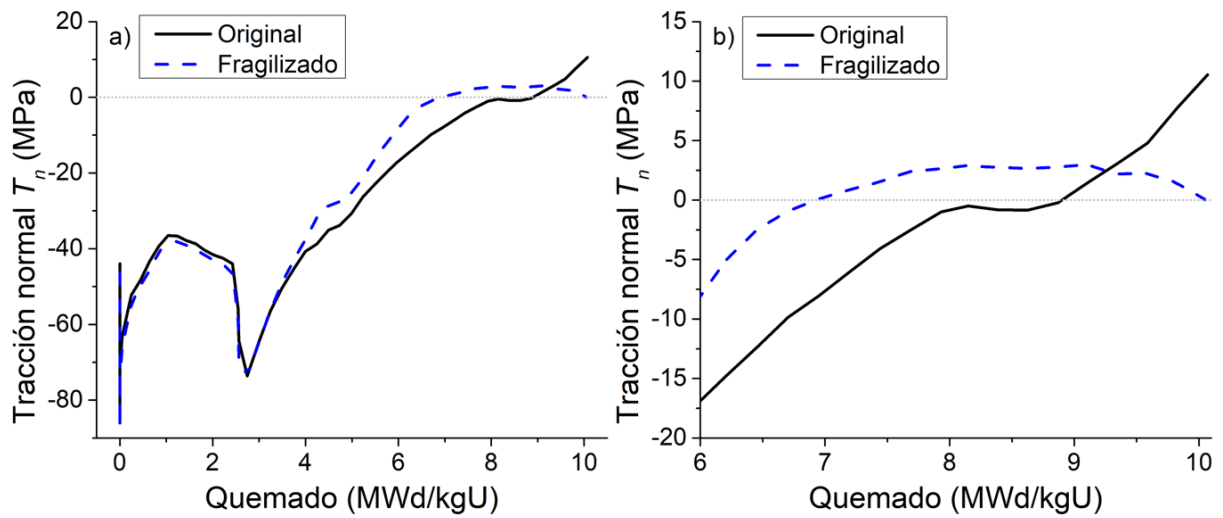


Figura 5.11: a) Comparación de tracción normal en función del quemado para la zona cohesiva con la función original y con fragilización. b) Ampliación en el final de la simulación.

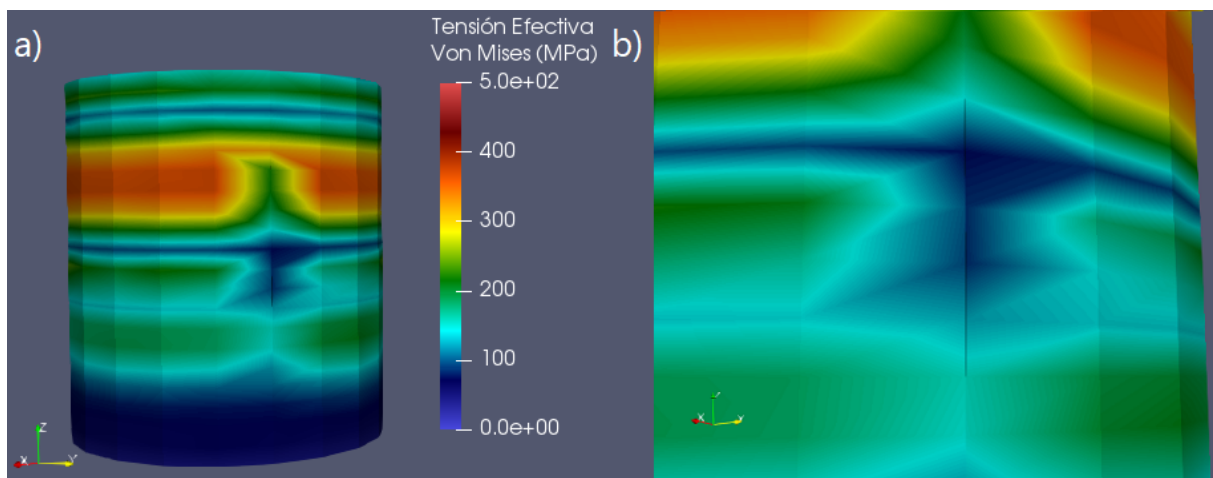


Figura 5.12: Dominio del caso de fragilización con tensión efectiva de Von Mises en mapa de color. a) Dominio completo. b) Ampliación a la zona cohesiva.

## 6. Experimentos de contacto pastilla-vaina

Como ya se ha explicado en la [Sección 1.3](#) de esta tesis, el dominio principal tratado por DIONISIO en cada sector corresponde al de una o dos pastillas, la vaina que cubre al combustible y el espacio entre ambos materiales, denominado *gap*. Dependiendo del diseño de la barra y debido a las variaciones que sufre la potencia durante la operación del reactor, así como a la evolución de los parámetros de este complejo sistema, el *gap* entre la vaina y la pastilla puede cerrarse total o parcialmente y luego permanecer en esa condición o abrirse nuevamente, de acuerdo con las circunstancias. Es por esto que el código presta especial atención al desarrollo de algoritmos de contacto entre materiales, ya que este problema representa uno de los mayores desafíos de la simulación, influyendo sobre las restantes variables del sistema.

Las condiciones de este proceso varían durante la permanencia de la barra dentro del reactor y resultan ser muy sensibles a las variaciones bruscas de potencia (rampas). Durante una rampa ascendente, tiene lugar un aumento de la temperatura del sistema que provoca dilatación térmica e hinchado de la pastilla y puede conducir tanto al comienzo de un nuevo contacto como al aumento de las superficies que contactan.

Para el caso en dos dimensiones con simetría de revolución, sobre cada uno de los dominios se utiliza una formulación irreducible en los desplazamientos junto con multiplicadores de Lagrange para tratar las fuerzas sobre la frontera entre ambos cuerpos. Esta formulación se deriva de la aplicación del principio de los trabajos virtuales, suponiendo una ecuación de continuidad para los desplazamientos en la frontera [175-177]. Para simplificar dicho algoritmo, se supone contacto localizado y sin deslizamiento entre pastilla y vaina [11, 178]. El principal obstáculo que genera la inclusión de este algoritmo en DIONISIO proviene del carácter evolutivo del problema, que no permite predecir la cantidad de nodos que van a estar en contacto en un dado paso temporal. En cada etapa de resolución, se debe construir el sistema de ecuaciones con el número de incógnitas adicionales por esta condición. En una historia de potencia general, entre dos pasos sucesivos, pueden ocurrir tres situaciones:

- a) No contacto a no contacto: dos materiales separados por un *gap* que permanece abierto, generando una matriz cuadrada de dos bloques sin conexión.
- b) No contacto a contacto: se inicia el contacto durante el paso de tiempo en proceso. El sistema debe determinar cuántos pares de nodos pasan a estar conectados para luego calcular el número de filas y columnas con las que se amplía la matriz del sistema.
- c) Contacto a contacto: los materiales se encuentran conectados, aumenta o disminuye la cantidad de pares de nodos involucrados, por lo que el sistema de ecuaciones debe adecuarse dinámicamente. Incluye la posible condición de contacto a no contacto en

la que, luego del paso de tiempo considerado, ambos materiales están nuevamente separados por un *gap* (todos los pares de nodos se desconectan).

Algunos escenarios precisan modelos explícitamente tridimensionales, ya que pueden incluir deformación asimétrica de la vaina tendiendo a un cilindro elíptico, condiciones térmicas asimétricas causadas por la posición de la barra en el núcleo del reactor, defectos superficiales en la pastilla, como hendiduras, producto del ensamblado de los EECC y situaciones como accidentes de tipo LOCA que involucran fenómenos como el *ballooning* de la vaina. Extender el algoritmo utilizado en el caso bidimensional a tres dimensiones conllevaba diversos inconvenientes. Cada par de nodos entre los que ocurre contacto requiere agregar al sistema una nueva ecuación por cada dimensión que los conecta y cada ecuación conectora agrega un cero en la posición diagonal, lo que causa que la matriz del sistema pierda su condición de diagonal dominante. Este problema puede ser mitigado al intercambiar filas utilizando métodos como el de gradiente biconjugado para su solución [45], pero esto a su vez ocasiona que la matriz se vuelva asimétrica. Además, el supuesto de ausencia de deslizamiento imposibilita considerar las fricciones y tensiones tangenciales producto del contacto.

En contraposición, considerando las características del problema, utilizar elementos cohesivos resuelve en forma natural muchas de las dificultades del algoritmo previo, además de otorgar la versatilidad necesaria para dar una respuesta combinada al contacto acoplado al problema de fractura de las vainas. Para demostrar el correcto funcionamiento de este modelo y, por consiguiente, el desempeño adecuado del código DIONISIO 3D, hemos seleccionado una batería de experimentos que den cuenta del fenómeno de PCMI en conjunto con todos los módulos acoplados en el código.

## 6.1. Experimento MOX

En el experimento MOX, se construyeron e irradiaron los primeros prototipos argentinos de combustibles de óxidos mixtos (MOX, del inglés *mixed oxide*) para reactores PHWR. Fueron construidos en los laboratorios Alfa de la CNEA y dos de ellos, rotulados A.1.2 y A.1.3, fueron irradiados en el reactor de alto flujo de Petten, Países Bajos, desde enero de 1989 a octubre de 1991. Ambas barras contenían veintiún pastillas y fueron sometidas a una potencia casi constante. Posteriormente, la barra A.1.3 fue sometida a una rampa de potencia [133]. Los análisis post irradiación fueron realizados en *Forschungszentrum (Karlsruhe, Alemania)*, incluyendo inspecciones visuales. Nos hemos enfocado principalmente en la barra A.1.3 por haber tenido condiciones de mayor exigencia.

Una de las características más notables es la presencia de *ridges* en la superficie de la vaina acompañando la distribución de las pastillas, denominando de esta forma a la diferencia en la deformación radial de la vaina que genera una cadena de crestas y valles

a lo largo de su extensión. Se puede observar un incremento general del radio en la barra, con un 0.55% a mitad de la pastilla formando los valles y un efecto más significativo en las zonas entre dos pastillas formando las crestas, donde la deformación alcanza aproximadamente el 1%. La Figura 6.1 muestra el diámetro promedio en función del quemado para cada uno de los cinco sectores en los que dividimos la barra (resultando en 4,2 pastillas por sector), donde el sector 1 es el más cercano a la base y el sector 5 el más cercano a la parte superior de la barra. La historia de potencia difiere entre los sectores, con el quinto sector siendo el de mayor potencia lineal. En la figura se incluye la historia de potencia del sector 5 y un esquema de la barra con la potencia lineal de cada sector previo a la rampa final junto con el valor experimental del diámetro de cada sector al final de la irradiación, de buen acuerdo con los resultados numéricos.

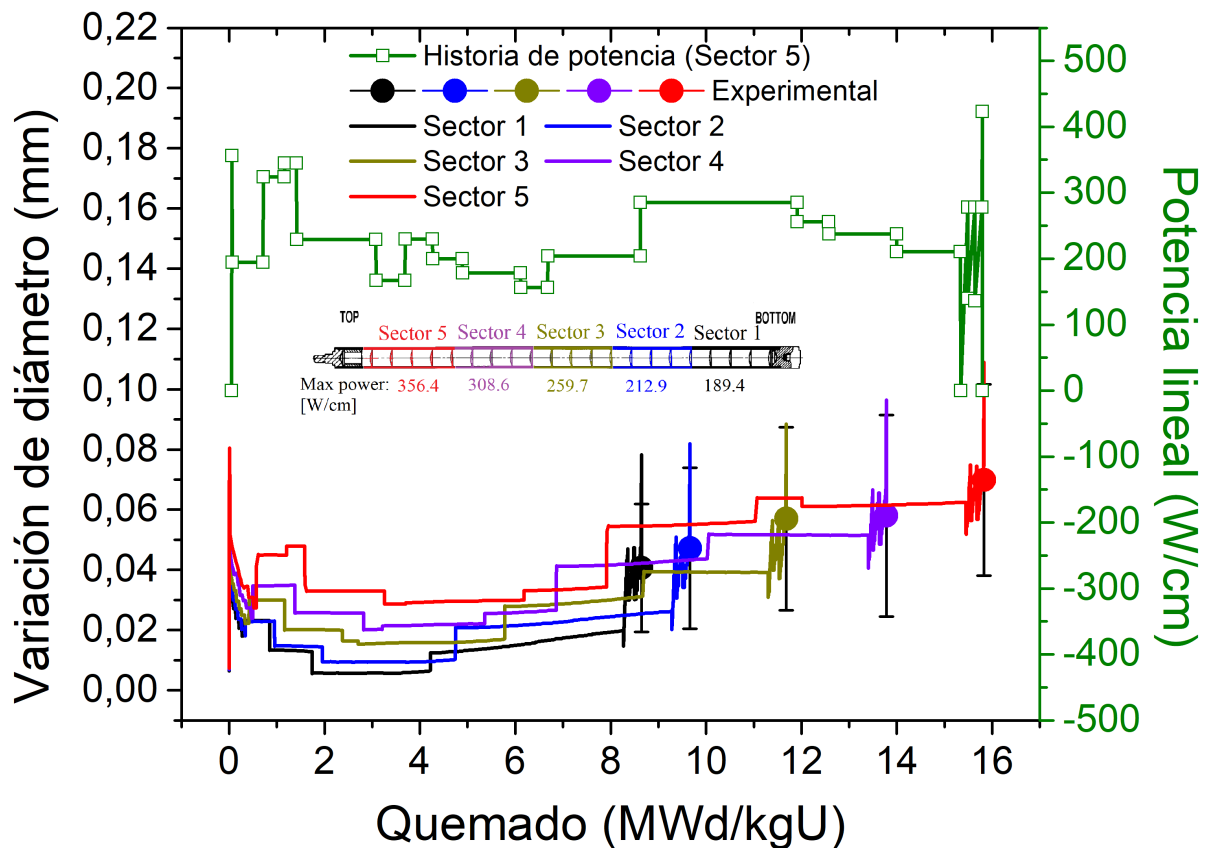


Figura 6.1: Variación del diámetro externo de la vaina por sector axial en función del quemado, junto al valor final experimental para el caso MOX. Arriba en verde, historia de potencia del sector 5 (mayor quemado) con rampas finales (segundo eje vertical). Se incluye un esquema de la barra, los sectores y la máxima potencia de cada uno (previo a la rampa final).

En la Figura 6.2 se exhibe la evolución de los radios a mitad de pastilla y en la zona entre pastillas donde la deformación es mayor, para el sector 5 (Figura 6.2a) y el promedio de la barra A.1.3 completa (Figura 6.2b). También se compara el *ridge* (la diferencia entre ambas medidas) con los valores experimentales finales. Por otro lado, en la Figura 6.3, se presenta la evolución radial de las superficies de contacto, es decir, el radio de la pastilla y el radio interno de la vaina, junto con la tensión circunferencial de la vaina

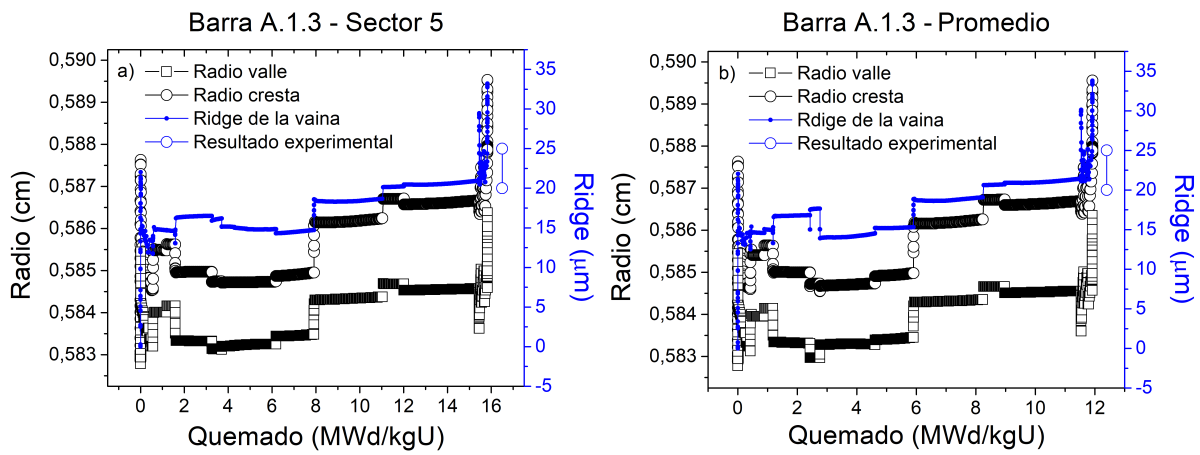


Figura 6.2: Evolución de los radios medio y superior y el ridge (diferencia entre radios) para MOX. a) Sector 5 (mayor quemado). b) Promedio de la barra completa.

en función del quemado, evidenciando las variaciones de tensión con valores crecientes en respuesta al contacto y valores decrecientes producto de la compresión por la presión externa, cuando los cuerpos no ejercen fuerza entre sí. En la figura se puede observar un pequeño solapamiento de los cuerpos. Esto se debe principalmente a que ambos radios son promedios de la circunferencia completa. El margen de solapamiento se encuentra por debajo de los  $2 \mu\text{m}$ , lo que resulta esperable (especialmente en un dominio tridimensional), producto de la forma en la que el CZM obtiene la solución numérica para el contacto, como se describe en las Secciones 2.1 y 2.2. En la Figura 6.4 se muestran mapas de color del dominio en el instante de máxima potencia lineal para una pastilla representativa del sector 5 del experimento MOX. La Figura 6.4a contiene una distribución de la tensión efectiva de Von Mises, con los mayores valores en el centro de la pastilla, decreciendo tanto en la dirección axial como en la radial. En la Figura 6.4b se plasma un perfil de temperaturas con valores decrecientes desde el centro de la pila hacia el exterior en dirección radial. Los desplazamientos radiales se han aumentado veinticinco veces para facilitar la visualización del efecto “bambú” en la vaina.

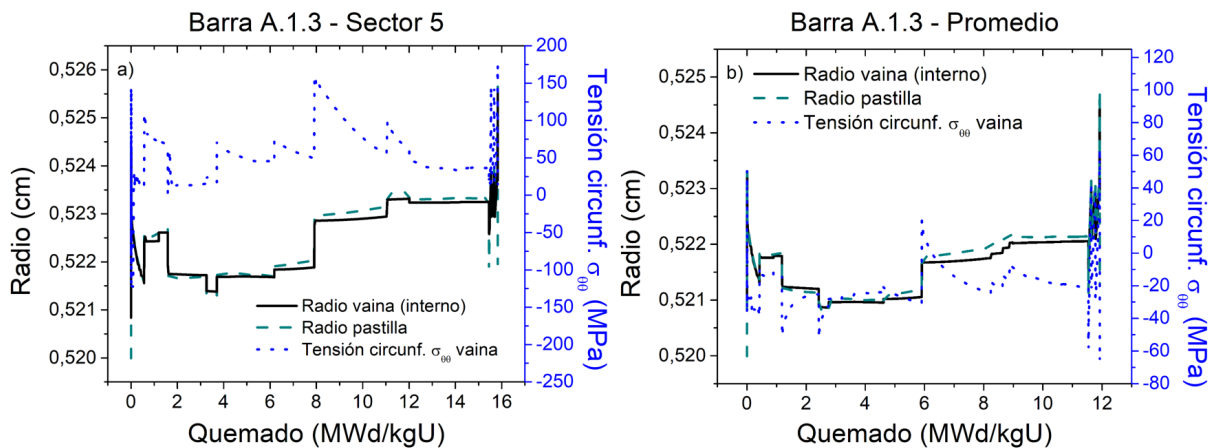


Figura 6.3: Evolución de los radios de pastilla e interno de vaina (superficies de contacto) y la tensión circunferencial de la vaina para MOX. a) Sector 5 (mayor quemado). b) Promedio de la barra completa.

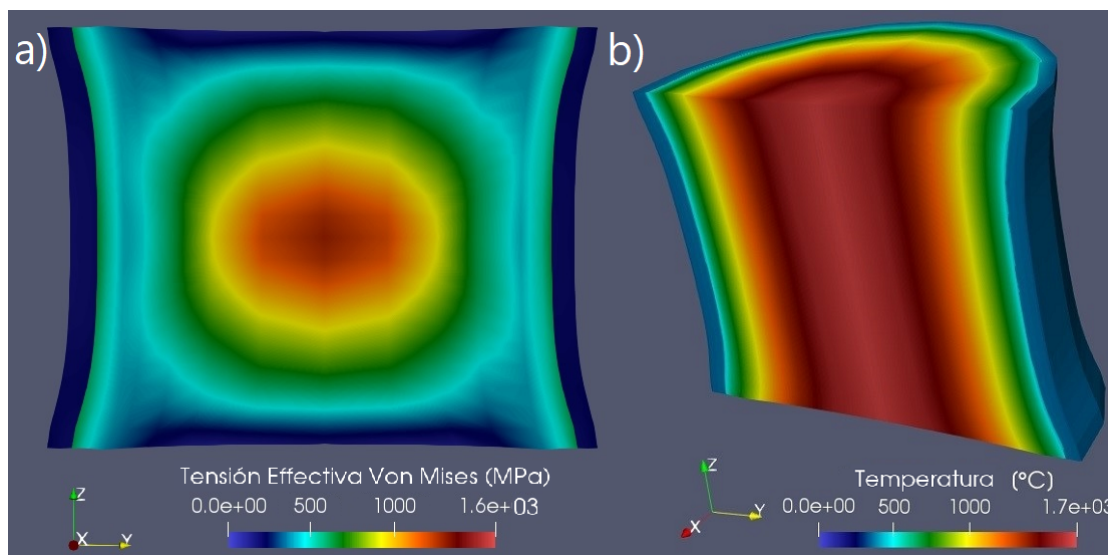


Figura 6.4: Mapas de color de tensión efectiva de Von Mises (a) y temperatura (b) de una pastilla representativa en el experimento MOX (desplazamientos radiales  $\times 25$ ).

## 6.2. Experimento CONTACT

En la serie de experimentos CONTACT se usaron pequeñas barras formadas por vainas de Zry-4 y pastillas de  $\text{UO}_2$  de diseño típico PWR de  $17 \times 17$ . El objetivo de los ensayos era comprender mejor el rendimiento de los combustibles. Las barras fueron irradiadas en un circuito cerrado de agua presurizada a potencia prácticamente constante. El elemento rotulado CONTACT 1 se irradió a  $40 \text{ kW m}^{-1}$  hasta un quemado de  $\sim 22 \text{ MWd kgU}^{-1}$ . El elemento CONTACT 2 fue irradiado a una potencia constante aproximada de  $25 \text{ kW m}^{-1}$  con una presión interna de helio de entre 0,1 y 0,2 MPa. El ensayo fue detenido de forma anticipada por una falla cuando el quemado había alcanzado los  $5,5 \text{ MWd kgU}^{-1}$  y la barra fue reemplazada por otra de diseño idéntico denominada CONTACT 2bis. Esta segunda barra alcanzó un quemado de  $12,4 \text{ MWd kgU}^{-1}$ . Durante los ensayos se midió la deformación de la vaina en conjunto con resultados de otros parámetros.

Las mediciones del diámetro de la vaina para el CONTACT 1 en función del quemado muestran una reducción inicial por el llamado *creep down* causado por la presión externa, seguido de una dilatación gradual luego del cierre del *gap* por el contacto pastilla-vaina. Por su lado, la evolución del diámetro en función del quemado para el CONTACT 2bis exhibe un incremento inicial del diámetro en los primeros tres ciclos de irradiación. Sin embargo, en el reporte experimental no se describe ningún motivo que pueda causar este comportamiento. Se sucede un decrecimiento progresivo al igual que en el CONTACT 1 hasta alcanzar un diámetro de equilibrio aproximadamente  $30 \mu\text{m}$  menor que el valor inicial.

En líneas generales, se puede observar una historia de mayor potencia para el caso CONTACT 1, lo que lleva a un PCMI más intenso y en consecuencia una mayor deforma-

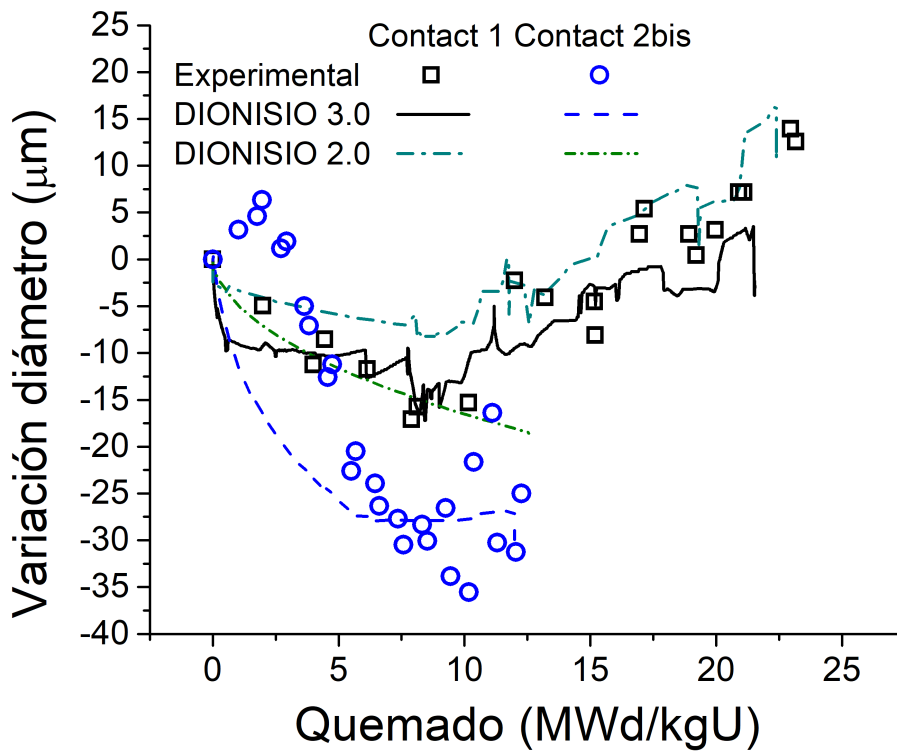


Figura 6.5: Deformación axial de la vaina en función del quemado para Contact 1 y Contact 2bis.

ción de la vaina que la que se aprecia en el CONTACT 2bis (Figura 6.5). Los resultados numéricos presentan un buen acuerdo con los valores experimentales, que de por sí presentan una dispersión considerable. Adicionalmente, se puede observar en la Figura 6.5 que la versión actual de DIONISIO (3.0) produce resultados comparables y más cercanos a las mediciones experimentales que la versión anterior (2.0). En la Figura 6.6 se grafica el radio interno de la vaina y el radio de la pastilla junto a la tensión circunferencial de la vaina en función del quemado. Se puede observar que la tensión sigue el comportamiento esperado, decreciendo cuando predomina la presión externa e incrementándose producto del contacto pastilla-vaina.

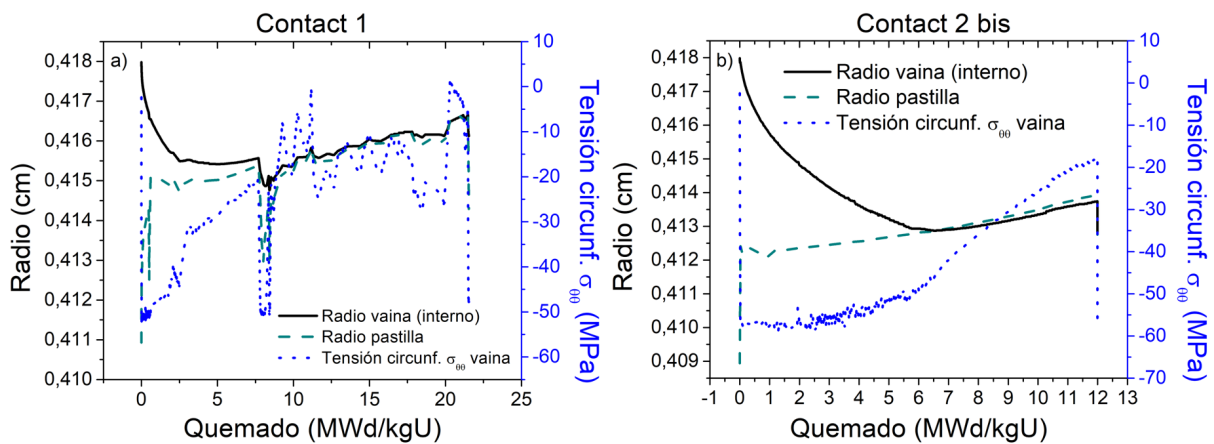


Figura 6.6: Evolución de las superficies de contacto y la tensión circunferencial de la vaina. a) Contact 1. b) Contact 2bis.

### 6.3. Experimento IRDMR

La serie denominada IRDMR (siglas en inglés de *In-Reactor Diameter Measuring RIG*) [179] consistió en dos experimentos, Exp-FIO-118, que constó de dos irradiaciones de elementos individuales (ABS y ABH) y Exp-FIO-119, con cinco irradiaciones de barras individuales (ACH, ACA, ACC, ACK, ACG). Para las simulaciones, consideramos al elemento ABS, cuyo objetivo era investigar el efecto de la densidad del combustible en la respuesta dimensional del elemento a la variación de potencia, y al elemento ACA, involucrado en irradiaciones de rampas de potencia. Los ensayos fueron realizados en los laboratorios Chalk River de AECL (*Atomic Energy of Canada Limited*) en el reactor NRX de tipo PHWR entre los años 1978 y 1983. Los EECC estaban compuestos por pastillas de  $UO_2$  enriquecido al 3,5 % en peso y vainas de Zry-4 con un recubrimiento de grafito sobre la superficie interna. Los cambios diametrales de las barras individuales fueron medidos durante la irradiación.

En la Figura 6.7 se pueden observar los cálculos de diámetro y *ridge* para ambos casos, de buen acuerdo con las mediciones experimentales, mostrando aumentos y disminuciones ante las variaciones de potencia. Además de haber sido preirradiado a una potencia de  $30 \text{ kW m}^{-1}$ , el elemento ACA fue irradiado a una tasa de potencia menor que la del elemento ABS, por lo que se puede observar en la Figura 6.7b que presenta menores valores de *ridge*.

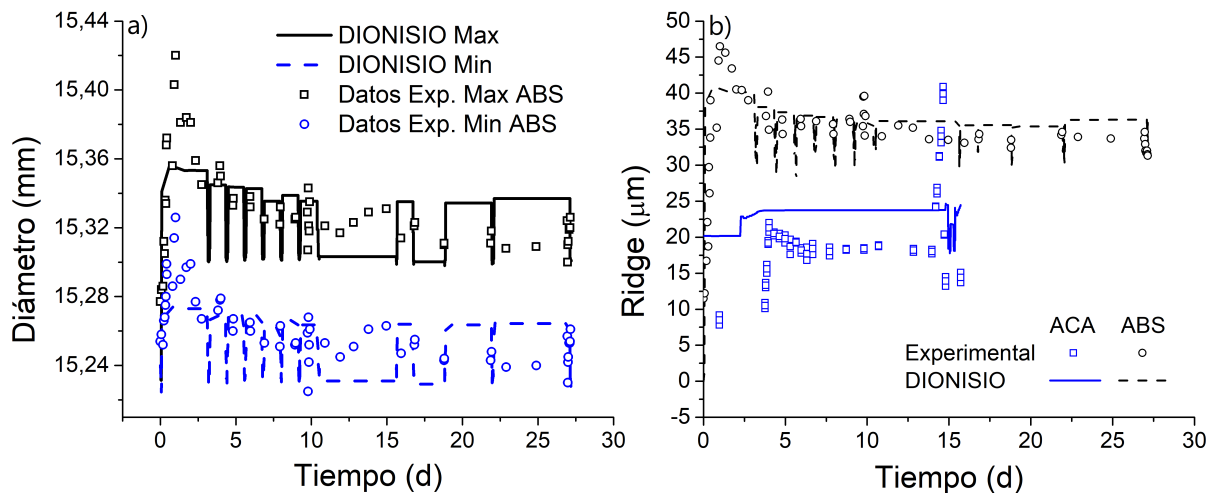


Figura 6.7: a) Diámetros máximo y mínimo numéricos y experimentales en función del tiempo de irradiación. b) Ridge numérico y experimental para elementos ABS y ACA de IRDMR en función del tiempo de irradiación.

En la Figura 6.8, se muestran mapas de color para un dominio con dos medias pastillas en la última rampa para el espécimen ABS. En la Figura 6.8a, se observa la distribución de tensión efectiva de Von Mises con valores máximos en el centro de cada pastilla, decreciendo en las direcciones axial y radial. Los desplazamientos radiales se encuentran incrementados veinticinco veces para facilitar su percepción, permitiendo ver la deformación con efecto “bambú” en la vaina sobre ambas pastillas. La Figura 6.8b incluye un

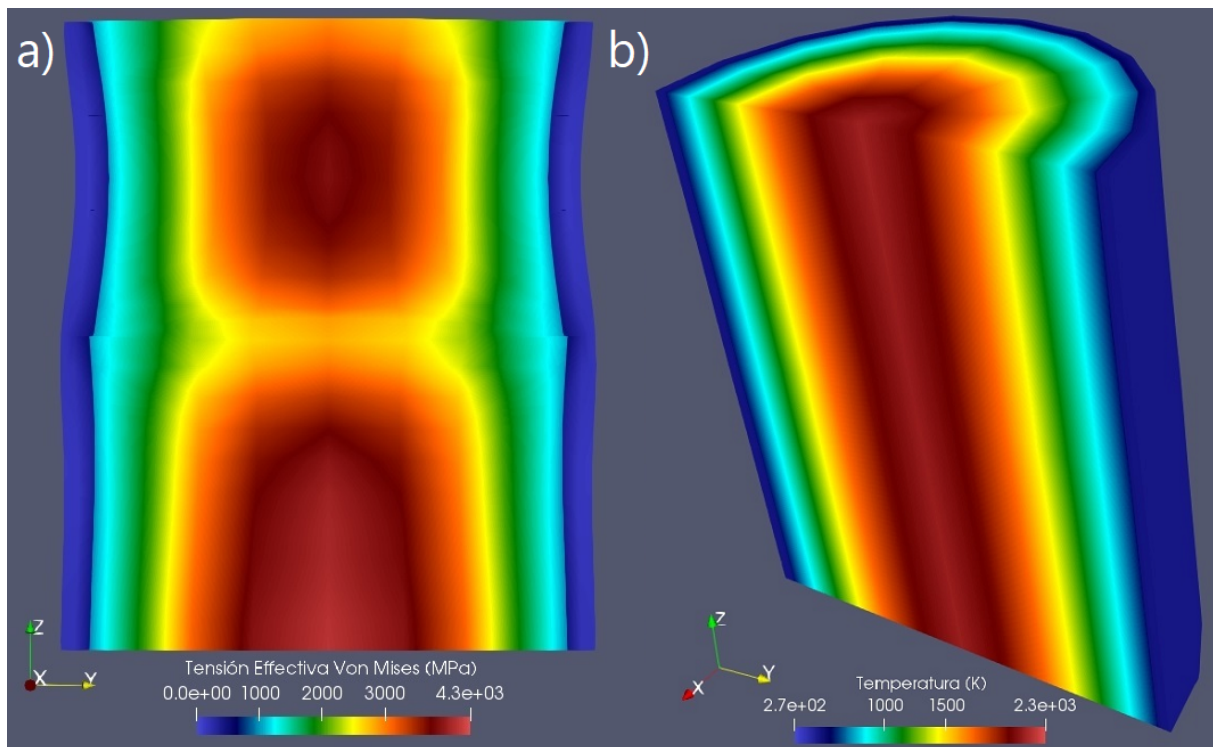


Figura 6.8: Mapas de color del dominio para el elemento ABS de IRDMR en la rampa final, exhibiendo dos medias pastillas y la vaina. a) Tensión efectiva de Von Mises (desplazamientos radiales  $\times 25$ ). b) Temperatura.

perfil de temperaturas con los mayores valores en el centro de la pila de combustible decreciendo radialmente.

#### 6.4. Experimento INR Rumania

Otro de los experimentos seleccionados para comparar el comportamiento del modelo de contacto fue el desarrollado por el programa piloto rumano de irradiación (*Romanian Irradiation Test Program*), cuyo objetivo era proveer información sobre el comportamiento de los EECC de tipo CANDU y sus límites de parámetros de diseño. Durante los ensayos, se tomaron mediciones del *ridge* a lo largo de la barra, obteniendo diferentes valores para diversos ángulos de la circunferencia, dando cuenta de asimetrías que solo pueden ser propiamente consideradas en un modelo en tres dimensiones.

Dos de los ensayos fueron realizados sobre los elementos rotulados EFE (del inglés *Experimental Fuel Element*) 89 y 51, de los cuáles seleccionamos el último para evaluar nuestros resultados [180]. El EC 51, con un enriquecimiento del 7,04 % en peso, fue irradiado en el dispositivo C2 del reactor TRIGA de 14 MW, con una potencia de  $55 \text{ kW m}^{-1}$  hasta un quemado de  $6000 \text{ MWd tU}^{-1}$ . Su objetivo específico era estudiar el efecto de la densidad del combustible en la evolución temporal de la presión ejercida por los gases de fisión.

En la Figura 6.9, se presentan comparaciones del diámetro de la vaina para dos ángulos

en la extensión completa de la barra, luego de la irradiación. Los resultados numéricos de DIONISIO tienen una buena correlación con las mediciones experimentales, evidenciando las variaciones del *ridge* para diferentes ángulos de la circunferencia.

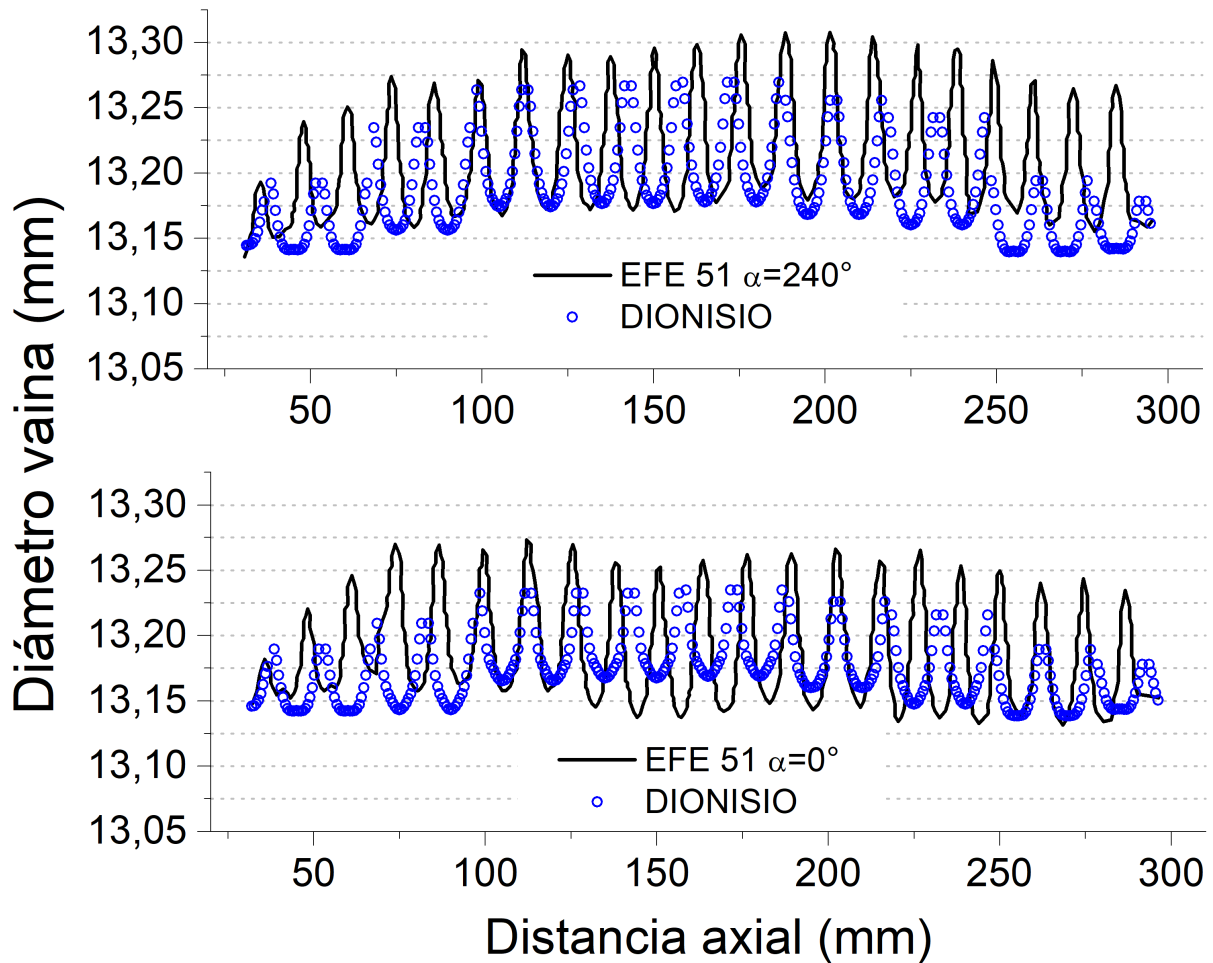


Figura 6.9: Resultados numéricos junto con mediciones post-irradiación del diámetro de la vaina completa en diferentes ángulos de EFE 51 INR.

La Figura 6.10 exhibe la evolución radial de las superficies de contacto, es decir, el radio de la pastilla y el radio interno de la vaina, junto con la componente circunferencial del tensor de tensiones de la vaina, en función del quemado. Se pueden notar los incrementos en la tensión de la vaina cuando se produce el contacto entre ambas superficies y la relajación y compresión cuando se abre el *gap*.

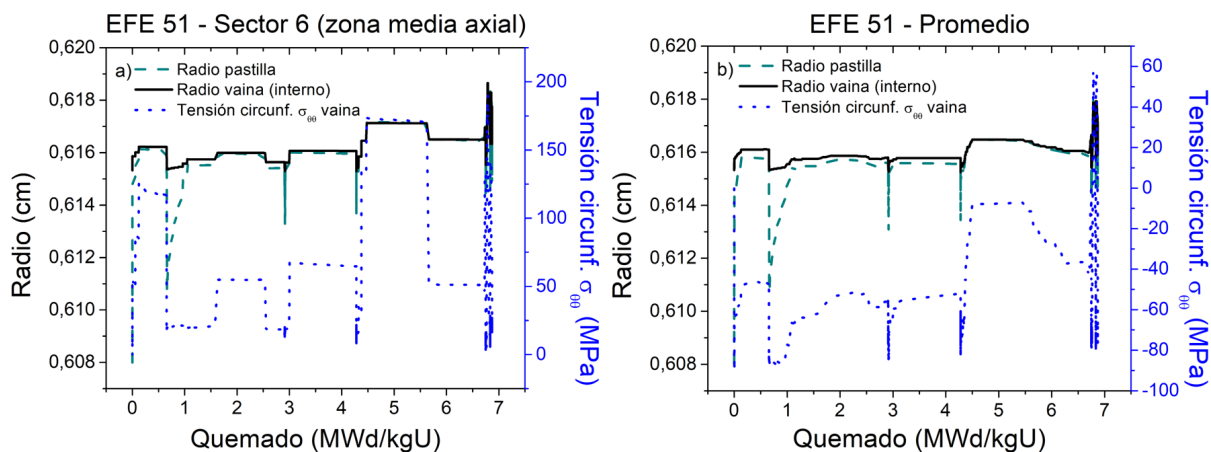


Figura 6.10: Evolución de los radios de pastilla e interno de vaina (superficies de contacto) y tensión circunferencial de la vaina para EFE 51 INR. a) Sector 6 (mitad de barra, mayor quemado). b) Promedio de la barra completa.

## 6.5. Experimento IFA 562.1-2

Después de ser sometido a numerosas pruebas, el nuevo modelo de crecimiento bajo irradiación presentado en la [Subsección 3.3.1](#) fue incluido dentro del código DIONISIO para evaluar su comportamiento en conjunto con el resto de los fenómenos considerados en el código. Con este fin se realizaron comparaciones con una gran cantidad de ensayos, entre los que se destaca la serie IFA 562.1 (del inglés *Instrumented Fuel Assembly*) [181], que involucró barras con pastillas sólidas y huecas de  $\text{UO}_2$  enriquecidas al 3,95 % con una porosidad media de 4,3 %, un diámetro nominal de 10,59 mm y un agujero central de 2 mm de diámetro para las pastillas huecas. El material de la vaina era Zircaloy-2 recocido y recristalizado y el *gap* presentaba un valor diametral aproximado de 70  $\mu\text{m}$ .

Si bien los resultados del modelo eran satisfactorios, existían algunos casos en los que el crecimiento axial de la vaina calculado resultaba menor al reportado experimentalmente. Utilizando la barra 2 del experimento IFA 562.1, se realizó un estudio con mayor grado de detalle bajo la hipótesis de que la diferencia de crecimiento en la vaina era causada por otros fenómenos involucrados.

En la [Figura 6.11a](#), se puede observar la evolución de la elongación de la vaina durante el ensayo en función del quemado, separada según el aporte de cada fenómeno involucrado. La línea azul llena representa la suma de las deformaciones por *creep* (línea turquesa de guiones cortos) y por IG (línea punteada negra), mientras que la línea verde de guiones largos traza la combinación de ambos fenómenos mencionados con la dilatación térmica (línea amarilla de guion-punto). Los valores experimentales marcados con cuadrados azules corresponden a las mediciones realizadas luego de rampas de potencia decrecientes, considerando únicamente la deformación permanente inducida por *creep* e IG, mientras que aquellos indicados mediante círculos púrpura resultan de mediciones al inicio de la rampa decreciente, incorporando el efecto de la dilatación térmica. Se puede observar que

la evolución de los cálculos de deformación permanente tiene buen acuerdo con las mediciones reportadas. Los resultados simulados de la deformación total, incluyendo *creep*, IG y dilatación térmica, coinciden con los experimentales por debajo de 6 MWd kgU<sup>-1</sup>, con una desviación a partir de ese momento. Esto coincide con el inicio del fenómeno de PCMI, como se observa en la Figura 6.11b, que aporta un crecimiento adicional a la vaina ocasionado por la fricción que produce el crecimiento de la pastilla en conjunto con la interacción mecánica. Al considerar esta contribución, el comportamiento resultante de la simulación (línea llena púrpura) replica los valores medidos, aportando una nueva validación al modelo de contacto en conjunto con el de crecimiento bajo irradiación.

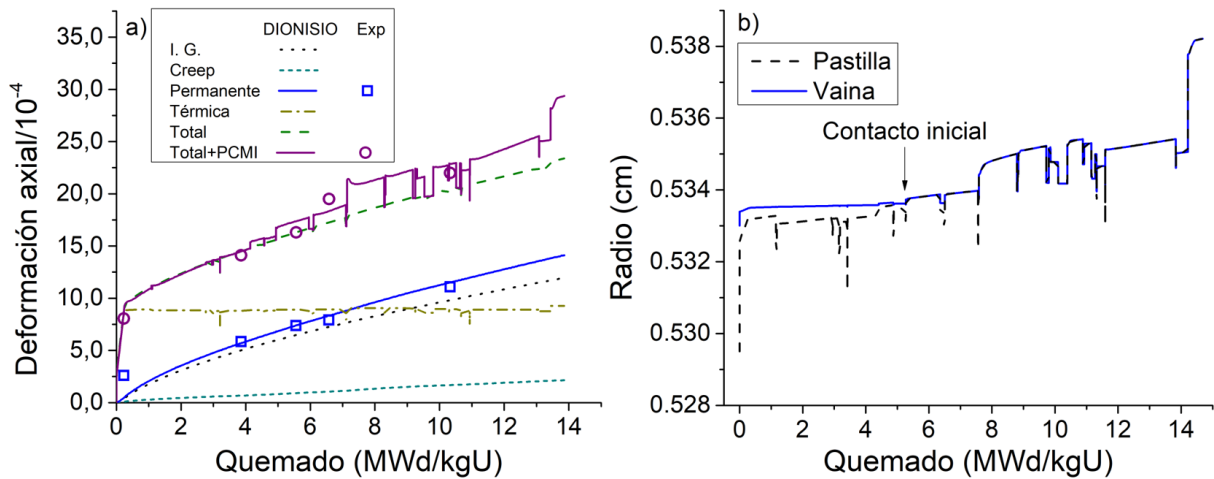


Figura 6.11: a) Resultados de elongación de la vaina diferenciados por proceso para la barra 2 del experimento IFA 562 en función del quemado, comparados con datos experimentales [181]. b) Evolución de radios de pastilla e interno de la vaina en función del quemado.

## 7. Conclusiones

El estudio de la formación y evolución de fisuras en materiales de los elementos combustibles de reactores nucleares de fisión ha sido un asunto de permanente interés en el campo de la tecnología nuclear, tanto en el ámbito académico como en la industria. Estos fenómenos, relacionados con las fallas en barras de EECC, imponen algunas de las limitaciones de mayor importancia en la operación de las centrales. Debido a ellos, deben controlarse las variaciones de potencia y sus valores máximos, el tiempo de permanencia de un EECC dentro del reactor, teniendo en cuenta la irradiación acumulada sobre los materiales o las presiones que intervienen, por mencionar algunos ejemplos. Al mismo tiempo, el análisis de las condiciones que preceden a las fallas de las vainas resulta fundamental para comprender los procesos que pueden ocasionar tanto intensas interacciones mecánicas como escenarios de accidente en los que las circunstancias se tornan críticas. Las investigaciones teóricas, analíticas y experimentales deben complementarse y respaldarse entre sí, siendo esenciales para optimizar el funcionamiento de los reactores y los materiales involucrados, manteniendo márgenes seguros de operación. Contar con un código capaz de predecir numéricamente las fracturas en los revestimientos de los combustibles nucleares es de suma importancia, ya que permite acotar el rango de experimentos necesarios, de gran dificultad y costo tanto económico como en términos de tiempo y esfuerzo.

Los modelos de fracturas en vainas de Zircaloy y otros materiales base circonio presentados en esta tesis han mostrado un comportamiento altamente eficaz. En particular, el método de zona cohesiva implementado ha demostrado ser efectivo, además de complementarse en forma sencilla con el método principal de cálculo del código, los elementos finitos. Se han obtenido excelentes resultados en ensayos de materiales tanto frágiles como dúctiles, en diversas geometrías y bajo condiciones que abarcan todos los rangos de trabajo de los materiales analizados en operación. Aprovechando las virtudes del CZM, se desarrollaron modelos para resolver en tres dimensiones el contacto pastilla-vaina, permitiendo representar el fenómeno de PCMI cuyo rol es fundamental en el proceso de falla. Al mismo tiempo, al poder modelar el contacto entre dos pastillas, se agregó la nueva posibilidad de contar con más de una de ellas en el dominio representativo, considerando que la zona de interfaz entre dos pastillas es propensa a dar lugar al inicio de las fisuras por las tensiones que se inducen. El método presenta algunas deficiencias, como un incremento en costo computacional o la potencial presencia de superposiciones no físicas. El primero ha sido reducido mediante paralelizaciones eficientes; el segundo, mediante ajustes en la ley cohesiva utilizada. Sin embargo, las ventajas obtenidas superan estos inconvenientes. Este método es capaz de describir la nucleación de una fisura sin necesidad de un iniciador previo, permite transmitir tensiones activamente entre superficies adyacentes y también

preserva las propiedades originales de la matriz del sistema.

Habiendo seleccionado un numeroso conjunto de ensayos sin irradiación que emulan las condiciones de un accidente por pérdida de refrigerante, el código ha producido resultados con muy buen acuerdo respecto de lo reportado experimentalmente. Considerando criterios de falla tanto por tensión como por deformación, los tiempos calculados de *burst* de las vainas, así como la presión o la temperatura al momento de la explosión según el caso, se encuentran dentro de un rango de variación menor al 10 % respecto de su contraparte medida. Al graficar los valores de tiempo de *burst* en función de la temperatura de cada espécimen, se obtienen las curvas esperadas semejantes a una función exponencial inversa. Adicionalmente, el programa permite reproducir la formación y evolución de la fisura en la probeta, con una clara correlación en el tamaño de apertura de la falla entre el resultado numérico y las imágenes tomadas después del ensayo.

Al contrastar los resultados con ensayos de rampas de potencia sobre barras completas de combustible, el módulo de fractura integrado en el cuerpo principal de DIONISIO ha demostrado ser confiable funcionando en conjunto con el resto de los modelos que constituyen el código. Las simulaciones concluyeron en resultados correctos respecto de la presencia o ausencia de fallas en la vaina para un porcentaje mayor al 90 % de las 82 barras consideradas. A pesar de contar con una elevada dispersión respecto de los tiempos de falla, cabe destacar que los tiempos reportados corresponden a la detección de productos de fisión, lo que no representa una medición precisa del instante de falla de la barra. Adicionalmente, el modelo fue desarrollado de forma conservadora, lo que ocasiona que, en varios casos, la falla se produzca durante la abrupta rampa final, antes de alcanzar el valor máximo de potencia.

Por su parte, el nuevo algoritmo de contacto entre superficies basado en el CZM muestra un rendimiento propicio para modelar la interacción mecánica entre cuerpos, con especial foco en el fenómeno de PCMI, que juega un rol fundamental en los procesos de las fisuras en las vainas. Al simular experimentos en los cuales se produce PCMI, el código provee resultados de tensión y deformación radial en la barra comparables con aquellos informados por las mediciones junto al efecto “bambú” previsto que se observa en las visualizaciones. A su vez, al incorporar este modelo en el estudio de otros fenómenos como el crecimiento por irradiación, permite dar cuenta de situaciones como el crecimiento adicional de la vaina inducido por la fricción con la pastilla.

Restan mencionar algunas aplicaciones a futuro de este modelo. Actualmente la Sección Códigos y Modelos participa en el Proyecto de Investigación Coordinado T12032 (CRP, *Coordinated Research Project*) llamado *Testing and Simulation for Advanced Technology and Accident Tolerant Fuels (ATF-TS)* (Ensayos y Simulación para Combustibles Tecnológicamente Avanzados y Tolerantes a Accidentes) mediante el Acuerdo de Investigación 24042/R0 (*Research Agreement*), destinado a incluir en el código modelos para simular el comportamiento de nuevos materiales tecnológicamente avanzados. Dentro de ese pro-

yecto, se realizarán numerosos ensayos de comportamiento de vainas frente a condiciones extremas, por lo que el modelo implementado en DIONISIO tendrá que adaptarse a las leyes características de nuevos materiales ATF. Finalmente, se está llevando a cabo un nuevo desarrollo dentro de la Sección que propone extender el rango de predicción del código DIONISIO al comportamiento de combustibles gastados, en condición de almacenamiento. En dichas condiciones, el hidrógeno acumulado puede nuclear en hidruros y ante sollicitación mecánica, pueden evolucionar fisuras que ocasionen fallas en las vainas. Este nuevo módulo, denominado DIONISIO-STR (del inglés *storage*, almacenamiento), también utilizará elementos cohesivos para analizar las condiciones pertinentes a las fisuras, con la adaptación previa de las leyes a las condiciones de almacenamiento mencionadas.

Los modelos presentados en esta tesis amplían el rango de predicción del código, así como la cantidad y las características de los experimentos que es capaz de simular. Aquellos orientados puntualmente a las fracturas, agregan un aspecto más en el que el programa puede competir contra otros códigos de nivel internacional. Asimismo, presentan oportunidades para continuar con su mejora y con la incorporación de procesos como la fragilización por hidrógeno y la corrosión. Particularmente, el modelo de contacto entre pastilla y vaina permitió evolucionar el código a su versión actual 3.0 proveyendo la posibilidad de simular geometrías tridimensionales, de importancia fundamental para reproducir fenómenos asimétricos con precisión. Estos desarrollos aportan un considerable valor agregado a una herramienta asentada, de renombre y con reconocimiento internacional como lo es el código de combustible nuclear DIONISIO.

# Bibliografía

- [1] H. Bailly, D. Menessier, C. Prunier, The nuclear fuel of pressurized water reactors and fast reactors design and behaviour, Commissariat a l'Energie Atomique, 1999.
- [2] S. Goel, N. Kumar, D. Fuloria, R. Jayaganthan, I. V. Singh, D. Srivastava, G. K. Dey, N. Saibaba, Evaluating fracture toughness of rolled zircaloy-2 at different temperatures using xfem, *Journal of Materials Engineering and Performance* 25 (2016). doi:[10.1007/s11665-016-2241-y](https://doi.org/10.1007/s11665-016-2241-y).
- [3] M. A. Martin-Rengel, F. J. G. Sánchez, J. Ruiz-Hervías, L. Caballero, Determination of the hoop fracture properties of unirradiated hydrogen-charged nuclear fuel cladding from ring compression tests, *Journal of Nuclear Materials* 436 (2013). doi:[10.1016/j.jnucmat.2013.01.311](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.01.311).
- [4] Y. K. Bibilashvili, A. V. Medvedev, B. I. Nesterov, V. V. Novikov, V. N. Golovanov, S. G. Eremin, A. D. Yurtchenko, Influence of irradiation on kisce of zr-1 %nb cladings, *Journal of Nuclear Materials* 280 (2000). doi:[10.1016/S0022-3115\(00\)00012-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(00)00012-X).
- [5] B. J. Lewis, A generalized model for fission-product transport in the fuel-to-sheath gap of defective fuel elements, *Journal of Nuclear Materials* 175 (1990). doi:[10.1016/0022-3115\(90\)90210-E](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90210-E).
- [6] B. J. Lewis, H. W. Bonin, Transport of volatile fission products in the fuel-to-sheath gap of defective fuel elements during normal and reactor accident conditions, *Journal of Nuclear Materials* 218 (1995). doi:[10.1016/0022-3115\(94\)00372-6](https://doi.org/10.1016/0022-3115(94)00372-6).
- [7] W. Hüttig, H. Zänker, M. Forberg, In-core surveillance of defective pwr fuel elements in the case of fuel-to-water contact, *Journal of Nuclear Materials* 175 (1990). doi:[10.1016/0022-3115\(90\)90199-W](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90199-W).
- [8] Y. S. Kim, A. Grybenas, Effect of load ratio and hydrogen concentration on the crack growth rate in zr-2.5nb tubes, *Materials Science and Engineering A* 520 (2009). doi:[10.1016/j.msea.2009.05.054](https://doi.org/10.1016/j.msea.2009.05.054).
- [9] H. H. Hsu, L. W. Tsay, Effect of hydride orientation on fracture toughness of zircaloy-4 cladding, *Journal of Nuclear Materials* 408 (2011). doi:[10.1016/j.jnucmat.2010.10.068](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.10.068).
- [10] L. Caillot, C. Lemaignan, B. Linet, Pellet clad interaction in pwr fuel: analytical irradiation experiment and finite element modelling, Tech. rep., CEA Centre d'Etudes de Grenoble (1993).

- [11] A. Soba, A. Denis, Simulation with dionisio 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods, *Journal of Nuclear Materials* 374 (2008). doi:[10.1016/j.jnucmat.2007.06.020](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.06.020).
- [12] L. O. Jernkvist, A model for predicting pellet-cladding interaction-induced fuel rod failure, *Nuclear Engineering and Design* 156 (1995). doi:[10.1016/0029-5493\(94\)00961-W](https://doi.org/10.1016/0029-5493(94)00961-W).
- [13] A. Soba, A. Denis, Model of fracture for the zry cladding of nuclear fuel rods included in the code dionisio 1.0, *Nuclear Engineering and Design* 238 (2008). doi:[10.1016/j.nucengdes.2008.06.026](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2008.06.026).
- [14] W. S. Ryu, Y. H. Kang, L. Jai-Young, Effects of iodine concentration on iodine-induced stress corrosion cracking of zircaloy-4 tube, *Journal of Nuclear Materials* (1988). doi:[10.1016/0022-3115\(88\)90327-3](https://doi.org/10.1016/0022-3115(88)90327-3).
- [15] I. Schuster, C. Lemaignan, Influence of texture on iodine-induced stress corrosion cracking of zircaloy-4 cladding tubes, *Journal of Nuclear Materials* 189 (1992). doi:[10.1016/0022-3115\(92\)90528-S](https://doi.org/10.1016/0022-3115(92)90528-S).
- [16] J. E. Talia, F. Povolo, Tensile properties of zircaloy-4, *Journal of Nuclear Materials* 67 (1977). doi:[10.1016/0022-3115\(77\)90174-X](https://doi.org/10.1016/0022-3115(77)90174-X).
- [17] P. S. Sidky, Iodine stress corrosion cracking of zircaloy reactor cladding: Iodine chemistry (a review), *Journal of Nuclear Materials* (1998). doi:[10.1016/S0022-3115\(98\)00044-0](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(98)00044-0).
- [18] B. J. Lewis, W. T. Thompson, M. R. Kleczek, K. Shaheen, M. Juhas, F. C. Iglesias, Modelling of iodine-induced stress corrosion cracking in candu fuel, *Journal of Nuclear Materials* 408 (2011). doi:[10.1016/j.jnucmat.2010.10.063](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.10.063).
- [19] P. C. Lu, The fem based calculation of crack-tip strain rate for determining the crack growth rate of 304 stainless steel in bwr environments, *Nuclear Engineering and Design* 205 (2001). doi:[10.1016/S0029-5493\(00\)00400-3](https://doi.org/10.1016/S0029-5493(00)00400-3).
- [20] S. Y. Park, J. H. Kim, M. H. Lee, Y. H. Jeong, Stress-corrosion crack initiation and propagation behavior of zircaloy-4 cladding under an iodine environment, *Journal of Nuclear Materials* 372 (2008). doi:[10.1016/j.jnucmat.2007.03.258](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2007.03.258).
- [21] F. Brust, P. Scott, S. Rahman, Assessment of short through-wall circumferential cracks in pipes. experiments and analysis: March 1990–december 1994, Tech. rep., Nuclear Regulatory Commission (1995).
- [22] A. Soba, M. Lemes, M. E. González, A. Denis, L. Romero, [Simulation of the behaviour of nuclear fuel under high burnup conditions](https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.03.004), *Annals of Nuclear Energy* 70 (2014) 147–156. doi:[10.1016/j.anucene.2014.03.004](https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.03.004).  
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2014.03.004>

- [23] A. Soba, A. Denis, L. Romero, E. Villarino, F. Sardella, [A high burnup model developed for the dionisio code](#), *Journal of Nuclear Materials* 433 (2013) 160–166. doi:[10.1016/j.jnucmat.2012.08.016](#).  
URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.08.016>
- [24] H. Hayashi, K. Ogata, T. Baba, K. Kamimura, Research program to elucidate outside-in failure of high burnup fuel cladding, *Journal of Nuclear Science and Technology* 43 (2006). doi:[10.1080/18811248.2006.9711204](#).
- [25] W. Goll, H. Spilker, E. H. Toscano, Short-time creep and rupture tests on high burnup fuel rod cladding, *Journal of Nuclear Materials* 289 (2001). doi:[10.1016/S0022-3115\(01\)00438-X](#).
- [26] OECD/NEA, Nuclear fuel behaviour in loss-of-coolant accident (loca) conditions. state-of-the-art report, NEA No. 6846, ISBN 978-92-64-99091-3, Organisation for Economic Co-operation and Development/Nuclear Energy Agency (2009).
- [27] OECD/NEA, Nuclear fuel behaviour under reactivity-initiated accident (ria) conditions. state-of-the-art report, NEA No. 6847, ISBN 978-92-64-99113-2, Organisation for Economic Co-operation and Development/Nuclear Energy Agency (2010).
- [28] T. Alam, M. K. Khan, M. Pathak, K. Ravi, R. Singh, S. K. Gupta, A review on the clad failure studies, *Nuclear Engineering and Design* 241 (2011). doi:[10.1016/j.nucengdes.2011.08.009](#).
- [29] J. H. Kim, M. H. Lee, Y. H. Jeong, J. G. Lim, Behavior of zirconium fuel cladding under fast pressurization rates, *Nuclear Engineering and Design* 238 (2008). doi:[10.1016/j.nucengdes.2007.10.020](#).
- [30] T. Sugiyama, M. Umeda, T. Fuketa, H. Sasajima, Y. Udagawa, F. Nagase, Failure of high burnup fuels under reactivity-initiated accident conditions, *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009). doi:[10.1016/j.anucene.2008.12.003](#).
- [31] T. Fuketa, T. Sugiyama, F. Nagase, Behavior of 60 to 78mwd/kgu pwr fuels under reactivity-initiated accident conditions, *Journal of Nuclear Science and Technology* 43 (2006). doi:[10.1080/18811248.2006.9711198](#).
- [32] V. Georgenthum, J. Desquines, V. Besson, Influence of outer zirconia transient cracking and spalling on thermomechanical behaviour of high burnup fuel rod submitted to ria, *Journal of Nuclear Science and Technology* 43 (2006). doi:[10.1080/18811248.2006.9711199](#).
- [33] P. Mishra, D. N. Sah, S. Kumar, S. Anantharaman, Microstructural examination of high temperature creep failure of zircaloy-2 cladding in irradiated phwr fuel pins, *Journal of Nuclear Materials* 429 (2012). doi:[10.1016/j.jnucmat.2012.06.002](#).

- [34] J. Stuckert, M. Große, C. Rössger, M. Klimenkov, M. Steinbrück, M. Walter, Quench-loca program at kit on secondary hydriding and results of the commissioning bundle test quench-10, *Nuclear Engineering and Design* 255 (2013). doi: [10.1016/j.nucengdes.2012.10.024](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2012.10.024).
- [35] M. Markiewicz, F. Erbacher, Experiments on ballooning in pressurized and transiently heated zircaloy-4 tubes, Tech. rep., Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH (Germany) (1988).
- [36] A. R. Massih, L. O. Jernkvist, Assessment of data and criteria for cladding burst in loss-of-coolant accidents, Quantum Technologies AB, 2015.
- [37] M. Lemes, A. Soba, H. Daverio, A. Denis, Inclusion of models to describe severe accident conditions in the fuel simulation code dionisio, *Nuclear Engineering and Design* 315 (2017) 1–10. doi: [10.1016/j.nucengdes.2017.02.015](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2017.02.015).
- [38] K. Lassmann, Transuranus: a fuel rod analysis code ready for use, *Journal of Nuclear Materials* 188 (1992). doi: [10.1016/0022-3115\(92\)90487-6](https://doi.org/10.1016/0022-3115(92)90487-6).
- [39] K. Geelhood, W. Luscher, C. Beyer, J. Cuta, Fraptran 1.4: a computer code for the transient analysis of oxide fuel rods, US Nuclear Regulatory Commission, Office of Nuclear Regulatory Research, NUREG/CR-7023 1 (2011).
- [40] A. Soba, Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en operación, Ph.D. thesis, Universidad de Buenos Aires (2007).
- [41] Nea/nsc : Ifpe international fuel performance experiments database, <https://www.oecd-nea.org/science/wprs/fuel/ifpelst.html> (2017).
- [42] E. Perez-Feró, C. Gyori, L. Matus, L. Vasáros, Z. Hózer, P. Windberg, L. Maróti, M. Horváth, I. Nagy, A. Pintér-Csordás, T. Novotny, Experimental database of e110 claddings exposed to accident conditions, *Journal of Nuclear Materials* 397 (2010) 48–54. doi: [10.1016/j.jnucmat.2009.12.005](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.12.005).
- [43] J. Stuckert, M. Große, C. Rössger, M. Steinbrück, M. Walter, Results of the loca reference bundle test quench-10 with zircaloy-4 claddings, Karlsruhe Institut für Technologie, Karlsruhe, Germany (2011).
- [44] N. Helin, J. Flygare, Nrc loca tests at studsvik—design and construction of test train device and tests with unirradiated cladding material, Tech. rep., report STUDSVIK/N-11/130, Studsvik Nuclear AB (2012).
- [45] B. K. J., Finite Element Procedures [M], second edi Edition, Prentice Hall, 2005.
- [46] E. W. V. Chaves, Mecánica del medio continuo: conceptos básicos, Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería (CIMNE), 2012.

- [47] E. Goldberg, M. E. L. Peralta, A. Soba, [Dionisio 3.0: Comprehensive 3d nuclear fuel simulation through pcmi cohesive and plenum models](#), *Journal of Nuclear Materials* 523 (2019) 121–134. doi:[10.1016/j.jnucmat.2019.06.005](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.06.005).  
URL <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.06.005>
- [48] A. Soba, A. Denis, [Dionisio 2.0: New version of the code for simulating a whole nuclear fuel rod under extended irradiation](#), *Nuclear Engineering and Design* 292 (2015). doi:[10.1016/j.nucengdes.2015.06.008](https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2015.06.008).
- [49] M. Lemes, A. Soba, A. Denis, [An empirical formulation to describe the evolution of the high burnup structure](#), *Journal of Nuclear Materials* 456 (2015) 174–181. doi:[10.1016/j.jnucmat.2014.09.048](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.09.048).
- [50] A. Denis, R. Piotrkowski, [Simulation of isothermal fission gas release](#), *Journal of Nuclear Materials* 229 (1996) 149–154. doi:[https://doi.org/10.1016/0022-3115\(95\)00203-0](https://doi.org/10.1016/0022-3115(95)00203-0).  
URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022311595002030>
- [51] L. A. Yegorova, U. N. R. C. O. of Nuclear Regulatory Research., U. N. R. Commission., I. de protection et de sureté nucléaire (France), R. F. M. nauki i tekhnicheskoi politiki., [Data base on the behavior of high burnup fuel rods with zr-1% nb cladding and uo2 fuel \(vver type\) under reactivity accident conditions](#), us nrc report nureg/ia-0156, Tech. rep., U.S. Nuclear Regulatory Commission. Office of Nuclear Regulatory Research. and U.S. Nuclear Regulatory Commission. and Institut de protection et de sureté nucléaire (France) and Russia (Federation). Ministerstvo nauki i tekhnicheskoi politiki (1999).
- [52] D. L. Hagrman, G. A. Reymann, [Matpro — version 11 a handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior](#) ganuhrmmioir tbu oocuaibmt 18 omumnb, Tech. rep., NUREG/CR-0497, TREE-1280 (1979).
- [53] D. Olander, [Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements](#), U.S. Dept. of Commerce, No. TID-26711-P1, 1976. doi:[10.2172/7343826](https://doi.org/10.2172/7343826).
- [54] M. Kinoshita, M. Ichikawa, [Fuel rod deformation code femaxi-ii and its application](#), *Nuclear Engineering and Design* 56 (1980) 49–56. doi:[10.1016/0029-5493\(80\)90167-3](https://doi.org/10.1016/0029-5493(80)90167-3).
- [55] G. A. Berna, M. P. Bohn, W. N. Rausch, R. E. Williford, D. D. Lanning, [Frapcon-2: A computer code for the calculation of steady state thermal-mechanical behavior of oxide fuel rods](#), Tech. rep., Pacific Northwest National Lab. (PNNL), Richland, WA (United States) (1 1981). doi:[10.2172/1080054](https://doi.org/10.2172/1080054).  
URL <https://www.osti.gov/biblio/1080054>

- [56] T. Manngård, L. O. Jernkvist, A. R. Massih, Evaluation of loss-of-coolant accident simulation tests with the fuel rod analysis code fraptran-1.4, quantum tech. report tr11-008v1, Tech. rep., Quantum Tech. (2011).
- [57] D. Kaddour, S. Frechin, A. F. Gourgues, J. C. Brachet, L. Portier, A. Pineau, Experimental determination of creep properties of zirconium alloys together with phase transformation, *Scripta Materialia* 51 (2004) 515–519. doi:10.1016/j.scriptamat.2004.05.046.
- [58] J. R. Rice, A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks, *Journal of Applied Mechanics* (1968).
- [59] M. E. L. Peralta, Modelado del comportamiento termo-mecánico de las vainas de combustibles nucleares bajo irradiación: evolución de fisuras, Master’s thesis, Instituto de Tecnología Sabato (UNSAM) (2016).
- [60] T. L. Anderson, *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, Fourth Edition, CRC Press, 2017.
- [61] L. A. D. Vedia, *Mecánica de fractura*, CNEA-AC, 1986.
- [62] D. R. J. Owen, A. J. Fawkes, *Engineering fracture mechanics: numerical methods and applications*, Pineridge Press Ltd, 91 West Cross Lane, West Cross, Swansea, UK, 1983. 305 (1983).
- [63] V. Tvergaard, J. W. Hutchinson, The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 40 (1992). doi:10.1016/0022-5096(92)90020-3.
- [64] K. M. Prabhakaran, V. V. Raj, Closed form expression for plastic j-integral for an elbow with a through-wall crown crack under opening bending moment, *International Journal of Pressure Vessels and Piping* 80 (2003). doi:10.1016/S0308-0161(02)00137-0.
- [65] D. Khan, K. Biswas, Path independent integral  $j_f^*$  for circular arc crack: FEM investigation under mechanical and thermal loads, *Finite Elements in Analysis and Design* 45 (2009). doi:10.1016/j.finel.2008.11.005.
- [66] O. Huber, J. Nickel, G. Kuhn, On the decomposition of the j-integral for 3d crack problems, *International Journal of Fracture* 64 (1993). doi:10.1007/BF00017849.
- [67] R. H. Dodds, Finite element evaluation of j parameters in 3d, *International Journal of Fracture* 33 (1987). doi:10.1007/BF00034901.
- [68] G. P. Nikishkov, S. N. Atluri, Calculation of fracture mechanics parameters for an arbitrary three-dimensional crack, by the ‘equivalent domain integral’ method,

- International Journal for Numerical Methods in Engineering 24 (1987). doi:10.1002/nme.1620240914.
- [69] J. Foxen, S. Rahman, Elastic-plastic analysis of small cracks in tubes under internal pressure and bending, Nuclear Engineering and Design (2000). doi:10.1016/S0029-5493(99)00258-7.
- [70] N. Omer, Z. Yosibash, On the path independency of the point-wise j integral in three-dimensions, International Journal of Fracture 136 (2005). doi:10.1007/s10704-005-3934-7.
- [71] L. Chen, G. R. Liu, Y. Jiang, K. Zeng, J. Zhang, A singular edge-based smoothed finite element method (es-fem) for crack analyses in anisotropic media, Engineering Fracture Mechanics 78 (2011). doi:10.1016/j.engfracmech.2010.09.018.
- [72] B. Aour, O. Rahmani, M. Nait-Abdelaziz, A coupled fem/bem approach and its accuracy for solving crack problems in fracture mechanics, International Journal of Solids and Structures 44 (2007). doi:10.1016/j.ijsolstr.2006.08.001.
- [73] A. L. Gurson, Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part i—yield criteria and flow rules for porous ductile media, Journal of Engineering Materials and Technology 99 (1977) 2–15. doi:10.1115/1.3443401.  
URL <https://doi.org/10.1115/1.3443401>
- [74] V. Tvergaard, A. Needleman, Effects of nonlocal damage in porous plastic solids, International Journal of Solids and Structures 32 (1995). doi:10.1016/0020-7683(94)00185-Y.
- [75] R. M. F. L. Roux, Estudio de la propagación de fisuras en materiales dúctiles, Ph.D. thesis, Universidad Politécnica de Madrid (9 2002).  
URL <http://oa.upm.es/660/>
- [76] L. Noels, R. Radovitzky, An explicit discontinuous galerkin method for non-linear solid dynamics: Formulation, parallel implementation and scalability properties, International Journal for Numerical Methods in Engineering 74 (2008). doi:10.1002/nme.2213.
- [77] G. I. Barenblatt, The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture, Advances in Applied Mechanics, Vol. 7 7 (1962) 55–129. doi:10.1016/S0065-2156(08)70121-2.
- [78] A. Hillerborg, M. Modéer, P. E. Petersson, Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements, Cement and Concrete Research 6 (1976). doi:10.1016/0008-8846(76)90007-7.

- [79] A. Needleman, Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 67 (1988). doi: [10.1016/0045-7825\(88\)90069-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(88)90069-2).
- [80] L. Noels, R. Radovitzky, A general discontinuous galerkin method for finite hyperelasticity. formulation and numerical applications, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 68 (2006). doi: [10.1002/nme.1699](https://doi.org/10.1002/nme.1699).
- [81] T. Belytschko, J. Fish, B. E. Engelmann, A finite element with embedded localization zones, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 70 (1988). doi: [10.1016/0045-7825\(88\)90180-6](https://doi.org/10.1016/0045-7825(88)90180-6).
- [82] J. M. Melenk, I. Babuška, The partition of unity finite element method: Basic theory and applications, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139 (1996). doi: [10.1016/S0045-7825\(96\)01087-0](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(96)01087-0).
- [83] T. Belytschko, T. Black, Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 45 (1999). doi: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(19990620\)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(19990620)45:5<601::AID-NME598>3.0.CO;2-S).
- [84] J. Oliver, M. Cervera, O. Manzoli, Strong discontinuities and continuum plasticity models: The strong discontinuity approach, *International journal of plasticity* 15 (1999). doi: [10.1016/S0749-6419\(98\)00073-4](https://doi.org/10.1016/S0749-6419(98)00073-4).
- [85] M. Jirásek, Comparative study on finite elements with embedded discontinuities, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 188 (2000). doi: [10.1016/S0045-7825\(99\)00154-1](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00154-1).
- [86] L. N. Gifford, P. D. Hilton, Stress intensity factors by enriched finite elements, *Engineering Fracture Mechanics* 10 (1978). doi: [10.1016/0013-7944\(78\)90059-0](https://doi.org/10.1016/0013-7944(78)90059-0).
- [87] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, P. Krysl, Meshless methods: An overview and recent developments, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 139 (1996). doi: [10.1016/S0045-7825\(96\)01078-X](https://doi.org/10.1016/S0045-7825(96)01078-X).
- [88] V. P. Nguyen, T. Rabczuk, S. Bordas, M. Duflot, Meshless methods: A review and computer implementation aspects, *Mathematics and Computers in Simulation* 79 (2008). doi: [10.1016/j.matcom.2008.01.003](https://doi.org/10.1016/j.matcom.2008.01.003).
- [89] T. Strouboulis, K. Copps, I. Babuška, The generalized finite element method: An example of its implementation and illustration of its performance, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 47 (2000). doi: [10.1002/\(SICI\)1097-0207\(20000320\)47:8<1401::AID-NME835>3.0.CO;2-8](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0207(20000320)47:8<1401::AID-NME835>3.0.CO;2-8).
- [90] A. E. Huespe, A. Needleman, J. Oliver, P. J. Sánchez, A finite thickness band method for ductile fracture analysis, *International Journal of Plasticity* 25 (2009). doi: [10.1016/j.ijplas.2009.03.005](https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2009.03.005).

- [91] P. J. Sánchez, A. E. Huespe, J. Oliver, On some topics for the numerical simulation of ductile fracture, *International Journal of Plasticity* 24 (2008). doi:10.1016/j.ijplas.2007.08.004.
- [92] E. M. L. Salinas, Modelos de fisura cohesiva difusa y fisura cohesiva discreta para materiales cuasifrágiles, Master's thesis, Universidad Politécnica de Madrid (2010).
- [93] J. Planas, M. Elices, G. V. Guinea, F. J. Gómez, D. A. Cendón, I. Arbilla, Generalizations and specializations of cohesive crack models, *Engineering Fracture Mechanics* 70 (2003). doi:10.1016/S0013-7944(03)00123-1.
- [94] R. Radovitzky, A. Seagraves, M. Tupek, L. Noels, A scalable 3d fracture and fragmentation algorithm based on a hybrid, discontinuous galerkin, cohesive element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (2011) 326–344. doi:10.1016/j.cma.2010.08.014.
- [95] T. Seif, Ductile fracture analysis in a steel plate by cohesive zone modeling, Master's thesis, Memorial University of Newfoundland (2014).
- [96] F. Cirak, M. Ortiz, A. Pandolfi, A cohesive approach to thin-shell fracture and fragmentation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194 (2005). doi:10.1016/j.cma.2004.07.048.
- [97] S. Natarajan, Enriched finite element methods: advances & applications, Ph.D. thesis, Cardiff University (2011).
- [98] J. L. Asferg, Modeling of concrete fracture applying the extended finite element method, Ph.D. thesis, Ph. D. thesis, Technical University of Denmark (2006).
- [99] V. P. Nguyen, An open source program to generate zero-thickness cohesive interface elements, *Advances in Engineering Software* 74 (2014). doi:10.1016/j.advengsoft.2014.04.002.
- [100] J. H. Song, T. Menouillard, A. Tabarraei, Explicit dynamic finite element method for failure with smooth fracture energy dissipations, *Mathematical Problems in Engineering* 2013 (2013). doi:10.1155/2013/293861.
- [101] J. J. Remmers, R. D. Borst, A. Needleman, A cohesive segments method for the simulation of crack growth, *Computational Mechanics* 31 (2003). doi:10.1007/s00466-002-0394-z.
- [102] B. J. Lewis, F. C. Iglesias, R. S. Dickson, A. Williams, Overview of high-temperature fuel behaviour with relevance to candu fuel, *Journal of Nuclear Materials* 394 (2009). doi:10.1016/j.jnucmat.2009.08.011.
- [103] S. Stimpson, J. Powers, K. Clarno, R. Pawlowski, R. Gardner, S. Novascone, K. Gamble, R. Williamson, Pellet-clad mechanical interaction screening using vera

- applied to watts bar unit 1, cycles 1–3, Nuclear Engineering and Design 327 (2018). doi:10.1016/j.nucengdes.2017.12.015.
- [104] L. E. Herranz, I. Vallejo, G. Khvostov, J. Sercombe, G. Zhou, Assessment of fuel rod performance codes under ramp scenarios investigated within the scip project, Nuclear Engineering and Design 241 (2011). doi:10.1016/j.nucengdes.2011.01.007.
- [105] M. Suzuki, H. Uetsuka, H. Saitou, Analysis of mechanical load on cladding induced by fuel swelling during power ramp in high burn-up rod by fuel performance code femaxi-6, Nuclear Engineering and Design 229 (2004). doi:10.1016/j.nucengdes.2003.11.017.
- [106] Iaea: International atomic energy agency, <https://www.iaea.org/> (2021).
- [107] S. Abbas, A. Alizada, T.-P. Fries, Model-independent approaches for the xfm in fracture mechanics, Int J Numer Methods Eng 1 (2010) 0–10.
- [108] D. Z. Feng, K. D. Zhang, G. F. Xu, Finite element numerical evaluation of j-integral for cracked ductile cylinders, Engineering Fracture Mechanics 46 (1993). doi:10.1016/0013-7944(93)90240-S.
- [109] T. D. D. Araújo, T. N. Bittencourt, D. Roehl, L. F. Martha, Numerical estimation of fracture parameters in elastic and elastic-plastic analysis, in: European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering, ECCOMAS 2000, 2000, pp. 1–18.
- [110] R. H. Dodds, D. T. Read, Experimental and numerical studies of the j-integral for a surface flaw, International Journal of Fracture 43 (1990). doi:10.1007/BF00018126.
- [111] M. Ek, *Loca testing at halden; the second experiment ifa-650.2*, Tech. rep., Institutt for energiteknikk (2005).  
URL [http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig\\_q=RN:43106900](http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:43106900)
- [112] V. Lestinen, *Loca testing at halden, first experiment ifa-650.1*, Tech. rep., Institutt for energiteknikk (2004).  
URL [http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig\\_q=RN:43106863](http://inis.iaea.org/Search/search.aspx?orig_q=RN:43106863)
- [113] S. Djurle, *The studsvik demo-ramp ii project*, Tech. rep., Studsvik (1982).
- [114] S. Djurle, *The studsvik demo-ramp i project*, Tech. rep., Studsvik (1983).
- [115] S. Djurle, *Studsvik over-ramp project.*, Electric Power Research Institute (Report) EPRI NP (1983).
- [116] S. Djurle, *The studsvik super-ramp project*, Tech. rep., Studsvik (1984).

- [117] H. Mogard, U. Bergenlid, S. Djurle, G. Lysell, G. Roennberg, *International trans-ramp i fuel project*, Tech. rep., International Atomic Energy Agency (1986).  
URL [https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:18083045](https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:18083045)
- [118] G. R. Thomas, The studsvik inter ramp project: An international power ramp experimental program, *Journal of Nuclear Materials* 87 (1979). doi:10.1016/0022-3115(79)90557-9.
- [119] D. S. Dugdale, Yielding of steel sheets containing slits, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 8 (1960) 100–104. doi:10.1016/0022-5096(60)90013-2.
- [120] K. Garikipati, A. Waas, B. Bednarczyk, S. Rudraraju, On the theory and numerical simulation of cohesive crack propagation with application to fiber-reinforced composites, Tech. rep., NASA (8 2013). doi:10.13140/2.1.4719.4886.
- [121] R. de Borst, J. J. Remmers, A. Needleman, Computational aspects of cohesive – zone models, *Advanced Fracture Mechanics for Life and Safety Assessments* (2004).
- [122] A. A. Griffith, G. I. Taylor, *Vi. the phenomena of rupture and flow in solids*, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character* 221 (1921) 163–198, doi: 10.1098/rsta.1921.0006. doi:10.1098/rsta.1921.0006.  
URL <https://doi.org/10.1098/rsta.1921.0006>
- [123] P.-E. Petersson, *Crack growth and development of fracture zones in plain concrete and similar materials*, Tech. rep., International Atomic Energy Agency (1981).  
URL [https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:13668228](https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:13668228)
- [124] F. H. Wittmann, K. Rokugo, E. Brühwiler, H. Mihashi, P. Simonin, Fracture energy and strain softening of concrete as determined by means of compact tension specimens, *Materials and Structures* 21 (1988). doi:10.1007/BF02472525.
- [125] G. T. Camacho, M. Ortiz, Computational modelling of impact damage in brittle materials, *International Journal of Solids and Structures* 33 (1996). doi:10.1016/0020-7683(95)00255-3.
- [126] P. H. Geubelle, J. S. Baylor, Impact-induced delamination of composites: A 2d simulation, *Composites Part B: Engineering* 29 (1998). doi:10.1016/S1359-8368(98)00013-4.
- [127] H. D. Espinosa, P. D. Zavattieri, A grain level model for the study of failure initiation and evolution in polycrystalline brittle materials. part i: Theory and numerical implementation, *Mechanics of Materials* 35 (2003). doi:10.1016/S0167-6636(02)00285-5.

- [128] V. Tvergaard, J. W. Hutchinson, The influence of plasticity on mixed mode interface toughness, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 41 (1993). doi:10.1016/0022-5096(93)90057-M.
- [129] I. Scheider, W. Brocks, Simulation of cup - cone fracture using the cohesive model, *Engineering Fracture Mechanics* 70 (2003). doi:10.1016/S0013-7944(03)00133-4.
- [130] M. Ortiz, A. Pandolfi, Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44 (1999). doi:10.1002/(SICI)1097-0207(19990330)44:9<1267::AID-NME486>3.0.CO;2-7.
- [131] V. Tvergaard, Effect of fibre debonding in a whisker-reinforced metal, *Materials Science and Engineering A* 125 (1990). doi:10.1016/0921-5093(90)90170-8.
- [132] X. P. Xu, A. Needleman, Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 42 (1994) 1397–1434. doi:10.1016/0022-5096(94)90003-5.
- [133] A. C. Marino, E. J. Savino, S. Harriague, Baco (barra combustible) code version 2.20: A thermo-mechanical description of a nuclear fuel rod, *Journal of Nuclear Materials* 229 (1996). doi:10.1016/0022-3115(95)00246-4.
- [134] M. E. Cazado, E. Goldberg, M. A. Togneri, A. Denis, A. Soba, A new irradiation growth model for zr-based components of nuclear reactors for the dionisio code, *Nuclear Engineering and Design* (2021). doi:10.1016/j.nucengdes.2020.111009.
- [135] F. Christien, A. Barbu, Cluster dynamics modelling of irradiation growth of zirconium single crystals, *Journal of Nuclear Materials* 393 (2009). doi:10.1016/j.jnucmat.2009.05.016.
- [136] C. C. Dollins, In-pile dimensional changes in neutron irradiated zirconium base alloys, *Journal of Nuclear Materials* 59 (1976). doi:10.1016/0022-3115(76)90008-8.
- [137] D. Fainstein-Pedraza, E. J. Savino, A. J. Pedraza, Irradiation-growth of zirconium-base alloys. part i, *Journal of Nuclear Materials* 73 (1978). doi:10.1016/0022-3115(78)90556-1.
- [138] E. J. Savino, C. E. Laciaana, Radiation induced creep and growth of zirconium alloys, *Journal of Nuclear Materials* 90 (1980). doi:10.1016/0022-3115(80)90248-2.
- [139] S. C. Chapra, R. P. Canale, et al., *Numerical methods for engineers*, Boston: McGraw-Hill Higher Education,, 2015.

- [140] K. C. Park, A family of solution algorithms for nonlinear structural analysis based on relaxation equations, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 18 (1982). doi:10.1002/nme.1620180906.
- [141] D. M. L. D. Silva, B. P. Jacob, M. V. Rodrigues, Implicit and explicit implementation of the dynamic relaxation method for the definition of initial equilibrium configurations of flexible lines, in: *Proceedings of the International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering - OMAE*, Vol. 47462, 2006, pp. 131–140. doi:10.1115/OMAE2006-92153.
- [142] Openmp, architecture review board, <https://www.openmp.org/> (2021).
- [143] H. Si, Tetgen, a delaunay-based quality tetrahedral mesh generator, *ACM Transactions on Mathematical Software* 41 (2015). doi:10.1145/2629697.
- [144] E. Goldberg, M. E. Cazado, M. E. L. Peralta, A. Soba, *New module for simulating experiments without irradiation included in the dionisio 3.0 code*, *Nuclear Engineering and Design* 374 (2021) 111067. doi:10.1016/j.nucengdes.2021.111067. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0029549321000194>
- [145] D. Maugis, *Contact, adhesion and rupture of elastic solids*, Vol. 130, Springer Science & Business Media, 2013.
- [146] I. Mirolíúbov, S. Engálichev, N. Serguievski, F. Almamétov, N. Kúritsin, K. Smirnov-Vasíliev, L. Yáshina, *Problemas de resistencia de materiales*, Moscú, 1975.
- [147] S. C. Hunter, The hertz problem for a rigid spherical indenter and a viscoelastic half-space, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 8 (1960). doi:10.1016/0022-5096(60)90028-4.
- [148] Comsol multiphysics®, stockholm, sweden, <https://www.comsol.com/> (2021).
- [149] L. Alva, K. Shapovalov, G. M. Jacobsen, C. A. Back, X. Huang, Experimental study of thermo-mechanical behavior of sic composite tubing under high temperature gradient using solid surrogate, *Journal of Nuclear Materials* 466 (2015). doi:10.1016/j.jnucmat.2015.07.017.
- [150] A. Rogerson, Irradiation growth in annealed and 25 % cold-worked zircaloy-2 between 353-673 k, *Journal of Nuclear Materials* 154 (1988). doi:10.1016/0022-3115(88)90364-9.
- [151] M. A. Togneri, Modelos de crecimiento de vaina en combustibles nucleares bajo condiciones normales de operación en reactores pwr/phwr/bwr, Master’s thesis, Instituto de Tecnología Nuclear Dan Beninson (UNSAM) (2019).

- [152] V. Fidleris, R. P. Tucker, R. B. Adamson, *An Overview of Microstructural and Experimental Factors That Affect the Irradiation Growth Behavior of Zirconium Alloys*, ASTM International, 1987. doi:10.1520/STP28108S.  
URL [https://www.astm.org/DIGITAL\\_LIBRARY/STP/PAGES/STP28108S.htm](https://www.astm.org/DIGITAL_LIBRARY/STP/PAGES/STP28108S.htm)
- [153] A. Rogerson, Irradiation growth in zirconium and its alloys, *Journal of Nuclear Materials* 159 (1988). doi:10.1016/0022-3115(88)90084-0.
- [154] A. Fortis, G. Cocozz, Aceleración de la deformación de circonio irradiado a bajas temperaturas, *Revista Matéria* 9 (2) (2004) 138–143.
- [155] V. Fidleris, The irradiation creep and growth phenomena, *Journal of Nuclear Materials* 159 (1988). doi:10.1016/0022-3115(88)90083-9.
- [156] R. B. Adamson, *Irradiation Growth of Zircaloy*, ASTM International, 1977. doi:10.1520/STP35579S.  
URL [https://www.astm.org/DIGITAL\\_LIBRARY/STP/PAGES/STP35579S.htm](https://www.astm.org/DIGITAL_LIBRARY/STP/PAGES/STP35579S.htm)
- [157] P. Rudling, C. Patterson, R. Adamson, F. Garzarolli, Zirat17 annual report, Tech. rep., A.N.T. International (2012).
- [158] R. A. Holt, Mechanisms of irradiation growth of alpha-zirconium alloys, *Journal of Nuclear Materials* 159 (1988). doi:10.1016/0022-3115(88)90099-2.
- [159] M. Lemes, A. Denis, A. Soba, Simulation of nuclear fuel behavior in accident conditions with the dionisio code, *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science* 5 (2019). doi:10.1115/1.4042705.
- [160] I. A. E. AGENCY, *Fuel modelling in accident conditions (fumac)*, iaea-tecdoc-1889, Tech. rep., International Atomic Energy Agency (2019).  
URL <https://www.iaea.org/publications/13604/fuel-modelling-in-accident-conditions-fumac>
- [161] F. J. Erbacher, Rebeka test results, Tech. rep., KfK (1981).
- [162] . Griger, L. Maróti, L. Matus, P. Windberg, Ambient and high temperature mechanical properties of zrnbl cladding with different oxygen and hydrogen content, Tech. rep., KFKI Atomic Energy Research Institute (1999).
- [163] Z. Hózer, L. Maróti, L. Matus, P. Windberg, Experiments with vver fuels to confirm safety criteria, *TopFuel* (2001) 1–7.
- [164] Z. Hózer, C. Györi, M. Horváth, I. Nagy, L. Maróti, L. Matus, P. Windberg, J. Frecska, Ballooning experiments with vver cladding, *Nuclear Technology* 152 (2005) 273–285. doi:10.13182/NT05-A3676.

- [165] H. Karwat, Behaviour of a fuel bundle simulator during a specified heatup and flooding period oecd/nea/csni report no. 98 (rebeka experiment), Tech. rep., OECD-NEA (1985).
- [166] D. A. Powers, R. O. Meyer, Evaluation of simulated-loca tests that produced large fuel cladding ballooning us nrc report nureg-0536, Tech. rep., U. S. Nuclear Regulatory Commission (1979).
- [167] L. Vasáros, L. Matus, Steam oxidation of zr-alloys with h content , release of absorbed hydrogen ., Tech. rep., KFKI Atomic Energy Research Institute (1999).
- [168] F. J. Erbacher, H. J. Neitzel, H. Rosinger, H. Schmidt, K. Wiehr, Burst criterion of zircaloy fuel claddings in a loss-of-coolant accident., ASTM Special Technical Publication (1982) 271–283doi:10.1520/stp37058s.
- [169] P. V. Uffelen, C. Gyori, A. Schubert, J. van de Laar, Z. Hózer, G. Spykman, Extending the application range of a fuel performance code from normal operating to design basis accident conditions, Journal of Nuclear Materials 383 (2008) 137–143. doi:10.1016/j.jnucmat.2008.08.043.
- [170] C. Györi, Z. Hbzer, L. Mardti, L. Mafus, Vver ballooning experiments, Tech. rep., KFKI Atomic Energy Research Institute (1998).
- [171] E. Goldberg, A. Soba, Estudio de la propagación de fisuras en vainas de combustibles nucleares mediante mecánica de fractura elasto-plástica, in: Mecánica Computacional Vol. XXXV, Number 31, Applications to Nuclear Power Reactors (A), 2017, pp. 1753–1764.
- [172] Forskningsreaktor r2, studsvik ab, igång mellan 1960-2005, europeana, [https://www.europeana.eu/en/item/916123/SLM\\_item\\_424747](https://www.europeana.eu/en/item/916123/SLM_item_424747) (2020).
- [173] S. R. Soria, A. Tolley, A. Yawny, A study of debris and wear damage resulting from fretting of incoloy 800 steam generator tubes against aisi type 304 stainless steel, Wear 368-369 (2016). doi:10.1016/j.wear.2016.09.022.
- [174] J. H. Huang, S. P. Huang, Effect of hydrogen contents on the mechanical properties of zircaloy-4, Journal of Nuclear Materials 208 (1994). doi:10.1016/0022-3115(94)90208-9.
- [175] F. J. Gallego, J. J. Anza, Un modelo de elementos finitos mixtos para la resolución del problema del contacto elástico, Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería 5 (1989).
- [176] U. Sellgren, S. Björklund, S. Andersson, A finite element-based model of normal contact between rough surfaces, Wear 254 (2003). doi:10.1016/S0043-1648(03)00332-6.

- [177] M. D. Castellano, J. Zurita, L. Gracia, Determinación de tensiones de contacto mediante el mec en problemas multicuerpo con simetría axial, *Revista internacional de métodos numéricos para cálculo y diseño en ingeniería* (1993) 15–34.
- [178] A. Soba, A. Denis, Contacto intermitente y localizado entre dos superficies. aplicación al caso de la interacción pastilla-vaina (pci) en un combustible nuclear de potencia, *Revista Internacional de Metodos Numericos para Calculo y Diseno en Ingenieria* 25 (2009).
- [179] J. Turnbull, *Ifpe/candu-irdmr, in-reactor diameter measuring rig exp-fio-118 and exp-fio-119 fuel behaviour under loca conditions*, Tech. rep., Atomic Energy of Canada Ltd., Chalk River Laboratories (4 2007).  
URL [https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:40064948](https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:40064948)
- [180] M. Paraschiv, The romanian irradiation tests prepared for iaea/oecd database, *Top Fuel 2003 proceedings* (2003).
- [181] C. Gyori, J. Turnbull, *Ifpe/ifa-562, pellet surface roughness effect on thermal performances and pcmi*, Tech. rep., Nuclear Energy Agency of the OECD (NEA) (11 1997).  
URL [https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig\\_q=RN:41016810](https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:41016810)