

Modelado del comportamiento del combustible nuclear bajo irradiación mediante DIONISIO 2.0

SOBA Alejandro^{1,2}, DENIS Alicia¹, LEMES Martín¹, GONZÁLEZ Martín Emilio¹ - ¹Sección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear – Comisión Nacional de Energía Atómica – ² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

En este breve artículo se presenta la última versión de DIONISIO 2.0, un código de simulación del comportamiento del combustible nuclear bajo irradiación. Para el caso de un combustible de potencia, el código resuelve una barra completa mediante la división de la misma en sectores en la dirección axial, cada uno de ellos sometido a las condiciones locales de potencia lineal, temperatura del refrigerante y flujo neutrónico. En cada sector se selecciona un dominio representativo bi o tridimensional, que corresponde a la pastilla, el “gap” y la vaina, sobre el que se determinan la distribución de temperatura; la tensión-deformación elastoplástica de cada material debida a la dilatación térmica, el “swelling” (en la pastilla), el “creep” y el crecimiento por irradiación (en la vaina); la liberación de gases de fisión y el porcentaje del mismo presente en el volumen libre de la barra. La interacción termo-mecánica entre la pastilla y la vaina es analizada con especial detalle y, dado que bajo estas condiciones de contacto las exigencias sobre la vaina pueden llegar a ser extremas, llegando aún a la rotura, se ha desarrollado un módulo que permite considerar la presencia y evolución de una fisura. En lo que respecta a combustibles para reactores de investigación, el código resuelve un dominio tridimensional para diversos tipos de placas constituidas por el material fisible (que puede ser monolítico o disperso) y la vaina que puede ser de aluminio o zircaloy. DIONISIO ha participado en diversos proyectos internacionales de inter-comparación de códigos para reactores de potencia, con muy buenos resultados. Ha sido validado contra más de 34 experimentos completos obtenidos de la base de datos del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA). La versión para combustibles de investigación fue contrastada con experimentos controlados obteniéndose una muy buena concordancia con los datos medidos.

This work presents the latest version of the computer code DIONISIO 2.0. The code is aimed at predicting the behavior of a nuclear fuel under irradiation, both in power and research reactors. In the first case, the code solves a complete rod dividing it into a number of axial segments, each one subjected to the local conditions of linear power, coolant temperature and neutron flux. A representative two- or three-dimensional domain, consisting of pellet, gap and cladding is selected in each sector. The following are modeled: temperature distribution, thermal expansion, elastic and plastic strain and stress, creep, irradiation growth, mechanical interaction between pellet and cladding, fission gas release, gas mixing, swelling, densification and restructuring. The code considers the presence and evolution of a crack in the cladding. In regard to fuels for research reactors, the code solves a three-dimensional domain consisting of the fissile material (which may be monolithic or dispersed) and the cladding (which may be of Aluminium or Zircaloy). DIONISIO participated with very good results in different international intercomparisons of fuel codes for power reactors. The code results were compared with more than 34 experiments obtained from the International Atomic Energy Agency data base. The version of research reactors was contrasted against controlled experiments and other similar codes with highly satisfactory results.

1. Descripción general del código y métodos utilizados

Existen diversas y variadas razones que justifican e impulsan el desarrollo continuo de programas que se abocan a la simulación de los complejos fenómenos involucrados en la vida de una barra combustible nuclear. En primer lugar, en el transcurso del quemado del combustible ocurren numerosos fenómenos físicos y químicos interconectados. La formulación matemática de estos procesos da lugar a ecuaciones diferenciales que, aún en forma simplificada, conducen a ecuaciones ordinarias no lineales que no poseen solución analítica, por lo que debe encararse su resolución en forma numérica. Por

otro lado, los numerosos fenómenos mencionados responden a la historia real de irradiación a la que es sometida la barra combustible y al tiempo en que éste permanece en actividad. En esta compleja historia no todos los parámetros involucrados pueden ser medidos, ya sea por la inaccesibilidad de los mismos, como por el elevado costo que la obtención de ese resultado tiene. Por estas razones un código de simulación probado, si bien no otorga una respuesta concluyente, permite obtener una base sobre la que comenzar a calcular o proyectar ciertos emprendimientos en forma económica y segura. Del mismo modo las predicciones de dichas simulaciones son fuente de ajustes y mejoras en el diseño del combustible, reduciendo significativamente la

cantidad de ensayos experimentales necesarios para optimizar un producto mediante una costosa implementación en planta.

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

Por todos estos motivos, la Sección Códigos y Modelos de la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear de la CNEA viene desarrollando desde hace más de una década el código DIONISIO, destinado a la simulación del comportamiento del combustible bajo irradiación. El código analiza las principales situaciones termohidráulicas, termomecánicas y termoquímicas a las que el combustible nuclear, sea para reactores de potencia como de investigación, se ve sometido durante su permanencia en operación dentro del reactor. Está basado en tecnología de elementos finitos para discretizar los dominios involucrados y resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales relacionadas con cada problema. Sin embargo no es el único método numérico que utiliza: posee modelos resueltos en diferencias finitas, interpolación y extrapolación lineal, métodos de integración no lineales en el tiempo mediante algoritmos de Runge-Kutta, entre otros.

El código se empleó para simular una extensa serie de experimentos, en particular las irradiaciones de combustibles de óxidos mixtos (MOX) fabricados por Argentina en 1986 [Marino, 1996], los de la serie FU(el) M(odelling) at EX(tended) Burnup (FUMEX) I y II que contienen casos de reactores de agua liviana presurizada (PWR) así como de reactores de agua pesada presurizada (PHWR) [IAEA, 1998]. Participó en un experimento ciego organizado por la Internacional Atomic Energy Agency (IAEA) [Sah, 2008] a partir de datos obtenidos sobre reactores PHWR y durante el trienio 2008-2011 DIONISIO fue seleccionado por el OIEA como el código para representar a la Argentina en el experimento internacional FUMEX III, destinado a la comparación de los resultados de distintos códigos de simulación frente a una serie de experimentos proporcionados por la propia entidad organizadora [IAEA, 2013]. Esta edición del experimento, la tercera, poseía el objetivo primordial de analizar el rango de predictibilidad de los modelos dedicados a analizar quemado extendido, incluidos en los diferentes códigos del proyecto. Como resultado de esta participación

DIONISIO desarrolló una batería de modelos que permiten extender el rango de sus simulaciones hasta un quemado medio de aproximadamente 60MWd/KgU, lo que significa un quemado local en la zona más exigida de la pastilla de aproximadamente 120-180MWd/KgU.

2. Tratamiento del dominio. Modelos incluidos en el "kernel" del código

DIONISIO 2.0 permite tratar con barras combustible de elementos de reactores tipo CANDU (como los utilizados en Embalse), Atucha I/II, PWR (similar al diseño del reactor CAREM), BWR y WWER.

En la dirección longitudinal de una barra combustible el flujo neutrónico no es constante, lo que determina que la potencia lineal generada por la barra dependa de la coordenada axial. De igual manera, el agua de refrigeración aumenta su temperatura a lo largo de su recorrido. De este modo, cada punto de la barra en la dirección axial posee condiciones de trabajo locales diferentes. DIONISIO particiona la barra en sectores longitudinales (a elección del usuario) y trata cada sector con la potencia lineal, la temperatura del refrigerante y el flujo neutrónico de esa porción. Sobre cada sector resuelve localmente un dominio compuesto por pastilla, "gap" y vaina, dominio que puede ser bidimensional o tridimensional (a elección del usuario). Para el caso de una geometría bidimensional, se consideran coordenadas cilíndricas con simetría de revolución alrededor del eje z y de reflexión en el plano central de la pastilla. Para el caso de una geometría tridimensional, solo se considera reflexión en el plano central (Figura 1). El método numérico principal utilizado para discretizar el dominio es el de elementos finitos y sobre este esquema se resuelven las ecuaciones de termo-elastoplasticidad no lineal. A partir de un cálculo termohidráulico realizado sobre el canal que rodea a la barra por el que circula el líquido refrigerante, se determinan las condiciones de contorno de la temperatura, considerando la existencia de una capa de óxido que crece en el borde externo del zircaloy. Con esta condición se resuelve la distribución de temperatura y se calculan las tensiones y las deformaciones. Las deformaciones consideradas son ocasionadas por la dilatación térmica, el hinchado y densificación en la pastilla, el "creep" y el crecimiento por irradiación en la vaina. El código posee un algoritmo para predecir la producción y liberación de gases de fisión al volumen libre así como diversos modelos que siguen la reestructuración del combustible. Los principales detalles de estos modelos pueden consultarse en [Denis, 2003], [Soba, 2007], [Soba, 2008]. Como los distintos parámetros involucrados en estos cálculos dependen en general de la temperatura, el estado de tensiones o el quemado, los modelos son no-lineales

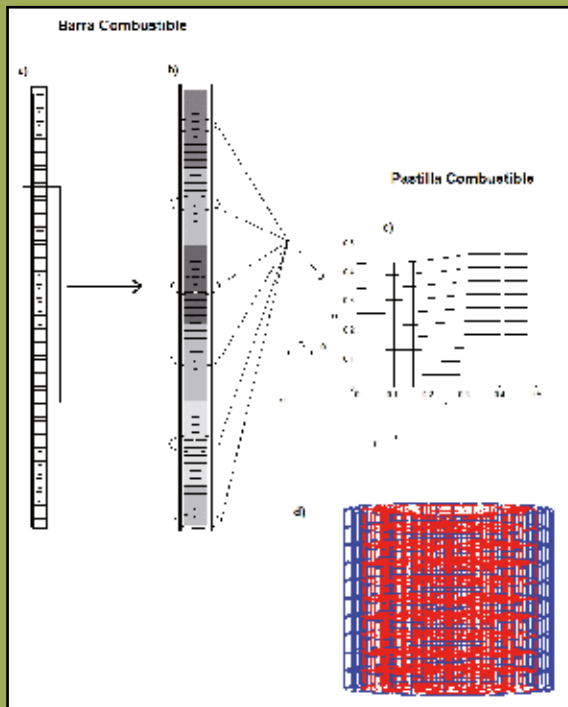


Figura 1: Dominio de resolución para barras combustibles: a) barra esquemática, b) barra dividida en sectores, c) dominio bidimensional discretizado en elementos finitos, d) dominio tridimensional discretizado.

y deben resolverse hasta alcanzar convergencias.

En referencia a los combustibles tipo placa, el código resuelve un dominio tridimensional, es decir considera el dominio completo real de trabajo a escala de la placa. Es posible trabajar con dominios de placas planas o placas curvas. Asimismo, es posible seleccionar el material de la vaina (aluminio 6061 o zircaloy-4) o el tipo de combustible, que puede ser UO_2 o UMo para el caso monolítico, o U_3Si_2 o UMo en matriz de aluminio para el caso de combustibles dispersos (Figura 2).

En este caso el programa determina las condiciones termo hidráulicas del refrigerante que baña las placas en función de la velocidad del ingreso, su caudal y sus condiciones químicas, para determinar la temperatura del contorno, sobre el que también considera crecimiento de una capa de óxido. Con estas condiciones, más la historia de potencia o de flujo neutrónico del sistema, que posee en general un perfil cosenoidal, el código resuelve las ecuaciones termo elasto-plásticas en el dominio y determina la fracción en volumen de combustible, el tamaño de la capa de óxido, el hinchado acumulado o, en el caso de combustibles dispersos, la fracción en peso de los compuestos inter metálicos que se generan bajo irradiación. En [Denis, 2007], [Soba, 2006], [Soba, 2007] pueden hallarse detalles de los modelos. El ingreso de la geometría del dominio así como la historia de potencia lineal y/o el flujo neutrónico a

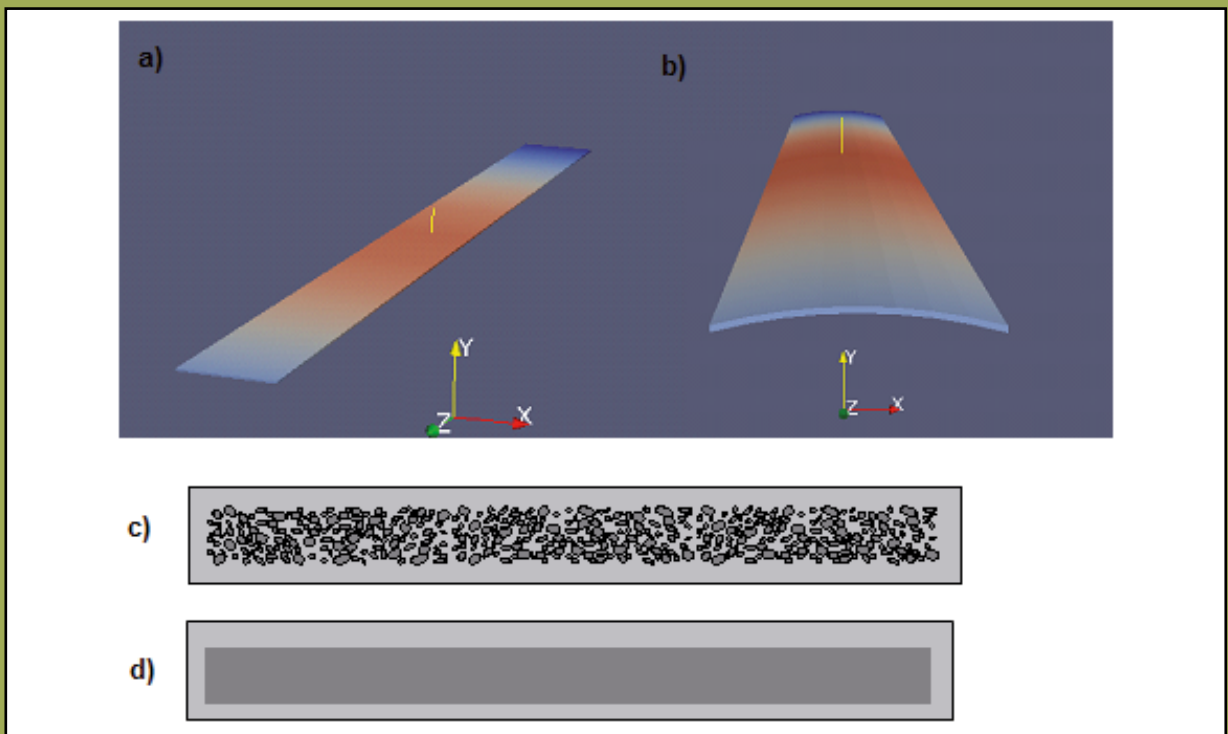


Figura 2: Dominio de resolución de placas combustibles. a) Placa plana, b) Placa curva, c) combustible disperso, d) combustible monolítico.

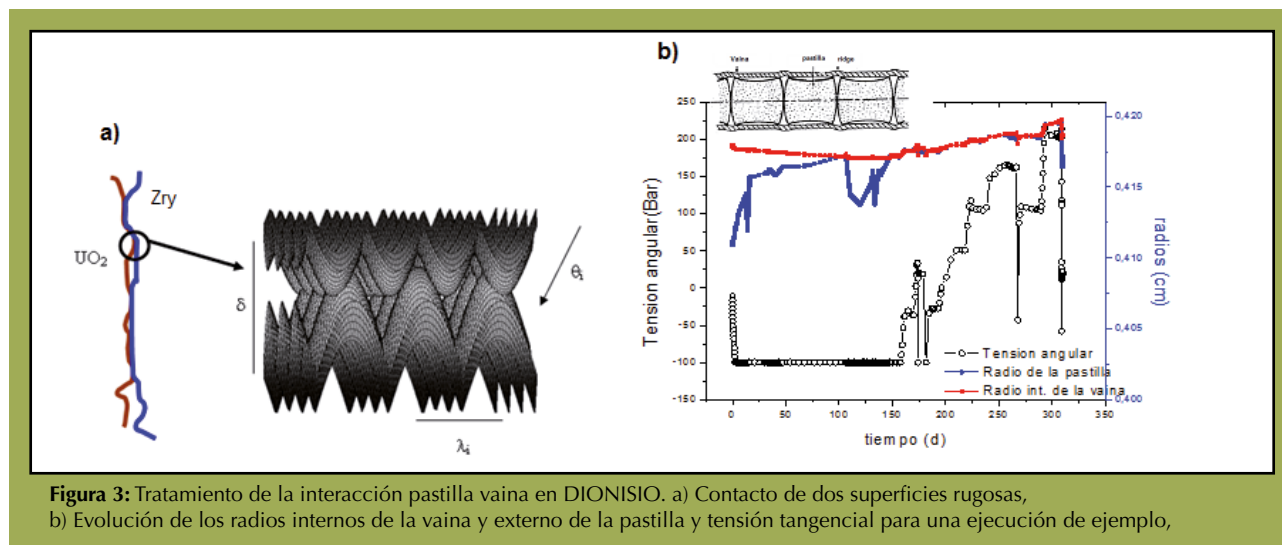
la que se ve sometida la barra o la placa se realiza través de archivos de entrada pertinentes.

3. Combustible de potencia: contacto pastilla-vaina. Evolución de fisuras

El tratamiento del “gap” en DIONISIO deviene en uno de los aspectos fundamentales del código, ya que la distribución de temperatura y el modo de extracción del calor del sistema están fuertemente relacionados a la presencia o no de “gap”, su ancho y el gas que lo llena. Asimismo, dicha distribución térmica es condicionante de todo el resto del cálculo, pues la mayoría de los fenómenos involucrados dependen de la temperatura y/o de los gradientes térmicos que se producen en el sistema. Por eso mismo, determinar la conductividad térmica de los materiales implicados ha llevado una gran parte del trabajo experimental relacionado con los componentes de reactores nucleares generando, especialmente para el combustible y la vaina, modelos ampliamente validados. Sin embargo, para el caso de la conductividad del “gap”, aún hoy existen baches importantes en dos aspectos fundamentales. Por un lado, existen pocos datos experimentales; por otro, los modelos teóricos propuestos no son válidos para todo el rango de exigencias a las que

deben responder los combustibles durante la historia de potencia completa. A lo largo del tiempo de permanencia dentro de un reactor, el “gap” puede permanecer abierto durante gran parte de su historia mientras cambia la composición de gases, debido a la liberación progresiva de productos de fisión gaseosos (de baja conductividad), afectando a la temperatura y la presión interna del elemento; o puede cerrarse y producir contacto vaina-pastilla (PCMI, *Pellet Cladding Mechanical Interaction*), el cual dependerá de la rugosidad de las superficies. Por otro lado, las variables involucradas toman valores en un amplio rango, por ejemplo, la presión interna del gas de llenado va desde pocas atmósferas al comienzo de la vida hasta las 77-100 al final de la misma; en el caso del “gap” cerrado, la presión de contacto, parámetro que resulta difícil de determinar, puede pasar de unos pocos MPa hasta alcanzar valores de 50 MPa.

Además, debe tenerse en cuenta que la fragmentación de la pastilla de combustible, que se produce durante las primeras rampas de la historia de potencia debido a las tensiones térmicas, disminuye el espacio entre la vaina y la pastilla. Por otro lado, con el paso del tiempo, el “creep” de la vaina y el “swelling” de la pastilla llevan al “gap” a cerrarse total o parcialmente. El aumento radial de la pastilla



puede dar lugar, en caso de “gap” cerrado, a arrugas circunferenciales en la superficie de la vaina, conocida como “efecto bambú” (Figura 3).

En primer lugar se desarrolló un modelo para predecir la conductancia térmica entre dos superficies rugosas en contacto [Soba, 2005]. Esta conductancia debe tener en cuenta que, además, el “gap” puede hallarse total o parcialmente cerrado con distintos grados de presión entre los materiales involucrados, como se observa en la figura 3 a).

Para analizar el problema de la interacción

mecánica entre la pastilla y la vaina se desarrolló un algoritmo que considera el movimiento solidario de los nodos en contacto una vez que éste ocurre, con restricciones locales que imponen una condición de ligadura. Este algoritmo se resuelve mediante el método de multiplicadores de Lagrange obteniéndose el desplazamiento de los nodos y la fuerza de contacto local resultante [Bathe, 1985], [Soba, 2008], [Soba, 2009]. Este modelo se ejecuta cuando el contacto comienza. En la figura 3 b) puede observarse, para una historia ejemplificada,

que la evolución del radio interior de la vaina y el exterior de la pastilla tienen en sentidos contrarios hasta el momento en que el contacto comienza. A partir de ese momento se observa cómo la tensión en la dirección tangencial se incrementa en función de la exigencia a la que se somete a la vaina. Por otro lado, la vaina comienza a ser empujada hacia el exterior, lo que se evidencia en una deformación

externa pronunciada especialmente en la zona de los extremos de la pastilla (“efecto bambú”).

Estos modelos son cruciales para determinar la distribución de temperatura en el dominio analizado. En la Figura 4 se presentan valores de temperaturas centrales obtenidos por el código contra una serie de experimentos provistos por los ejercicios FUMEX.

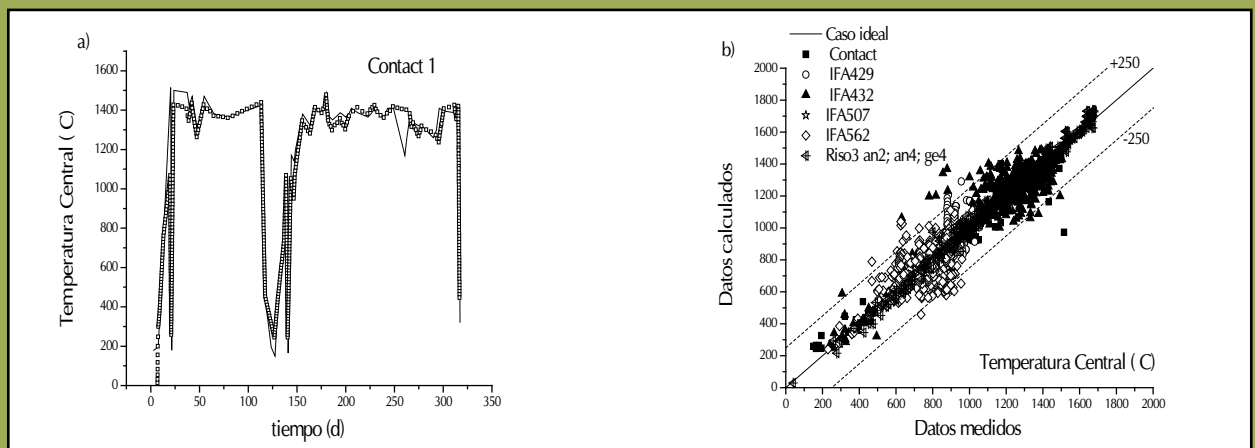


Figura 4: a) Distribución de temperatura central a lo largo de una historia de potencia para el experimento Contact 1 [Turnbull, 1998].
b) Resultados de un análisis extensivo de temperaturas centrales para experimentos tomados de la base de datos de la IAEA [NEA-1729], [NEA-1546], [NEA-1488], [NEA-1547], [NEA-1502].

Para desarrollar un modelo de crecimiento de fisuras en las vainas de barras combustibles se deben tener en cuenta los diferentes procesos involucrados en las fallas de vainas de combustibles en operación, todos mutuamente relacionados, entre los que se deben destacar:

i) la aparición de PCMI: la fuerte interacción mecánica entre la pastilla y la vaina; especialmente en regiones fisuradas de la pastilla o en la zona de interfase pastilla-pastilla. Sobre estas zonas no sólo se genera una distribución de tensiones pronunciada sino que además se origina una gran concentración de productos de fisión como yodo o cesio, ambos factores críticos en la corrosión bajo tensión;

ii) el coeficiente de rozamiento entre el material de la vaina y el de las pastillas, fuertemente dependiente de la rugosidad de las superficies, que va a aumentar la fuerza tangencial sobre la vaina en la dirección de apertura de las fisuras;

iii) usualmente las fallas en vainas ocurren en el marco de fuertes rampas de potencia que impiden la relajación de tensiones; y finalmente

iv) existe una fuerte influencia de la estadística ya que cientos de vainas sometidas a las mismas condiciones sólo producen un porcentaje de fallas muy bajo, lo que lleva con frecuencia a incluir modelos probabilísticos en los análisis de fractura.

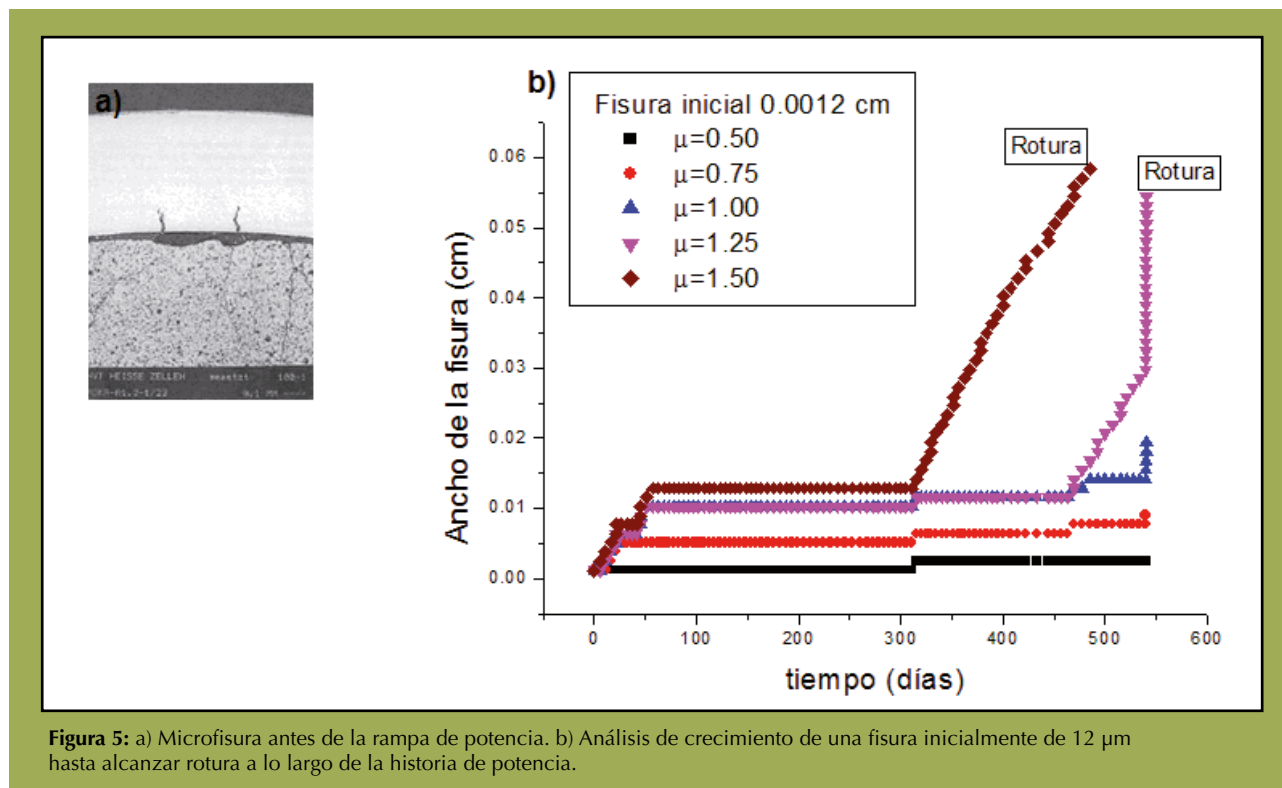
El modelo incluido en DIONISIO no considera el cuarto factor ya que contempla la existencia de

un iniciador intergranular de un tamaño del orden de los micrones (*microcracks*) o de defectos del material. Por otro lado, los análisis experimentales de condiciones mecánicas del zircaloy muestran la fuerte dependencia de sus constantes constitutivas con la historia térmica a la que éste es sometido [Talia, 1997]. Numéricamente, el modelo procede a calcular el parámetro fracto-mecánico J , llamado función intensidad de tensiones [Anderson, 1991]. Bajo la suposición de corrosión bajo tensiones por alta concentración de yodo (I-SCC), la propagación de una fisura se produce cuando J es mayor que el umbral de crecimiento de fisura transgranular, J_{SCC} . La propagación que ocurre en un campo de tensión bajo corrosión transgranular moderada es frágil y su velocidad de propagación se considera controlada por las condiciones sobre el “tip” de la fisura, la intensidad de tensiones, la temperatura y la cantidad de yodo disuelto en la atmósfera, fenómenos que son variables dentro del cuerpo del programa y se actualizan con el tiempo. La velocidad de propagación del “crack” bajo I-SCC se expresa como:

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

donde a es la profundidad de la fisura, C es una constante en m/s , n es una constante adimensional, que para el Zircaloy-2/-4 toma valores en el intervalo (1,35-1,5), Q es la energía de activación, que depende de la temperatura y toma valores en el intervalo [33-45] $kcal\ mol^{-1}$ para bajas temperaturas ($<300\ ^\circ C$) y en el intervalo (19-33) para la región

de altas temperaturas [Soba, 2008]. El umbral de intensidad de tensiones J_{scc} depende de la textura del material, la temperatura y la irradiación y, bajo condiciones normales de operación, puede caer dentro del intervalo (250-1.000) $N\ m^{-1}$. $F(I_2)$ es una función adimensional de la cantidad de yodo en la atmósfera internadelabarra.



En el marco del programa sobre combustibles de óxidos mixtos (U,Pu) O_2 llevado a cabo en la CNEA a partir de 1986, se construyeron prototipos que fueron irradiados en el reactor HFR-PETTEN (Holanda) [Marino, 1994]. Dos de las barras que componían el experimento, A.1.2 y A.1.3, fueron sometidas a historias de potencia similares, hasta alcanzar un quemado de aproximadamente 15 MWd/KgU durante 531 días efectivos de irradiación. Posteriormente, a la barra A.1.3 se la sometió a una fase final de grandes rampas de potencia altamente exigentes. Durante esta última fase se detectó un incremento en la actividad del circuito primario por lo que el experimento tuvo que ser interrumpido. Una inspección visual detectó un pequeño agujero circular en la vaina, característico de las fallas por SCC.

En la Figura 5.a) se presenta una micrografía tomada en una zona que se presume próxima a fallar. Este experimento fue utilizado para testear las curvas y parámetros introducidos en la función de fractura de la vaina del código. Se supuso una fisura

preexistente en la vaina de 12 mm de longitud, que equivale a unos pocos tamaños de grano del zircaloy, y se sometió a la barra a la historia de potencia experimental. Se supusieron diversos coeficientes de rozamiento entre la pastilla y la vaina para analizar con cuál de ellos se alcanzaba un comportamiento similar al observado en el experimento. En la Figura 5.b) se observa la evolución del crecimiento de la fisura para diferentes valores de dicho coeficiente. El comportamiento óptimo se observa para $m=1.25$, en donde la fisura evoluciona hasta el final de la irradiación estacionaria y crece drásticamente hasta romperse debido a la exigencia de las rampas de fin de vida.

4. Combustibles de potencia: condiciones de alto quemado

La extensión a rangos elevados de quemados ($>50MWd/KgU$) de combustibles de óxido de uranio y óxidos mixtos, desencadena dentro de las pastillas procesos no observados para quemados bajos,

que tienen particular relevancia en el rendimiento del elemento combustible. Uno de los efectos más importantes tiene que ver con la formación y evolución de la llamada “rim zone”, una zona que nace en el borde externo de la pastilla y se ensancha a medida que aumenta la fluencia neutrónica. Por sus características físico-químicas [Matzke, 1992], [Cunningham, 1992] esta zona posee una muy baja conductividad afectando la distribución de temperaturas dentro de la pastilla, así como su consistencia mecánica. El “rim” es producto de un aumento de fisiones en la zona externa debido a la alta sección eficaz de absorción del uranio 238 en las resonancias para neutrones epitérmicos. Esa no uniformidad conlleva la acumulación diferenciada de especies fisiles, especialmente ^{239}Pu y ^{241}Pu , producto de cadenas de decaimiento, que a su vez generan mayor densidad de fisiones en la zona exterior. Como consecuencia, el quemado y la potencia lineal, proporcional tanto al flujo neutrónico como a la probabilidad de fisiones, resultan dependientes de la coordenada radial, obteniéndose una diferencia de 2 a 3 veces superior entre el quemado promedio y el de la corona exterior [Cunningham, 1992].

La zona “rim” crece en espesor con el paso del tiempo (o del quemado) a partir de su aparición, la cual viene determinada por el llamado quemado umbral (aprox. entre 60 y 80 MWd/KgU). En DIONISIO hemos incluido una serie de subrutinas destinadas a resolver

las ecuaciones de balance de las especies fisiles más relevantes para describir en forma adecuada la zona de alto quemado, utilizando la teoría de difusión unidimensional. Como el interés se ubica en una predicción aproximada, se desarrollaron ecuaciones empíricas de las secciones eficaces de absorción y captura en función del quemado, el enriquecimiento de ^{235}U y, por supuesto, la coordenada radial, para así poder predecir con cierto grado de validez la evolución del quemado local (relacionado al tamaño del “rim”) y la distribución radial de los isótopos ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu y ^{242}Pu [Soba, 2013]. Por otro lado, se han incluido subrutinas para simular las modificaciones micro estructurales que la pastilla sufre en su borde exterior bajo estas condiciones, especialmente en lo relativo a la densidad de poros y su distribución [Lemes, 2013].

A manera de ejemplificación se presenta en la Figura 6 la predicción de DIONISIO frente a resultados provistos por el experimento IFA-597.3 [Malén, 1997] irradiado en el reactor Ringhals 1 BWR hasta un quemado medio de 68 MWd/KgU y un quemado local aproximado de 130 MWd/KgU en la zona “rim”. DIONISIO predijo un quemado medio de 72 y un quemado en la zona “rim” de 141 Mwd/KgU. Se grafican las mediciones de U y Pu realizadas localmente mediante EPMA y se comparan con las curvas calculadas por el código.

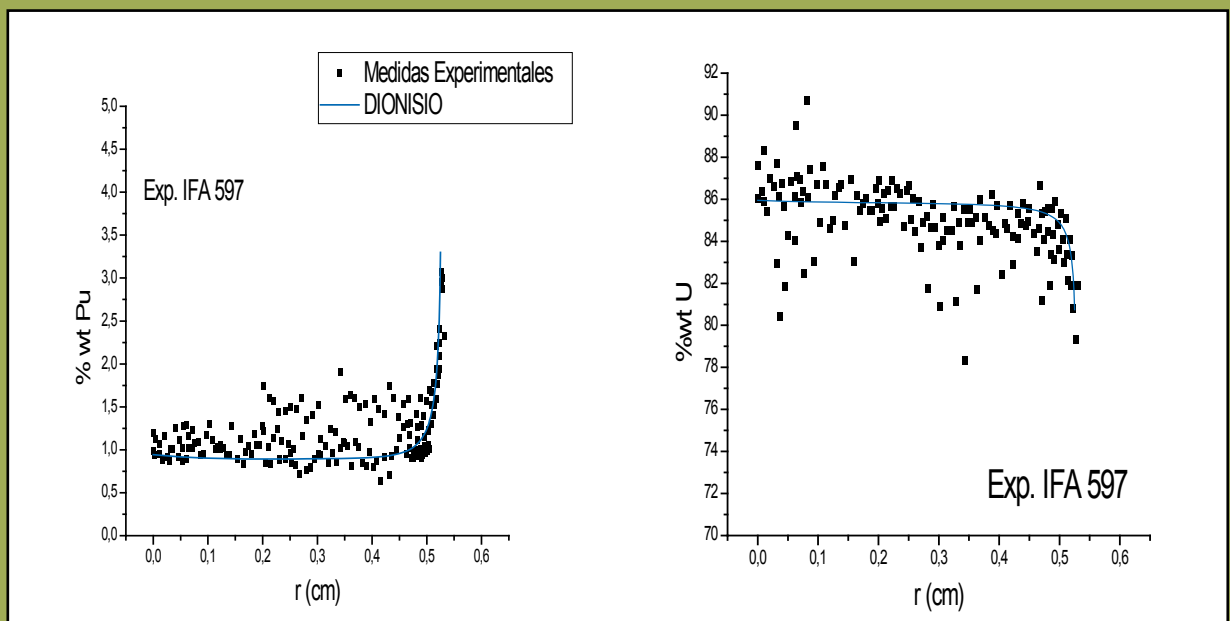


Figura 6: Plutonio y uranio local para el experimento IFA-597.3. Medido contra los calculado por DIONISIO 2.0

En la Figura 7 puede observarse una comparación un poco más extendida entre las predicciones numéricas realizadas por DIONISIO y las provistas por varios experimentos obtenidos de la base de datos del OIEA para el total de plutonio local.

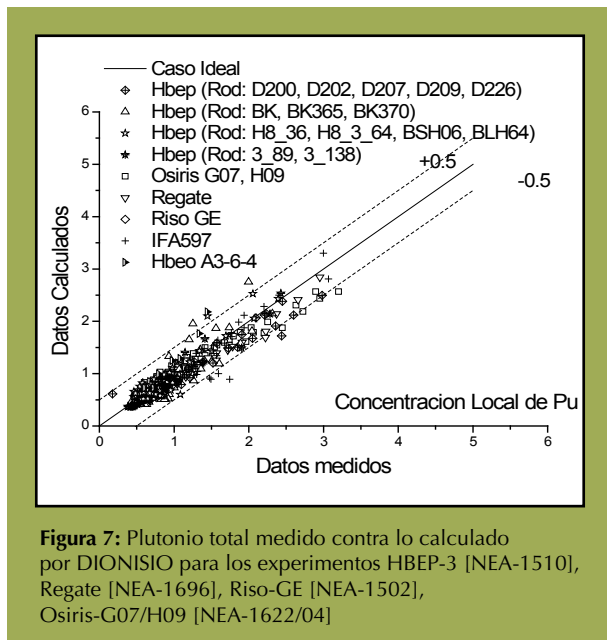


Figura 7: Plutonio total medido contra lo calculado por DIONISIO para los experimentos HBEP-3 [NEA-1510], Regate [NEA-1696], Riso-GE [NEA-1502], Osiris-G07/H09 [NEA-1622/04]

5. Combustibles tipo PLACA

En su versión destinada a combustibles para reactores de investigación, de geometría placa, se prevé la posibilidad de que el material combustible sea monolítico, en particular de una aleación de UMo, o disperso, formado por partículas esféricas que contienen el elemento físil disueltas en aluminio. En este caso, las partículas que el código contempla son de UMo, U_2Si_3 o UAL_x . La vaina del caso de material disperso es de aluminio, mientras que el monolítico es recubierto con zircaloy. Cada material está caracterizado por sus constantes físicas particulares. El material disperso exige el uso de reglas de mezcla. La Tabla 1 presenta las leyes de mezcla utilizadas para tratar el compuesto; el subíndice m representa a la matriz y p a la partícula de material fisil. V_j es la fracción en volumen de la fase j ($j=m, p$). En algunos casos se proveen dos reglas de mezcla, que constituyen las cotas superior e inferior a los valores obtenidos experimentalmente. En el caso $U-(x\%wt)Mo$ las cotas superiores dan las respuestas más adecuadas para los análisis desarrollados en este trabajo [Hayes, 2004].

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

Tabla 1: Constantes utilizadas en materiales compuestos.

A modo de ejemplo presentamos algunos resultados de validación del código contra datos medidos. El experimento FUTURE [Marelle, 2004] consistió en la irradiación de placas de U-7%wtMo disperso en Al con una densidad de uranio de $8,5g/cm^3$ envainadas en aluminio. El compuesto disperso se construyó con polvos de UMo obtenidos por atomización (partículas esféricas), por lo que la porosidad de fabricación resultó relativamente baja (1,1%). Las placas fueron irradiadas durante 40 días a una potencia lineal de aproximadamente $1,2 \times 10^4$ W/cm. La temperatura del refrigerante al ingreso fue de $40^\circ C$.

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

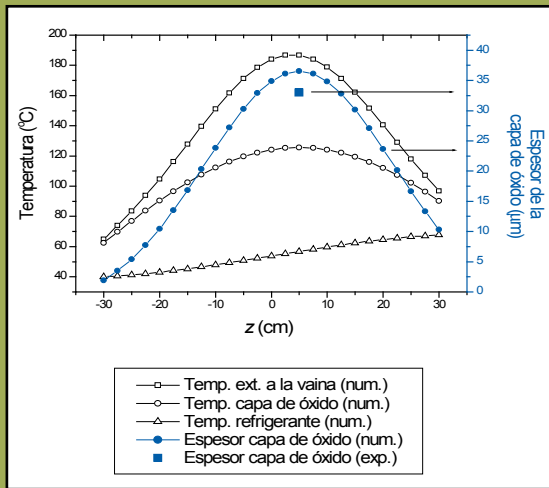


Figura 8: Distribución de temperaturas en la superficie de la vaina, sobre la capa de óxido y en el canal de refrigeración, calculadas con DPLACA. Sobre el eje de la derecha se presenta el espesor de la capa de óxido a lo largo de la dirección z comparado con el resultado experimental [Marelle, 2004].

Para combustibles dispersos en base a UMo, debido a reacciones termoquímicas que se producen entre los materiales que lo conforman y la matriz de aluminio, se generan nuevos compuestos intermetálicos que además de contribuir al hinchado de la placa, consumen el aluminio y, por ser de baja conductividad, aumentan la temperatura en todo el dominio. El experimento FUTURE se caracterizó por ser de alta exigencia térmica, por lo que tuvo que ser interrumpido antes de completarse debido a la gran deformación de las placas por hinchado a causa del intermetálico generado. En la Figura 9 se observan los porcentajes en volumen de combustible, intermetálico y matriz predichos numéricamente en el centro de la placa en función de la coordenada axial y a fin de vida (40 días de quemado). Puede verse cómo el aluminio prácticamente ha desaparecido en la zona de mayor crecimiento del intermetálico, que corresponde a la mayor temperatura en la dirección longitudinal. La desaparición de la porosidad de fabricación, en cambio, al ser un fenómeno dependiente de la tasa de fisiones, sigue una ley semejante a la distribución de quemado a lo largo de la placa, aunque en forma inversa.

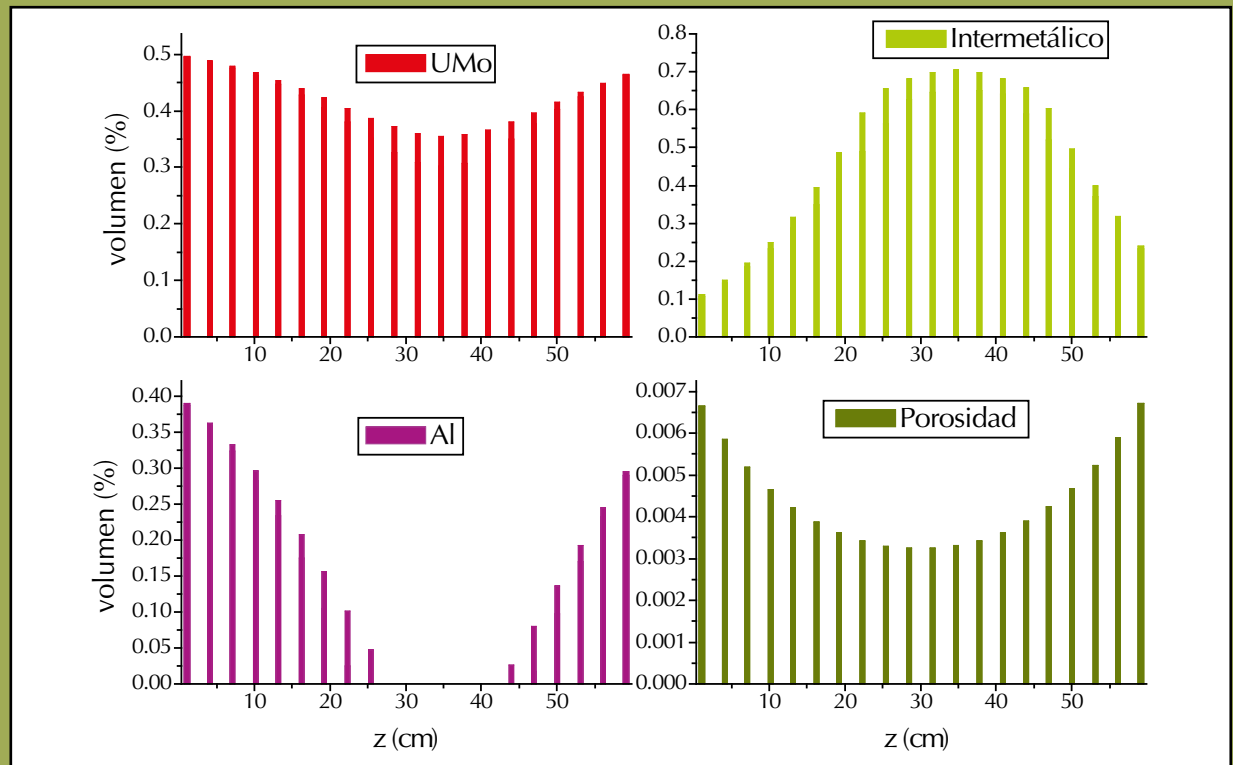


Figura 9: Simulación con DIONISIO del porcentaje de material fisil, inter metálico generado, aluminio y porosidad para el combustible del experimento FUTURE.

6. Modos de uso del código. Versatilidad e instalaciones

Dionisio se distribuye a través de un sistema de control de versiones (SVN) que además de contener el código permite llevar un registro de versiones del mismo. Por el momento existe un único usuario con poder para modificar la versión allí instalada pero cualquier invitado con usuario y "password" habilitante puede bajar el código previa solicitud de autorización a la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear. El código se distribuye en dos versiones, una versión Windows, que utiliza el compilador

Inter. FORTRAN para Visual Studio [Microsoft, 2010] y una versión bajo sistema operativo UNIX.

DIONISIO posee una serie de archivos de entrada en formato texto que deben estar incluidos en una carpeta "input". El archivo principal *Dionisio.inp* posee la descripción del tipo de problema a resolver, el nombre de los archivos que el código llama durante esa ejecución así como información relativa al modo de paralelización y formato de salida gráfica. En la Tabla 2 se presenta un ejemplo de este archivo principal. Los datos suministrados por el usuario están resaltados mientras que las palabras de uso obligatorio se resaltan en azul.

```
#Initial file for DIONISIO 2.0
DIO_DATA
NAME          TEST          # Un nombre para el caso
CASE          RUN          # tipo de ejecución AHP/MESH/POWER/RUN
RUN_TYPE     NO_restart  # si hay restarting o no
GEOMETRY     CILINDRICA   # placa o cilíndrica
DIMENSION    2           # una, dos o tres dimensiones
SECTORES     1           # número de sectores a calcular
DATA_FILE    cilindro.dio # archivo con la Historia de potencia
HYSTORY_FILE HistotestHB.dio # archivo con la Historia de flujo rápido
FLUX_FILE    fluxtest.dio # PWR, PHW, BWR, CAR, PLA, PLG
ELEMENT_TYPE PWR         # tipo de paralelización
PARALLEL     default     # tipo de post proceso
POSTPROCESO  Paraview
END_DIO_DATA
```

Tabla 2: Ejemplo de entrada principal de DIONISIO 2.0

DIONISIO permite direccionar sus salidas para utilizar el programa PARAVIEW [PARAVIEW, 2014], un paquete dedicado a la visualización de sistemas de información científica. La Figura 10 presenta algunas

de las posibilidades gráficas del mismo relacionadas a una ejecución de la versión tridimensional del código.

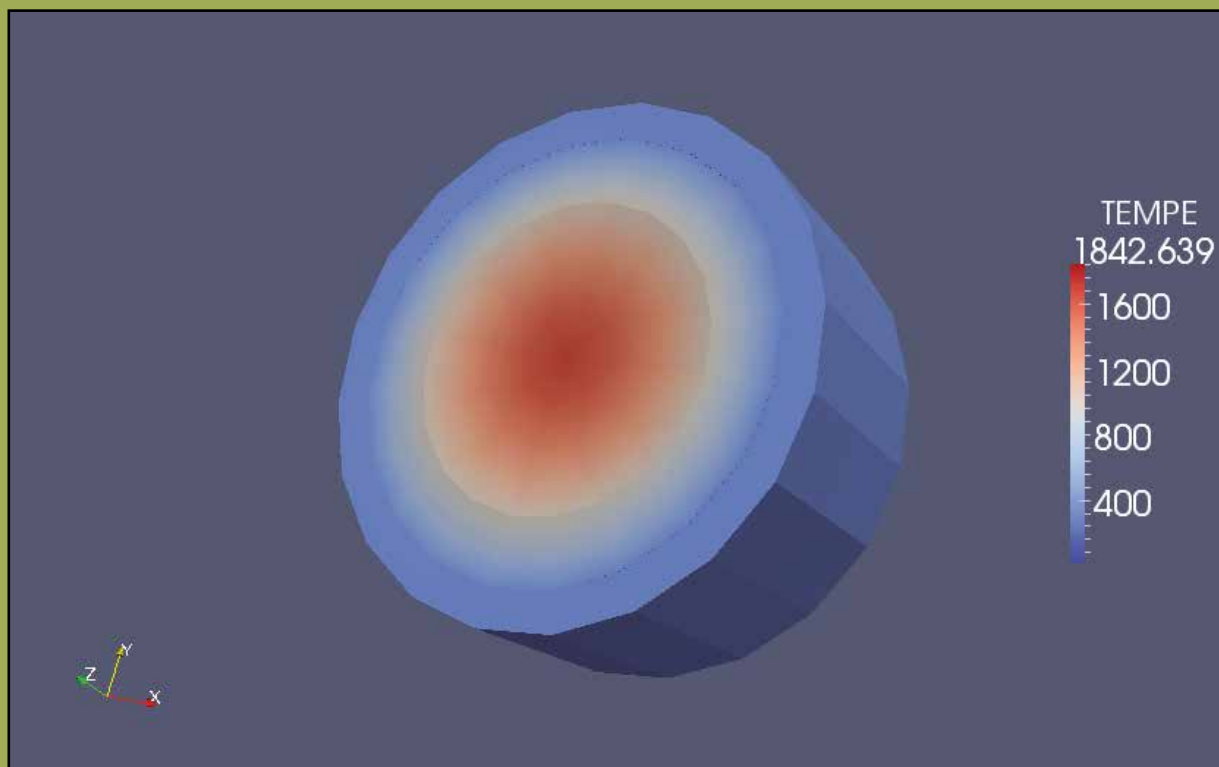


Figura 10: Distribución de temperaturas para un dominio tridimensional en un dado instante de potencia lineal.

7. Conclusiones

Argentina es, a través de la CNEA y de las empresas del área, un país productor y generador de tecnología nuclear y, al igual que otros países con similares aspiraciones, necesita contar con herramientas modernas de simulación numérica de desarrollo propio, además de los paquetes adquiridos en el extranjero. DIONISIO 2.0 se presenta como una alternativa sólida destinada a proveer soluciones en el área de la simulación del combustible nuclear tanto a grupos dedicados al diseño, como la experimentación o la predicción del comportamiento de combustible nuclear.

En el presente, DIONISIO se halla involucrado en proveer simulaciones para el grupo de diseño del reactor CAREM, así como los requerimientos necesarios para el LOOP a ser incluido en el nuevo reactor de investigación RA-10. En cuanto a combustibles de investigación, el código ha participado en la validación del combustible UMo con vainas de zircaloy y participará en la provisión de requerimientos en el diseño del RA-10.

Si bien DIONISIO 2.0 se encuentra en etapa de validación, se debe destacar que el desarrollo de un código de este tipo es una tarea que requiere un

trabajo continuado, no solo para extender el código a nuevos escenarios, incluyendo nuevos modelos, sino en un continuo esfuerzo de contrastación con nuevos resultados experimentales.

Actualmente, el grupo se encuentra trabajando en modelos de accidente del tipo de pérdida de refrigerante (LOCA) en reactores de potencia, así como en modelos destinados a describir el comportamiento de combustibles de cuarta generación, los que serán oportunamente incluidos en el código.

Referencias bibliográficas

- [Anderson, 1991] T.L. Anderson. *Fracture mechanics. Fundamentals and applications*. CRC Press, Texas A&M University, USA, (1991).
- [Bathe, 1985] K. Bathe, A. Chaudhary. *A solution method for planar and axisymmetric contact problems*. *Int. J. Num. Meth. Engng*, 21, 65-88 (1985).
- [Cunningham, 1992] M.E. Cunningham, M.D. Freshley and D.D. Lanning, *Development and characteristics of the rim region in high burnup UO₂ fuel pellets*. *Journal of Nuclear Materials* 188 (1992).
- [Denis, 2003] A. Denis, A. Soba. *Simulation of Pellet-*

- Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. Nucl. Eng. and Des.* 223 (2003).
- [Denis, 2007] A. Denis, A. Soba, *PLACA/DPLACA: Code for simulating the behavior of a monolithic/disperse plate-type fuel.* RRFM 2007, Lyon, (2007).
- [Hayes, 2004] S.L. Hayes, M.K. Meyer, G.L. Hofman, J.L. Snelgrove. *U-Mo/Al dispersion fuel modeling. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Viena, Austria, (2004).*
- [IAEA,1998] *Fuel Modelling at Extended Burn up, IAEA-TECDOC-998, IAEA, (1998), (<http://www.iaea.org>; <http://www.oecd-nea.org/science/fuel/ifpelst.html>)*
- [IAEA,2013] IAEA-TECDOC-1697 *Improvement of Computer Codes Used for Fuel Behavior Simulation (FUMEX-III), (2013).*
- [Lemes, 2013] M. Lemes, Estudio analítico y numérico de los efectos de la irradiación hasta alto quemado en combustibles de reactores de potencia, Master Tesis, (2013).
- [Malén,1997] K. Malén, A. Micski, D. Schrire, B. Nilsson, *PIE of high burnup BWR fuel rod IFA-597.3 (Rod8), Studsvik Nuclear AB SwedenHRP-356/U. (1997)*
- [Marino, 1994] A. C. Marino, E. Pérez, P. Adelfang. *Argentine Nuclear Fuels MOX irradiated in the Petten Reactor, Experience analysis with the BACO code. Water Reactor Fuel Element Modeling at High Burn up. Windermere, England, (1994).*
- [Marino, 1996] A.Marino, E.Pérez, P.Adelfang, *Irradiation of Argentine (U,Pu)O₂ MOx fuels. Post irradiation results and experimental analysis with the BACO code, J.Nucl. Mater. 229 (1996)*
- [Marelle, 2004] V. Marelle, F. Huet, *Thermo-Mechanical modelling of U-Mo fuels with MAIA. RRFM, Munchen, Germany, (2004).*
- [Matzke,1992] Hj. Matzke, *On the rim effect in high burnup UO₂ LWR fuels, J. of Nucl. Mat. 189 (1992)*
- [Microsoft, 2010] *Microsoft Visual Studio 2010, 12.0.3471.2010, Copyright (C) 2002-2011 Intel Corporation*
- [NEA-1510] NEA-1510 *IFPE/HBEP-3 REV.1, High Burnup Effects Programme. Final Report.*
- [NEA-1696] NEA-1696, IFPE/REGATE L10.3
- [NEA-1622/04] NEA-1622/04, IFPE/OSIRIS.
- [NEA-1502] NEA-1502, IFPE/RISOE-II, (1995).
- [NEA-1729] NEA-1729, IFPE/IFA-507-TF3-TF5 (2004)
- [NEA-1546] NEA-1546, IFPE/IFA-429 (1997)
- [NEA-1488] NEA-1488, IFPE/IFA-432 (1996)
- [NEA-1547] NEA-1547, IFPE/IFA-562.1 (1997)
- [PARAVIEW] www.paraview.org
- [Sah, 2008] D.N.Sah, U.K.Viswanathan, C.S.Viswanadham, K.Unnikrishnan, B.N.Rath, *Blind prediction exercise on modeling of PHWR fuel at extended burn up. J. Nucl. Mater. 383 (2008)*
- [Soba 2005] A. Soba. *Comparación entre modelos de conductancia térmica de contacto UO₂-Zircaloy, Actas del congreso MECON 2005, (2005).*
- [Soba, 2006] A.Soba, A.Denis, *Simulation with PLACA/DPLACA of monolithic and dispersed fuel plates, IM-RERTR, Cape Town, South Africa, (2006).*
- [Soba, 2007] A. Soba, A. Denis, *An interdiffusional model for prediction of the interaction layer growth in the system Uranium-Molybdenum / Aluminium. Journal of Nuclear Materials 360 (2007).*
- [Soba, 2007] Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en operación, Alejandro Soba. Tesis de doctorado, FCEyN, UBA, (2007)
- [Soba, 2008] A. Soba and A.Denis, *Simulation with Dionisio 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods. J. of Nucl. Mater. 374 (2008).*
- [Soba, 2008] A. Soba, A. Denis, *Model of fracture for the Zry cladding of nuclear fuel rods included in the code DIONISIO*
- [Soba, 2008] A. Soba, A. Denis, *Model of fracture for the Zry cladding of nuclear fuel rods included in the code DIONISIO 1.0 Nuc included in the code DIONISIO 1.0, Nucl. Eng. And Design Nuclear Engineering and Design 238 (2008).*
- [Soba, 2009] 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. Rev Int. Mét. Num. Cál. Dis. Ing. vol 25, 1 (2009).*
- [Soba, 2013] A Soba, A. Denis, L. Romero, E. Villarino, F. Sardella. *A high burn up model developed for the DIONISIO code, J. of Nucl. Mat. 433 (2013).*
- [Talia, 1997] J.E. Talia, F. Povolo. *Tensile properties of Zircaloy-4, J. Nucl. Mater. 67, 198-206 (1997).*
- [Turnbull, 1998] J A Turnbull, *Database for CONTACT experiments irradiated at CEA Grenoble, IFPE/CONTACT Rev.1. (1998)*