Mecánica Computacional Vol XXXIII, págs. 1339-1351 (artículo completo) Graciela Bertolino, Mariano Cantero, Mario Storti y Federico Teruel (Eds.) San Carlos de Bariloche, 23-26 Setiembre 2014

# SIMULACIÓN 3D Y VALIDACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE PASTILLAS COMBUSTIBLES NUCLEARES DE UO<sub>2</sub> EN CONDICIONES OPERATIVAS

Armando C. Marino<sup>a,b</sup>, Gustavo L. Demarco<sup>b,c</sup> y Lucas Furlano<sup>a</sup>

<sup>a</sup>División Simulación de Materiales y Combustibles (SiM³), Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear (GCCN), Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA) Av. Bustillo Km. 9,5 (R8402AGP) Bariloche, Argentina, marino@cab.cnea.gov.ar

<sup>b</sup>Instituto Balseiro (IB), Universidad Nacional de Cuyo (UNCuyo), Bariloche, Argentina

<sup>c</sup>División GECAM, Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Villa María, Córdoba, Argentina

**Keywords:** Nuclear Fuels, Fuel Rods, UO<sub>2</sub>, BaCo.

Resumen. BaCo, un código quasi 2D que utiliza el método de diferencias finitas, acoplado al paquete de software agrupado bajo la denominación de "MeCom tools", basados en el método de elementos finitos, constituyen un completo sistema para el análisis 3D de un combustible nuclear bajo irradiación. Calculamos el estado tensión-deformación de una pastilla de UO<sub>2</sub> en cada paso de tiempo que define el código BaCo. Obtenemos las tensiones, deformaciones y perfiles radiales de una barra combustible y la forma de una pastilla de UO<sub>2</sub> fisurada. Definimos un patrón "ad hoc" de fisuras y un conjunto de condiciones de borde basados en datos experimentales y cálculos de BaCo, a partir de los cuales obtenemos un buen acuerdo entre los experimentos de irradiación y los cálculos. Particularmente se destaca el perfil radial luego de irradiación.

**Abstract**. The coupling of BaCo, a quasi 2D code based on a finite differences scheme, and the 3D MeCom tools, based on the method of finite elements, constitutes a complete system for 3D analysis of a nuclear fuel under irradiation. We calculate the 3D stress-strain state and the deformations of the UO<sub>2</sub> pellet at each time step of the BaCo code calculation. We find the stresses and the radial profiles of a fuel rod and the shape of the cracked pellet under irradiation. We define an "ad hoc" 3D pattern of cracks based on BaCo calculation and experimental data. By using an appropriate set of boundary conditions, based on BaCo calculations and data, and that pattern we find a good agreement between experiments of irradiation and calculations, particularly for the pellet radial profile after irradiation.

#### 1 INTRODUCTION

La geometría de una barra combustible nuclear con pastillas de UO<sub>2</sub> es un compromiso entra la intención de maximizar el contenido de UO<sub>2</sub> y minimizar la temperatura de operación, las deformaciones y las tensiones entre otros. Los efectos de comportamiento bajo irradiación son un complejo proceso en que numerosos aspectos termomecánicos y químicos están fuertemente acoplados. El código BaCo es utilizado para la simulación del comportamiento de una barra combustible bajo irradiación. Actualmente, complementamos el análisis con el paquete de software que denominamos MeCom, un conjunto de programas desarrollados "ad hoc" con el cual mejoramos la performance de BaCo. El acople de BaCo, un código quasi-2D basado en el método de diferencias finitas, y las herramientas 3D "MeCom", basadas en el método de elementos finitos, constituyen un sistema completo para el análisis 3D del estado de tensión-deformación de un combustible nuclear bajo irradiación.

# 2 EL CÓDIGO BACO

La estructura del código BaCo y sus modelos han sido descriptos en la referencia (Marino 1996a). Actualmente el número de instrucciones es superior a 12000 sentencias en FORTRAN 90. El post procesamiento de datos con herramientas personalizadas y el acople con el software "ad hoc" en 3D mejora notablemente el análisis de los resultados. Las últimas versiones del código fueron desarrolladas en la División DAEE (CAB, CNEA). Hemos participado en varios programas internacionales de evaluación de resultados entre códigos y experimentos de irradiación (Chantoine 1998; Killeen et al. 2006). Actualmente estamos comenzando con la preparación de un nuevo CRP ("Co-ordinated Research Project") del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) denominado CRP FUMAC ("Fuel Modelling in Accident Conditions").

Modelos para la deformación elástica, expansión térmica, "creep", "swelling", densificación, re-estructurado, figurado, y liberación de gases de fisión, entre los principales, son incluidos para las pastillas de UO<sub>2</sub>. Mientras que, para la vaina de Zry, el código incluye modelos para deformación elástica, expansión térmica, deformación plástica anisotrópica, "creep" y crecimiento bajo irradiación. La estructura modular de BaCo fácilmente nos permite incluir nuevos modelos, o variantes de ellos. Asimismo, puede ser usado para cualquier dimensión geométrica de una barra combustible cilíndrica con pastillas de UO<sub>2</sub> (o MOX), pudiendo ser sólidas o con un agujero central, con o sin "dishing" y con vainas de Zry.

Una característica destacable del código BaCo es la inclusión de un completo tratamiento del combustible con o sin contacto mecánico entre las superficies de la pastilla y de la vaina en cualquier etapa de la irradiación. Podemos simular vainas combustibles autoportantes (como en las barras combustibles LWR y en Atucha I y II (Marino y Florido 2006) o vainas colapsables (como las barras combustibles CANDU, Embalse y CARA) (Marino 1997), sin cambios particulares para cada caso ni modelos físicos especiales iniciados por "flags" de los datos de entrada. BaCo mantiene excelente compatibilidad para PWR (Chantoine 1998), BWR (Chantoine 1998), WWER (Killeen et al. 2006), MOX (Marino et al 1996b) como así también para combustibles experimentales (Chantoine 1998).

La historia de potencia de la barra combustible y la temperatura y presión del refrigerante deben ser provistas al código. La performance es simulada numéricamente usando pasos de tiempo finitos (mediante diferencias finitas). BaCo automáticamente selecciona los pasos de tiempo de acuerdo con criterios físicos. Los principales resultados que obtenemos, para cada segmento axial, son: perfiles radiales de temperatura de pastilla y vaina, tensiones principales

en pastilla y vaina, fisuras radiales y axiales, deformaciones principales y cambios en geometría de pastilla y vaina, cambio de porosidad, liberación de gases de fisión, distribución radial de gases de fisión atrapados en borde de grano y en la matriz de UO<sub>2</sub>, presión interna de gases y volumen libre en la BC ("Barra Combustible"), composición de gases libres en la BC, evolución del "dishing". El detalle del tratamiento mecánico y térmico y las ecuaciones constitutivas están disponibles en la referencia (Marino 1996a).

#### 3 MECOM "TOOLS"

Los cálculos complementarios con el software del método de elementos finitos (FEM) en 3D los realizamos con un conjunto de programas desarrollados en la División Mecánica Computacional (MeCom) del Centro Atómico Bariloche (CAB, CNEA). Básicamente, ellos están agrupados en dos paquetes de software denominados "acdp95" (Oliveira et al 1997) y "gpfep99" (Buscaglia et al 1999), cuyos principales autores amablemente los han puesto a nuestra disposición. La personalización del software se efectúa en la División SiM³ de la GCCN del CAB-CNEA.

El paquete "acdp95" incluye las herramientas de generación y optimización (Zavatieri et al 1996) una completa colección de programas de visualización. De ellas podemos obtener mallas estructuradas de elementos tetragonales para geometrías 3D arbitrarias. También están disponibles las herramientas de visualización de las mallas y de las soluciones del FEM sobre esas mallas (escalar y vectorialmente).

El paquete "gpfep99" es un "FEM solver" (o sistema para resolver ecuaciones diferenciales a derivadas parciales con el método de elementos finitos). De hecho, es un sistema para generar "FEM solvers". Se distribuye el programa fuente (escrito en lenguaje FORTRAN 77) dependiendo del usuario la escritura de un bloque de instrucciones en una subrutina donde se implementan los modelos físicos bajo estudio. En nuestro caso, escribimos no más de 300 sentencias de código (~100 para el problema elástico, ~100 para el cálculo de tensiones y ~100 para el calculo de las tensiones equivalentes de von Mises). "gpfep99" puede manejar problemas dependientes del tiempo y problemas no lineales, implementando varios tipos de elementos (no sólo tetraedros lineales). Asimismo, existe una versión paralelizable (Buscaglia et al 1999). La solución obtenida con "gpfep99" puede ser visualizada con las herramientas "acdp95".

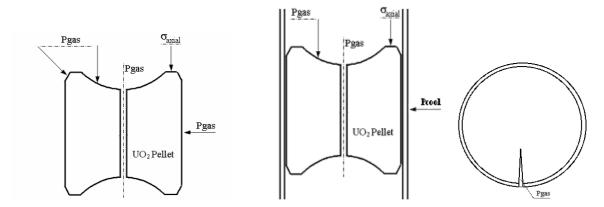


Figure 1: Condiciones de borde para una pastilla combustible sin contacto con la vaina -izquierda-, con contacto entre pastilla y vaina -centro- y dentro de una fisura de la pastilla. **Pgas** es la presión de los gases en el interior de la barra combustible, **Pcool** es la presión del refrigerante en el recipiente de presión y  $\sigma_{axial}$  es la tensión axial entre pastillas. En la superficie interna de la fisura la condición de borde es **Pgas**. La simulación puede incluir varias fisuras de este tipo.

#### 4 BACO + MECOM

El código BaCo incluye fenómenos dependientes del tiempo tales como, entre otros, el "creep" y la apertura, cierre y sellado de fisuras bajo irradiación de la pastilla combustible. El "creep" del UO<sub>2</sub> y la dinámica de fisuras son la vía principal en BaCo para relajar tensiones en la pastilla. "MeCom" incluye las mismas leyes de elasticidad y expansión térmica que BaCo.

La primera aproximación al problema se obtiene utilizando al código BaCo. El tratamiento es quasi-bidimensional en esta etapa pero utilizando todo el arsenal de modelos y opciones de BaCo (Marino 1996a). Aquí estamos generando los datos de entrada para las herramientas "MeCom", en particular la geometría de las pastillas y las condiciones de borde para un particular paso de tiempo de nuestro interés. La geometría de la pastilla, calculada con BaCo, incluye la evolución del "dishing" (Marino 2004) y "hombro", las deformaciones radiales y axiales y el patrón de fisuras. Las condiciones de borde son: 1) la presión de los gases libres en la BC, calculada con BaCo (para el agujero central, superficie interna de las fisuras y "dishing" de la pastilla, además para la superficie lateral de la pastilla si no hay contacto pastilla-vaina), 2) la presión del refrigerante, que es un dato, (para la superficie lateral de la pastilla cilíndrica si hay contacto pastilla-vaina) y, 3) la tensión axial pastilla-pastilla (para el "hombro" de la pastilla) (ver Figura 1). El perfil radial de temperatura es un dato de entrada.

El resultado es la nueva geometría 3D de la pastilla combustible, ahora "deformada", y los mapas 3D del estado de tensión-deformación. Actualmente en el "FEM solver" estamos incluyendo elasticidad y expansión térmica. El principal medio para relajar tensiones es la presencia de fisuras "ad hoc" siguiendo un patrón realista con fuerte soporte experimental. Sin el patrón de fisuras incorporado en la geometría de la pastilla el estado tensión-deformación es una condición extrema de comportamiento, es decir, una condición mas conservativa. Sin embargo, la inclusión de fisuras en la geometría de la pastilla produce un resultado más realista que resulta en un incremento de la altura de los "ridges".

El código BaCo corre bajo el sistema operativo MS Windows usando los compiladores Digital FORTRAN y/o Lahey FORTRAN. El paquete de software MeCom corre bajo LINUX. Con este conjunto de códigos obtenemos las tensiones, los perfiles radiales y la geometría, entre otros resultados, de una pastilla fisurada bajo irradiación. Fácilmente se obtiene el efecto bambú y otros efectos 3D observables, como por ejemplo la presencia de un "ridge" secundario en la zona media de la pastilla. Como ejemplos del uso de BaCo + MECOM, también podemos mencionar: a) la reducción de la deformación en pastillas agujereadas, b) la ausencia de "ridges" cuando utilizamos pastillas cónicas, c) el incremento de los "ridges" cuando está presente un "dishing", d) la reducción de los "ridges" debido a los "chamfers" en las pastillas, y e) la correcta tendencia de la deformación radial cuando variamos la relación l/d (altura / diámetro de la pastilla). Típicamente calculamos una altura de "ridge" de ~10 µm en un buen acuerdo con los combustibles PWR. Geometrías de pastillas comerciales, innovativas o inusuales pueden ser analizadas con este paquete de software. Los cálculos muestran un muy buen acuerdo con los resultados experimentales comparamos el perfil radial particularmente cuando remanente luego irradiación (Marino 2004; Marino et al 2005a; Marino et al 2005b).

# 5 PRIMERA APROXIMACIÓN A LA SIMULACIÓN 3D

Los primeros resultados de estas herramientas computacionales fueron presentados en las referencias Marino 2004; Marino et al 2005a; Marino et al 2005b y Marino & Demarco 2006 donde estudiamos el comportamiento de pastillas combustibles CANDU, MOX y prototipos

experimentales, más la aplicación directa de estas herramientas en diseño de combustibles nucleares. Previo a la evaluación 3D, es necesario presentar ejercicios de validación de combustibles similares. En este caso utilizaremos los casos correspondientes a combustibles WWER del CRP FUMEX II del IAEA (Killeen 2006). Asimismo incluiremos datos del Halden Reactor Project para la validación de los resultados 3D. Es interesante destacar que una de las principales características de los WWER es la presencia de un agujero central en las pastillas combustibles. El siguiente ejercicio ilustrará sobre la gran precisión de los valores calculados con BaCo + MeCom.

### 5.1 Validación Experimental de BaCo para Combustibles tipo WWER

La tabla 1 resume la actual performance de BaCo comparando con datos experimentales y resultados del código TRANSURANUS en su versión específica para WWER utilizando casos del CRP FUMEX II (Killeen 2006).

Encontramos un excelente acuerdo entre los tres grupos de datos para los cálculos del quemado, liberación de gases de fisión y presión interna de la BC. Un buen acuerdo es hallado en los cambios dimensionales de diámetro y longitud de la BC. Podemos suponer razonablemente que el conjunto de modelos, leyes físicas y parámetros incluidos en BaCo que utilizamos para definir las condiciones de borde que alimentarán el cálculo 3D constituyen una excelente aproximación.

	Caso 9 (BC 7)			Caso 10 (BC 52)			Caso 11 (BC 86)			Caso 12 (BC 120)		
	Exp.	BaCo	TRANS	Exp.	BaCo	TRANS	Exp.	BaCo	TRANS	Exp.	BaCo	TRANS
Burnup a EOL [MWd/kgU]		54,2	53.43	46,2	47,6	46.86	44,4	45,8	45.2	50,4	50,4	49.7
Máximo burnup [MWd/kgU]	64 X	61,2	60.0	54,0	53,3	52.23	52,1	51,0	50.3	57,8	56,3	55.23
FGR [%]	3,71	2,97	3.71	0,99	2,33	0.87	0,69	2,07	0.72	2,26	2,39	1.25
Presión [MPa]	1,40	1,07	1.03	1,01	1,00	0.87	0,95	0,96	0.84	1,10	1,05	0.94
<b>ΔR</b> [μm]	(40~43)	56,7	40.3	80,0	60,5	53.4	60,0	61,4	55.2	50,0	58,7	49.7
ΔL [mm]	~12	30,1	12.83	~12	25,6	12.24	~12	24,3	12.01	~12	32,7	12.43

Tabla 1: Casos 9 a 12 del CRP FUMEX II de combustibles WWER-440. Comparación entre datos experimentales, resultados de BaCo y de TRANSURANUS-WWR.

# 5.2 Análisis 3D de Pastillas con un Agujero Central

Ésta simulación tiene en cuenta las condiciones de borde enunciadas en la sección 4 y el perfil de temperatura, junto con otros resultados de BaCo, durante una paso de tiempo a una potencia lineal máxima durante la irradiación de un combustible WWER. La figura 2 muestra la malla para el cálculo del FEM y la tensión equivalente de von Mises desde 3 puntos de vista diferentes. La figura 3 muestra la deformación radial de la pastilla desde puntos de vista equivalentes a la figura anterior y el perfil radial de deformación de la superficie lateral de la pastilla. Como se verá más adelante (figura 8) este perfil de deformación se compara con otra pastilla equivalente pero sin agujero central. Se observa que la sola presencia del agujero central es suficiente para reducir las deformaciones radiales y la altura de los "ridges". La suposición de una translación directa del perfil de la pastilla a la vaina cuando hay PCI ("Pellet-Cladding Interaction", Interacción —o contacto— Pastilla-Vaina) es razonable especialmente si tenemos en cuenta el período de máxima potencia. Las deformaciones plásticas en la vaina mantendrán ese perfil observable luego de finalizada la irradiación.

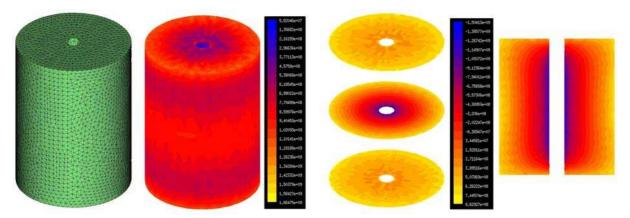


Figura 2: Malla de elementos finitos 3D; tensión equivalente de von Mises y tensiones tangenciales (a tres diferentes alturas de la pastilla y en un corte longitudinal) para una pastilla combustible agujereada.

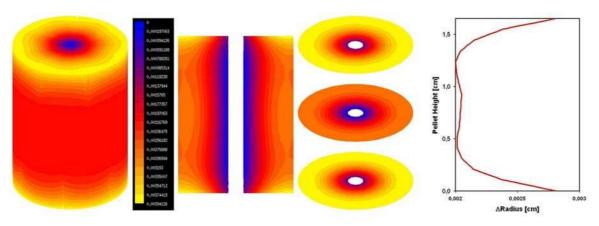


Figura 3: Deformaciones radiales de una pastilla agujereada desde tres puntos de vista complementarios y el perfil radial de deformación.

# 5.3 Validación experimental con Datos de Halden (HRP)

La figura 4 nos muestra el perfil radial de dos barras combustibles experimentales irradiadas en el reactor de Halden, Noruega (Ichikawa et al. 1985). Esas barras incluyen un grupo de pastillas agujereadas en uno de los extremos. Esto se debe a que en su interior se coloca una termocupla para mediciones de temperatura on-line. Dicha figura incluye el perfil de potencia de las barras combustibles. Se observa que la potencia lineal es algo superior en la zona de las termocuplas. Sin embargo, las perfilometrías indican que, en esa zona, las deformaciones radiales resultaron menores y la altura de los "ridges" también resulta menor que en la zona donde se encuentran las pastillas sólidas. Esta observación experimental está totalmente de acuerdo con los cálculos efectuados con BaCo + MeCom.

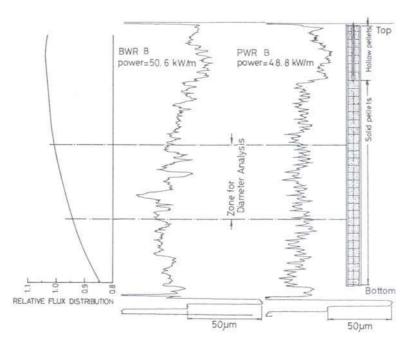
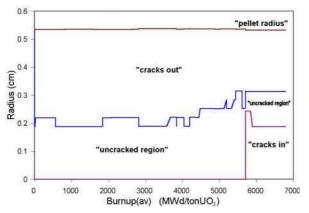


Figura 4: Perfilometría de una BC experimental del Halden Reactor. En la parte superior de la BC se encuentran las pastillas agujereadas con las termocuplas. (HRP-305/8, Ichikawa et al 1985).

# 6 MODELADO DE FISURAS CON BACO + MECOM

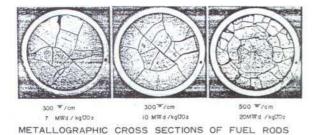
En BaCo, se permite que la pastilla se fisure radial y axialmente. Fisuras circunferenciales no son permitidas para mantener la continuidad de la pastilla por lo que no son tenidas en cuenta en el cálculo mecánico. Sin embargo, la influencia de este tipo de fisuras en la temperatura y la conductividad térmica es tenida en cuenta en el modelo de relocalización de fragmentos de pastilla (o modelo de "relocation"). El criterio adoptado para la apertura de fisuras está dado por la tensión de fractura,  $\sigma_{fr}$ , del material (Matthews 1974). Cuando se alcanza una tensión superior a  $\sigma_{fr}$  la fisura se abre. Definimos fisuras axiales o radiales según el sentido de las tensiones que la abren. Fisuras radiales corresponden a tensiones tangenciales ("hoop stress") y fisuras axiales fueron abiertas por tensiones axiales. En la pastilla combustible se considera simetría axial y sin dependencia entre la coordenada axial y la radial para cada segmento axial en que se divide la BC. Además, podemos considerar a la fisura como distribuida uniformemente en la dirección radial o axial (Marino 2004). Con esta aproximación, BaCo puede determinar la profundidad de las fisuras abiertas desde la superficie de la pastilla y de las fisuras abiertas desde el centro. Mediante este modelo determinamos la profundidad de fisura que utilizaremos en la geometría 3D de pastilla para MeCom. La figura 5 es un ejemplo de la profundidad de la evolución de las fisuras para una pastilla de un combustible Atucha I (Marino y Florido 2006).



Munder of Cocks is Pells is a Pel

Fig. 5: Profundidad de apertura de fisuras abiertas desde la superficie de la pastilla ("cracks-out") y fisuras abiertas desde el centro ("cracks-in").

Fig. 6: Número de fisuras en una pastilla en función del quemado y de la potencia lineal [15].



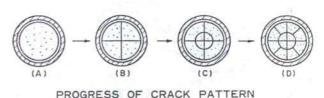


Figura 7: Patrón experimental de fisuras a diferentes valores de potencia y progresión empírica del patrón de fisuras según experimentos del HRP (HPR-229/23, Ichikawa 1985).

Experimentalmente se definió el número máximo de fisuras que están presentes en un combustibles mientras es irradiado (ver la figura 6 en referencia Shimada et al. 1979), como así también el patrón común de fisuras. Este patrón y el número de fisuras son el resultado de la liberación de tensiones por medio de la fractura en las pastillas UO<sub>2</sub> (Shimada et al. 1979). En las referencias Marino et al. 2005a y Marino et al. 2005b se muestra que la presencia de una fisura simple en la tapa superior de la pastilla reduce las tensiones en la superficie de la pastilla, concentra tensiones en el vértice de la fisura e incrementa la altura del "ridge", con una importante mejora en la calidad y precisión de nuestros cálculos en comparación con los resultados experimentales. La figura 8 muestra la perfilometría de la pastilla calculada con una sola fisura y sin ella. La figura 6 incluye el número de fisuras presentes en una pastilla combustible como función de la potencia lineal y del quemado (Shimada et al. 1979). Vemos una saturación de fisuras cuando las tensiones relajaron. La figura 7 muestra la progresión de las fisuras en una pastilla en tres etapas diferentes de irradiación y la progresión determinada empíricamente de patrones de fisuras asociados a esas etapas de irradiación. Estas ceramografías y patrones fueron determinados a partir de las irradiaciones efectuadas en el HRP (Shimada et al. 1979). Estas fisuras radiales son la base de nuestros patrones 3D de fisuras.

Actualmente trabajamos en la definición de mallas para cálculo 3D con el FEM incluyendo fisuras radiales para inducir la reducción o liberación de tensiones en las pastillas combustibles. La figura 8 muestra una selección de mallas 3D que utilizamos para analizar la influencia de las fisuras en la pastilla de UO<sub>2</sub>. La primera de ellas, maciza, es la que tomamos como referencia. Cuando incluimos un dishing en la tapa superior y otro en la inferior del cilindro se observa un aumento en la altura de los "ridges" pero, simultáneamente se reduce la

interacción axial entre pastillas. Se observa claramente la reducción de las deformaciones radiales y de los "ridges" cuando se trata de una pastilla agujereada. La inclusión de una fisura simple produce un incremento en la altura del "ridge" cercana a la fisura. La pastilla con una fisura longitudinal indica una mayor deformación a lo largo de la superficie lateral de la pastilla cercana a la fisura, de aspecto similar a una traslación del perfil del cilindro simple de UO<sub>2</sub>. La última pastilla introduce 7 fisuras equidistantes en la tapa superior de la pastilla y otras 7 en la inferior rotadas medio ángulo entre fisuras. Esta última se presenta, cuantitativa y cualitativamente, como la más realista.

Comenzamos con una pastilla sin fisuras, continuamos incluyendo una fisura y vamos incrementando en uno el número de fisuras para determinar con que cantidad de fisuras obtenemos una "hoop stress" (o tensión tangencial) por debajo de  $\sigma_{fr}$  (tensión de fractura del  $UO_2$ ). La figura 9 incluye la curva con la máxima "hoop stress" calculada utilizando un número predeterminado de fisuras entre 0 y 7. Hallamos que 6 es el número de fisuras radiales suficiente para reducir la "hoop stress" por debajo del valor de la  $\sigma_{fr}$ .

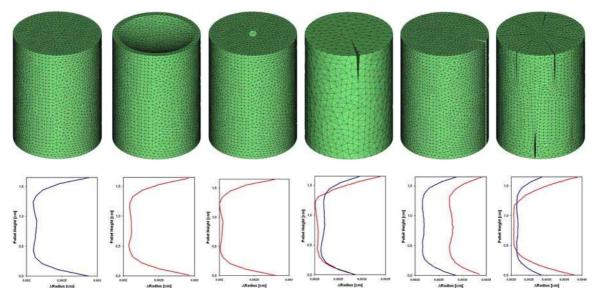


Figura 8: Mallas para FEM para distintas geometrías de pastillas y tres tipos de fisuras básicas. La curva roja corresponde al perfil radial de deformación de cada pastilla y la curva azul corresponde a la pastilla de referencia (cilíndrica sin mayores modificaciones).

La figura 10 muestra algunos detalles del cálculo efectuado con una pastilla de 7 fisuras (7 arriba y 7 abajo giradas). Los mapas 3D de deformaciones y tensiones y el perfil lateral son más realistas. La liberación de tensiones que produce la presencia de este patrón de fisuras "ad hoc" está representado en la tensión equivalente de von Mises y la "hoop stress" de la figura 10. La influencia de las fisuras es determinante en el tercio superior y el tercio inferior de la pastilla. Vemos que las tensiones en esas regiones donde las fisuras están presentes el máximo valor de la tensión resulta inferior al  $\sigma_{fr}$  del UO<sub>2</sub>. El mapa de deformaciones radiales obtenido está incluido en la figura 10. La altura de un "ridge" es mayor que el valor correspondiente al cilindro simple de UO<sub>2</sub> donde no está presente ninguna geometría o mecanismo que ayude a liberar tensiones (Marino et al. 2005a). Podemos definir como muy buena la premisa inicial de los patrones de fisuras "ad hoc".

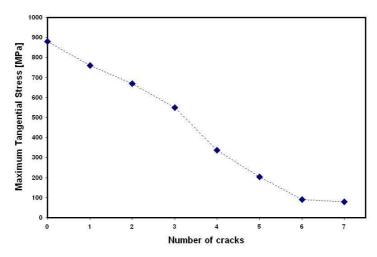


Fig. 9: Máxima tensión tangencial en una pastilla vs. El número de fisuras radiales en la pastilla.

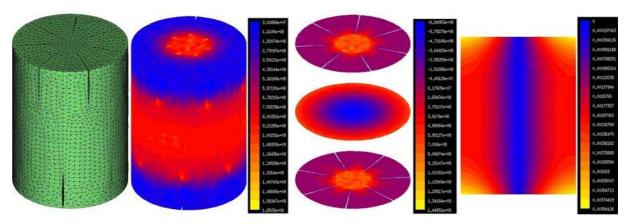


Fig. 10: Malla para el FEM, tensión equivalente de von Mises, tensiones tangenciales ("hoop stress") a tres alturas y deformación radial de una pastilla combustible fisurada.

# 7 APROXIMACIÓN 3D DE UNA BARRA COMBUSTIBLE NUCLEAR

La principal suposición es la traslación directa de la superficie de la pastilla a la vaina de la BC. Esta suposición es válida en su totalidad en el caso de las vainas CANDU, donde el PCI se da debido a la colapsabilidad de la barra y la baja presión de los gases de relleno. En el caso de los PWR, esta condición de PCI se presenta a alta potencia o con alto hinchado de pastilla ("swelling"). La primera aproximación que tomaremos en cuenta para lograr incluir el tratamiento de la vaina en el análisis 3D es considerar que el mismo sigue la deformación de la pastilla cuando se alcanza la condición de PCI. Se incluyen las mismas ecuaciones de elasticidad y comportamiento térmico que se utilizan en el BaCo. Modelamos una pila de pastillas (al presente entre 3 y 5) y la vaina. Las condiciones de borde son provistas por BaCo (véase Figura 1). El primer cálculo pertenece a BaCo, el segundo corresponde solo a las pastillas empleando las herramientas "MeCom" y el último es el cálculo 3D del comportamiento de la vaina como lo mencionamos anteriormente.

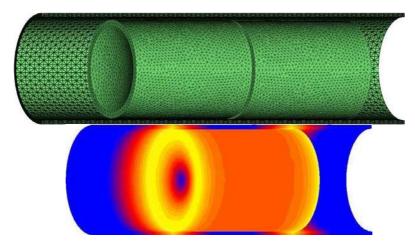


Fig. 11: Detalle de las mallas para la vaina y la columna de pastillas (en el presente se emplean entre 3 y 5 para el cálculo). A la derecha se muestra un detalle de deformaciones radiales calculadas para la interacción de una pastilla y la vaina de la BC.

La figura 11 muestra las mallas usadas para la simulación del comportamiento de las pastillas y la vaina y su deformación radial 3D. Se observa una buena solución para la deformación radial donde los ridges aparecen en la parte superior e inferior de la pastilla y concuerdan tanto cualitativamente como cuantitativamente con los resultados experimentales.

#### **8 CONCLUSIONES**

Presentamos BaCo + MeCom, un conjunto completo de herramientas computaciones ~2D/3D para la simulación del comportamiento de barras combustibles bajo irradiación. Enfatizamos el rol de estas herramientas para mejorar y valorizar el diseño de combustibles nucleares y la evaluación de experimentos.

En una primera aproximación, sólo incluimos elasticidad y todo el conjunto de modelos de BaCo (Marino et al. 2005a). Ilustramos esa etapa de desarrollo con el análisis de las pastillas agujereadas tipo WWER y su influencia en la reducción de las deformaciones radiales, del efecto "bambú" y de la interacción pastilla-vaina (PCMI y PCI). Asimismo incluimos exigentes ejercicios de validación de nuestras herramientas. Concretamente utilizamos datos del CRP FUMEX II del IAEA y comparamos con la versión WWER del código TRANSURANUS del ITU ("Institute of Transuranides" de la CEE) como así también evidencia experimental del Halden Reactor Project particularmente para el análisis 3D. Es de destacar que estas herramientas "ad hoc" permiten variadas formas geométricas de pastillas combustibles como las incluidas en las referencias (Marino et al. 2005a) y (Marino et al. 2005b).

En todos los casos presentamos ejercicios de validación de los cálculos por comparación con experimentos y con resultados de otros códigos con la intención de demostrar la validez y el estado avanzado del arte de nuestro software como así también la solidez de los resultados.

Hemos seguido con la búsqueda de un camino sencillo pero efectivo para liberar tensiones en la pastilla, intentando que las tensiones estén por debajo de la  $\sigma_{fr}$  UO<sub>2</sub>. El patrón empírico de fisuras se basa en los experimentos de irradiación de Halden. Se estableció cómo una fisura es el camino realista para liberar tensiones a través de la observación de cómo las tensiones están relajadas en las cercanías de una fisura en un cilindro de UO<sub>2</sub>. La influencia de las fisuras fue establecida como un mecanismo que incrementa la altura de los "ridges" a la vez que libera tensiones, siendo este el primer camino para definir un patrón de fisuras basando su profundidad en los cálculos de BaCo.

El resultado es una aproximación más realista al problema 3D de obtener el mapa de tensión-deformación que mejore fuertemente aspectos del diseño de combustibles nucleares. Ésta aproximación puede ser definida como muy buena. Mejoramos el patrón de fisuras utilizando la progresión empírica que mostramos en la figura 7. Aquí puede verse que, la prosecución de este modelo puede llevar al desmembramiento de la pastilla en varios pedazos. A partir de ahí podemos perder continuidad, encontrar problemas de convergencia y, todo puede depender fuertemente de la definición y dimensionamiento de parámetros tales como los coeficientes de fricción entre fragmentos de pastilla como ocurre en muchos trabajos de la literatura. La aproximación presentada refleja un claro camino de manejo del problema a través de herramientas propias donde se tiene en claro el rango de aplicabilidad y validez tendiente a brindar un mejoramiento sustantivo en el diseño de elementos combustibles al estilo de nuestro trabajo con el combustible CARA donde BaCo + MeCom tienen un papel relevante.

#### **AGRADECIMIENTOS**

Al Halden Reactor Project quienes muy amablemente nos permitieron utilizar su información experimental en este trabajo sin ningún tipo de restricciones.

Al Dr. E. Dari y a la División MeCom del CAB quienes amablemente nos facilitaron el acceso al conjunto de programas por ellos elaborados.

#### REFERENCIAS

- Buscaglia G. et. al., "Un programa general de elementos finitos en paralelo", 6<sup>to</sup> Congreso Argentino de Mecánica Computacional, MECOM'99, Mendoza, Argentina, Sep. 1999.
- Chantoine P., "Fuel modelling at extended burnup", Report of the Co-ordinated Research Programme on Fuel Modelling at Extended Burnup FUMEX, 1993-1996, IAEA, IAEA-TECDOC-998, 1998.
- De Oliveira M. et. al., "An Object Oriented Tool for Automatic Surface Mesh Generation using the Advancing Front Technique", Latin American Applied Research 27 pp.39-49 (1997).
- Ichikawa M. et al., "Preliminary results from power ramping experiments by LWR Rigs", Enlarged Halden Programme Group Meeting, Løen, Norway, 1985, HRP-305/8.
- Killeen J., Inozemtsev V. & Turnbull A., "Fuel Modelling at Extended Burnup:IAEA Coordinated Research Project FUMEX-II", Top-Fuel 2006, 22 al 26 de Octubre de 2006, Salamanca, España.
- Marino A.C., Savino E.J. and Harriague S., "BaCo (BArra COmbustible) Code Version 2.20: a thermo-mechanical description of a nuclear fuel rod", J.Nuc.Mat. Vol. 229, April II, 1996a.
- Marino A.C., Pérez E.E. y Adelfang P., "Irradiation of Argentine MOX fuels. Post-irradiation results and experimental analysis with the BACO code", J.Nuc.Mat. Vol. 229, April II, 1996b.
- Marino A. C. and Savino E. J., "Sensitivity analysis applied to nuclear fuel performance related to fabrication parameters and experiments", 14<sup>th</sup> International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology, August 17-22, 1997, Lyon, France.
- Marino A.C., "Computer simulation of the behaviour and performance of a CANDU fuel rod", 5<sup>th</sup> International Conference on CANDU fuel, 1997, September 21-24, Canada.
- Marino A.C., "Crack and dishing evolution models and PCI-SCC considerations for fuel pellets in a quasi-bidimensional environment", "Les Journées de Cadarache 2004: International Seminar on Pellet-Clad Internation in Water Reactor Fuels (PCI-2004)", 9 to

- 11 of March 2004, Aix, France.
- Marino A.C., Demarco G.L. y Florido P.C., "An Approach to the 3D Modelling of the UO<sub>2</sub> Pellets Behaviour Under Irradiation Conditions", IAEA TM on Fuel Behaviour Modelling Under Normal, Transient and Accident Conditions, and High Burnups, 5-8 September 2005a, Kendal, UK.
- Marino A.C., Demarco G.L. y Florido P.C., "3D Assessments for Design and Performance Analysis of UO<sub>2</sub> Pellets", 9<sup>th</sup> International Conference on CANDU Fuel "Fuelling a Clean Future", 2005b September 17-21, Ramada Inn on the Bay, Belleville, Canada.
- Marino A.C. y Florido P.C., "High Power Ramping in Commercial PHWR Fuel at Extended Burnup", Nuclear Engineering & Design 236(2006) 1371-1383.
- Marino A.C., Brasnarof D.O., Demarco G.L., Florido P.C., Rivarola M., Kyung K.H., Troiani H.E. y Lallana F., "CRP FUMEX II del OIEA: Validación de BaCo a Altos Quemados", XXXIII Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear (AATN XXXII), 20 al 23 de Noviembre de 2006, Buenos Aires, Argentina.
- Marino A.C. y Demarco G.L., "3D Assessments of the Cracked UO<sub>2</sub> Pellets Behaviour", Top-Fuel 2006, 22 al 26 de Octubre de 2006, Salamanca, España.
- Matthews J. R., "Mechanical properties and diffusion data for carbide and oxide fuels. Ceramic data contribution", Atomic Energy Research Establishment, Harwell, UKEA, AERE-M 2643 (1974).
- Shimada S. et al., "Analysis of fuel relocation using in-pile data from IFA-211 and IFA-410", Enlarged Halden Programme Group Meeting, Hankø, Norway, 1979, HRP-229/23.
- Zavattieri P., Buscaglia G., y Dari E., "Finite element mesh optimisation in three dimensions", Latin American Applied Research, 26 pp. 233-236 (1996).