Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXIV, págs. 1737-1751 (artículo completo) Sebastián Giusti, Martín Pucheta y Mario Storti (Eds.) Córdoba, 8-11 Noviembre 2016

AVANCES ALCANZADOS EN EL MODELO DE LIBERACION DE GASES DE FISION EN EL CODIGO DIONISIO: COMPORTAMIENTO EN RAMPAS DE POTENCIA

Martín E. González^a, Alejandro Soba^{a,b} y Alicia Denis^a

^aSección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, CAC, CNEA, Av. Gral. Paz 1499, (1605) Buenos Aires, Argentina. <u>http://www.cnea.gov.ar</u>

^bCONICET. Godoy Cruz 2390, CABA, Argentina, http://www.csc-conicet.gob.ar

Palabras clave: Liberación de gases de fisión, rampas de potencia, barra combustible, DIONISIO, LOCA.

Resumen. Como consecuencia de la operación de un reactor nuclear se generan diversos productos de fisión, entre los cuales se cuentan los elementos gaseosos Xe y Kr que, por ser prácticamente insolubles en el material combustible, precipitan formando burbujas que se localizan tanto en el interior como en el borde de grano. Después de alcanzar la saturación, los gases de fisión son liberados, mediante coalescencia de burbujas intergranulares desde la pastilla de UO_2 hacia el volumen libre de la barra combustible. Cuando la potencia del reactor presenta rampas, ya sea por razones de operación o a causa de algún desperfecto, el gas tiende a ser liberado abruptamente, alterando rápidamente el comportamiento termomecánico del combustible. Esto provoca cambios en la transferencia de calor desde el material hacia el refrigerante, incrementando por ende la temperatura y presión interna de la vaina, lo que puede resultar en una falla y liberación de productos de fisión hacia el refrigerante. Por esta razón, el estudio y modelado del comportamiento de los gases de fisión es clave para lograr predecir los límites dentro de los cuales un reactor puede operar de manera segura.

Para analizar la producción y distribución de gases, se resuelve la ecuación de difusión en un grano de UO_2 , suponiéndolo esférico. Se emplea el método de elementos finitos, realizando una discretización unidimensional en la dirección radial. Cada pastilla y su segmento correspondiente de vaina se analiza mediante elementos finitos con simetría cilíndrica. La barra combustible se divide en sectores axiales, de manera que cada pastilla analizada es representativa de un determinado sector de la misma, con sus condiciones locales de potencia lineal y temperatura de refrigeración. La respuesta del modelo depende de parámetros de entrada como la potencia linear de operación y las características geométricas y de composición del combustible. Se muestran resultados obtenidos a partir de historias de potencia reales, en base a los experimentos internacionales FUMEX-II y III.

1 LIBERACIÓN DE GASES DE FISIÓN EN ESTADO ESTACIONARIO: MODELO BASE DE DIONISIO

Por cada evento de fisión nuclear en un combustible de óxido de uranio se generan diversos productos, entre los cuales se cuentan los elementos gaseosos Xe y Kr, prácticamente insolubles en la matriz del material físil (Olander, 1976) por lo que precipitan formando burbujas que se localizan en el interior y en el borde de grano. Después de alcanzar un valor de concentración a la que se denomina de *saturación*, dichos gases son liberados hacia el volumen libre de la barra combustible. Los gases de fisión afectan de diferentes modos el comportamiento del combustible. En particular reducen la transferencia de calor desde la pastilla hacia el refrigerante, con el consecuente aumento de temperatura en la pastilla. Por otro lado provocan un aumento de presión interna en la barra combustible, lo que puede llevar a una eventual falla de la vaina y escape de productos de fisión al refrigerante. Por esta razón, el estudio y modelado del comportamiento de los gases de fisión es muy importante desde el punto de vista de la seguridad en la operación de un reactor nuclear.

El código DIONISIO incluye un modelo base de generación y liberación de gases de fisión que contempla dicho fenómeno cuando el reactor opera en estado estacionario. Este modelo representa al material combustible como un conjunto de granos esféricos (Olander 1976, Booth 1957, Speight 1969) y analiza en ellos la difusión de átomos individuales de gases nobles producidos por fisión. Por un lado, las burbujas intragranulares, que se nuclean en sitios preferenciales de la red, actúan como trampas, que captan otros átomos de gas y, por otro, son redisueltas por impacto de los fragmentos de fisión de alta energía. Como resultado, se establece un equilibrio dinámico entre estos mecanismos opuestos. La acumulación de gas en las burbujas intergranulares, su saturación y ulterior interconexión constituye el mecanismo dominante de liberación de átomos de gas (Lösönen, 2002). Otros mecanismos, como el *recoil* o retroceso, y el *knock-out*, contribuyen en menos del 1% a la liberación de gases.

El modelado del transporte de gases mediante la teoría de difusión da lugar a ecuaciones diferenciales no lineales, cuya resolución analítica sólo puede lograrse a partir de aproximaciones drásticas (Maldován 1999, Denis 1996). Para obtener una solución más realista es necesario recurrir a métodos numéricos que permiten obtener resultados con muy alta precisión en un rango más amplio de condiciones. En este trabajo se utiliza el método elementos finitos para resolver la ecuación de difusión, introduciendo un *coeficiente de difusión efectivo*, D, que tiene en cuenta la captura y reliberación de los átomos de gas en las trampas de la matriz del combustible.

La ecuación diferencial que rige la difusión de átomos de gas individuales en un grano de UO_2 bajo irradiación es, considerando simetría esférica

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{r_g^2} \frac{\partial}{\partial r_g} \left[r_g^2 D \frac{\partial c}{\partial r_g} \right] + \beta$$
(1)

Simultáneamente con la ecuación de balance de átomos en trampas

$$\frac{\partial m}{\partial t} = gc - bm \tag{2}$$

donde *c* es la concentración total de átomos de gas (libres y atrapados) en la matriz (at/m³), *t* el tiempo de irradiación (s), r_g la coordenada radial en el grano esférico (m) y β la tasa de generación de átomos de gas (at/m³s), que está dada por el producto entre la tasa de fisiones en el material (*F*) y la fracción de átomos de gas producidos por cada evento de fisión. Por su parte, *g* y *b* son las probabilidades de captura y liberación de átomos libres de gas en la matriz (at/s), mientras que *D* (m/s²) es el coeficiente de difusión de átomos libres de gas en la matriz de UO₂. Suponiendo que las condiciones de atrapamiento son estacionarias, se tiene que *gc*-*bm*=0 y definiendo la concentración total de gas en el grano $\psi=c+m$ y el coeficiente de difusión efectivo D'=Db/(b+g), se obtiene la ecuación equivalente

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = D' \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \beta$$
(3)

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

El coeficiente de difusión D (cm²/s) está dado por Turnbull et. al. (Turnbull, 1987). En este modelo se considera que el coeficiente *efectivo*, D, expresa las contribuciones de distintos mecanismos, cuyo peso relativo cambia según el rango de temperatura. En el de las altas temperaturas, superiores a ~1400 °C, se supone que la difusión se debe a un mecanismo de vacancias térmicamente activadas. Para esta contribución se adoptó la expresión de Arrhenius (Lösönen 2002, Maldován 1999, Denis 1996)

$$D_{I} = 7.6 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{-70000}{RT}\right)$$
(4)

donde $R = 1.987 \ cal \ mol^{-1} \ K^{-1} \ y \ T$ es la temperatura en K. En el rango intermedio de temperaturas se considera que las vacancias e intersticiales creados por la irradiación cumplen el rol dominante. Para esta segunda componente se propone la expresión (Lösönen 2002, Maldován 1999, Denis 1996)

$$D_2 = s^2 j_V V \tag{5}$$

donde V es la fracción de sitios de vacancias, j_V la frecuencia de salto de las mismas y s la distancia de salto de los átomos. Por último, en el rango de temperaturas inferiores a ~600 °C, el modelo supone que los mecanismos atérmicos de *recoil* y *knock-out* son los dominantes. Para esta contribución se propone (Lösönen 2002, Maldován 1999, Denis 1996)

$$D_3 = 8 \times 10^{-40} F \tag{6}$$

Finalmente, la expresión adoptada para el coeficiente de difusión efectivo en el rango completo de temperaturas de interés es

$$D = D_1 + D_2 + D_3 \tag{7}$$

El tamaño y concentración de las burbujas, y los parámetros de atrapamiento g y b están detallados en White et. al. (White, 1983). La expresión que describe la tasa de producción de gas, $\beta(r)$ es

$$\beta = \begin{cases} yF & \text{para } 0 \le r \le a - 2\lambda \\ yF + h(r) & \text{para } a - 2\lambda < r \le a \end{cases}$$
(8)

donde λ representa la distancia de penetración de los átomos redisueltos en el grano. Se adoptó el valor $\lambda = 2x10^{-8} m$ para los cálculos. La cantidad total de gas en el casquete esférico de espesor 2λ es proporcional a la fracción de ocupación del borde de grano N (at/m²). La función h(r) tiene la forma

$$\int_{a-2\lambda}^{a} h(r) 4\pi r^2 dr = 4\pi a^2 b_p \frac{N}{2}$$
(9)

Una elección adecuada para h(r) es la función de Gauss. Por simplicidad, se usó una aproximación triangular (Maldován, 1999). La constante de proporcionalidad b_p (1/s) representa la tasa de redisolución de las burbujas intergranulares y es uno de los parámetros del modelo.

La concentración de saturación en borde de grano, N_S , es calculada suponiendo que el gas en burbujas intergranulares obedece la ley de los gases ideales. Asimismo, se supone que la presión del gas, el esfuerzo externo y la tensión superficial están en equilibrio, mientras que la interconexión entre burbujas se produce cuando una fracción f_S del borde de grano está cubierta por las mismas (White, 1983). Usualmente se le asigna el valor $f_S=0.5$ (Denis 1996, Ito 1985).

El contenido de gas por unidad de área de borde de grano se calcula en cada paso temporal a partir de una ecuación de balance. Para hacerlo, se integra la función de distribución de gas ψ (at/m³), que es la solución de la ecuación diferencial (1), para todo el grano de radio *a*, y se determina el número de átomos de gas en el grano, *C*.

Antes de alcanzar la saturación, el gas contenido en el volumen de un grano, en el instante t_{k-1} , está dado por

$$C_{k-1} = 4\pi \int_{0}^{a_{k-1}} r^2 \psi_{k-1} dr, \qquad (10)$$

mientras que el gas en borde de grano al tiempo t_{k-1} es

$$4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2},\tag{11}$$

La cantidad de gas generada en la reacción de fisión en el intervalo de tiempo Δt_k es

$$\frac{4}{3}\pi a_k^3 y F_k \Delta t_k, \qquad (12)$$

Por otra parte, se considera la cantidad de gas que ingresa al grano debido al barrido por crecimiento de grano, cuya expresión es

$$\left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2}\right) \left(\frac{a_k^3 - a_{k-1}^3}{a_{k-1}^3}\right)$$
(13)

La misma debe igualarse a la cantidad C_k de gas contenida en el volumen del grano al tiempo t_k , de manera de obtener la ecuación de balance siguiente

$$\left(C_{k-1} + 4\pi a_{k-1}^2 \frac{N_{k-1}}{2}\right) \left(\frac{a_k^3}{a_{k-1}^3}\right) + \frac{4}{3}\pi a_k^3 y F_k \Delta t_k = C_k + 4\pi a_k^2 \frac{N_k}{2}$$
(14)

donde, aplicando las condiciones iniciales (t=0, k=0) $C_0=0$ y $N_0=0$ se obtiene el valor de N_k para cada paso de tiempo t_k . Antes de la saturación, N_k representa el contenido de gas en el borde de grano. Una vez alcanzada la saturación, la cantidad de gas en borde de grano se vuelve $N_k=N_S$. La posterior generación de átomos de gas en el grano resultará entonces en un nuevo incremento de N_k , superando así al valor de saturación e iniciando la liberación de gas, cuya cantidad será la diferencia ($N_k - N_S$) multiplicada por el área total del borde de grano. La cantidad de gas liberado está dada entonces por la expresión

$$R_{k} = max \left(\frac{4\pi a_{k}^{2}}{2}(N_{k} - N_{S}), R_{k-1}\right)$$
(15)

Este planteo evita que la cantidad calculada de gas liberado disminuya ante un decremento en la temperatura.



Figura 1. a) Modelo base de FGR implementado en DIONISIO para diferentes temperaturas. b) y c) Comparación entre un ajuste a datos experimentales (Zimmermann) y el modelo base de DIONISIO



Figura 1. b) Comparación entre una curva ajustada a datos experimentales (línea punteada, Zimmermann) y el modelo base de DIONISIO para irradiación a 1750 K.



Figura 1. c) Comparación entre una curva ajustada a datos experimentales (línea punteada, Zimmermann) y el modelo base de DIONISIO para irradiación a 2000 K.

En los gráficos presentados en la Figura 1 se comparan los resultados obtenidos con el modelo base de DIONSIO con un ajuste realizado por Zimmermann (Zimmermann, 1978) en base a datos experimentales, para diferentes temperaturas de irradiación. Se utilizaron historias de potencia constante como entrada para reproducir las condiciones de temperatura de los casos analizados. Las ejecuciones fueron realizadas utilizando parámetros de entrada típicos para este tipo de problema, algunos de los cuales se exponen en la siguiente tabla:

	10.0 × 10 ⁻⁶
Radio de grnao de OO_2 (m)	10.0×10^{-10}
Tasa de redisolución desde burbujas intergranulares (s ⁻¹)	1.55×10^{-5}
Espesor de la capa de redisolución (m)	1.0×10^{-8}
Radio medio de burbujas intergranulares (m)	0.5×10^{-6}
Factor de forma de burbujas	0.287
Tensión superficial de burbujas (J/m ²)	0.626
Fracción de borde de grano cubierto por burbujas en saturación	0.5
Cantidad de átomos de gas liberados en cada evento de fisión	0.3017
Volumen atómico (m ³)	4.09×10^{-29}
Atrapamiento en intersticiales (m ⁻²)	1.0×10^{15}
Tasa de daño (defectos/fisión)	2.44×10

Tabla 1. Parámetros de entrada típicos para el modelo de gases en combustibles de UO₂

2 LIBERACIÓN DE GASES EN RAMPAS DE POTENCIA

En el caso de presentarse cambios bruscos en la potencia del reactor, denominados *transitorios rápidos* o *rampas de potencia*, el comportamiento del material cambia (Hering, 1982), provocando una variación notable en la cantidad de gases de fisión liberados durante el transitorio y transcurrido un breve tiempo de la finalización del mismo. Los modelos actualmente aceptados suponen que los aumentos bruscos de potencia (transitorios positivos) dan lugar a la formación de microfracturas en el material, las cuales incrementan la separación entre bordes de grano, facilitando así la rápida liberación de los gases de fisión que allí se encuentran. Por otra parte, si la potencia disminuye bruscamente (transitorio negativo), disminuye también la concentración de átomos necesaria para alcanzar la saturación en borde de grano, lo cual provoca un repentino aumento en la fracción de gases liberados.

El modelo de liberación de gas en rampas, seleccionado a partir de la información disponible en la literatura consultada (Hering 1982, Koo 2000), fue adecuado mediante algunas modificaciones en las condiciones de rampa. En general, tanto en estado estacionario como en transitorio, la tasa de liberación de gas $\partial f/\partial t$ es proporcional a la concentración de gas en bordes de grano, g, de la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}f(t) = Kg(t) \tag{16}$$

donde el factor *K* representa la dependencia con tres parámetros importantes: temperatura, quemado y porosidad abierta. Estos parámetros ya son tenidos en cuenta en el modelo actual, mediante las subrutinas correspondientes. Para considerar los efectos de rampas de potencia, se debe incluir una modificación en el valor de la tasa de liberación $\partial f/\partial t$, que tiene la forma

$$\Delta\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right) = A_B(\Delta B)A_q(\Delta q')g(t)$$
(17)

en la cual A_B es un parámetro que depende del incremento ΔB en el quemado durante el transitorio y A_q depende de la variación $\Delta q'$ en la densidad lineal de potencia. La expresión de A_q es la siguiente

$$A_{q}(\Delta q') = 0.05 \sqrt{\frac{\Delta q' - \Delta q'_{\text{lim}}}{100}} + 0.12 \left(\frac{\Delta q' - \Delta q'_{\text{lim}}}{100}\right)^{2}$$
(18)

mientras que A_B está dada por

$$A_{B}(\Delta B) = \begin{cases} 1 & si \quad \Delta B \ge 5 \ MWd / kgU \\ \frac{\Delta B}{5} & si \quad \Delta B < 5 \ MWd / kgU \end{cases}$$
(19)

La cantidad de gas liberado durante el transitorio representa una fracción del gas presente en bordes de grano, adicional a la que se produciría en estado estacionario. Para que esta liberación adicional sea considerada por el código, deben especificarse las condiciones que activan a la correspondiente subrutina. Hay dos criterios para fijar dicha condición:

1) el pico de potencia debe ser mayor a 250 W/cm, mientras que el incremento de potencia debe ser, como mínimo, de 50 W/cm.

2) La tasa mínima de variación de potencia requerida para que un cambio de potencia sea clasificado como una rampa es, de acuerdo a experimentos existentes en la literatura (RISO2-GEA, en el marco del programa FUMEX-III), del orden de los 1000 W/cm.día, que equivalen aproximadamente a 1.157 W/m.s (13).

En las ejecuciones realizadas se adoptó la condición (2), esto es, si la tasa de cambio de potencia es mayor que el valor umbral mencionado, se activa la componente de gas adicional, para simular la liberación repentina de gas que se espera en un transitorio rápido. Esto permite independizarse de cotas en la potencia instantánea, ya que si un reactor opera a baja potencia lineal (< 50 W/cm) y sufre un incremento repentino hasta 100 W/cm, es de esperarse que haya liberación de gas adicional: aunque las potencias en juego no sean altas, si el tiempo de irradiación previo a la rampa es suficientemente prolongado se habrá acumulado suficiente gas como para alcanzar la saturación, siendo liberado rápidamente en caso de una rampa de potencia suficientemente abrupta. Todas las variables involucradas en el problema fueron introducidas en el módulo de prueba que se describe en la Sección 2, desarrollado para testear el comportamiento del modelo antes de su inclusión en el código DIONISIO (Soba 2007, Soba 2008).

2.1 Redisolución

Dos fenómenos que están ligados a la liberación de gases de fisión son la *redisolución* de átomos de gas desde el borde de grano hacia el interior de la capa más externa del mismo, como también la *densificación* del UO_2 a causa de la irradiación del combustible.

El efecto de la *redisolución* de gases en el grano es el de disminuir la cantidad neta de gas liberado al final del período de irradiación. Si llamamos β_{int} a la tasa de generación de átomos de gas por unidad de volumen en la región interna del grano (sin redisolución) y β_{res} a la que corresponde a la capa exterior del mismo, la tasa efectiva de generación β se modela sumando ambas componentes, de forma que se tiene la expresión

$$\beta = \beta_{int} + \beta_{res} \tag{20}$$

El parámetro principal que rige al fenómeno de redisolución es la tasa de ingreso al grano de átomos de gas acumulado en burbujas intragranulares, denominado b_p . Así, cuanto mayor es b_p , menor será la cantidad de gas liberado luego de la irradiación. Debe notarse que, a causa de la dependencia de este parámetro con la tasa de fisión, un valor alto de la misma puede aumentar considerablemente el valor de b_p . Si esto ocurriese, entonces a mayor tasa de fisión, mayor sería la tasa de captura de átomos de gas en burbujas, lo que llevaría a una menor liberación neta de gas. Esto va en contra de lo observado en los experimentos expuestos en la literatura. Para resolver este problema, se incorporó al modelo de redisolución ya existente un factor que decae de forma exponencial con b_p . Así, la componente debido a la redisolución adquiere la forma

$$\beta_{res} = \frac{c_{sup} b_p}{d_{elem}} \exp\left(-\frac{b_p}{b_{caract}}\right)$$
(21)

donde c_{sup} es la concentración de gas en borde de grano, d_{elem} es el espesor de la capa externa del grano de UO₂ mallado mediante elementos finitos y b_{caract} es un factor de peso sobre b_p . Esta corrección permitió optimizar el porcentaje de gas liberado, obteniendo resultados en excelente acuerdo con datos experimentales publicados (RISO 2, 2008).

3 MÓDULO DE GASES EN RAMPAS.

Las subrutinas involucradas en el módulo de rampas resuelven las ecuaciones presentadas en las Secciones precedentes, 1, 2.1 y 2.2, y son utilizadas secuencialmente por el cuerpo principal del programa de gases de fisión, como se indica en forma esquemática en la *Figura* 2. Las nuevas subrutinas incluidas, cuyos bloques principales implican el cumplimiento o no de la condición de rampa y la componente adicional de gas liberado durante la misma, están representadas mediante los bloques en línea punteada. El resto representa el conjunto de subrutinas involucradas en el modelo general de liberación de gases de fisión.



Figura 2. Estructura del modelo general de liberación de gases y las subrutinas adicionales para el cálculo de gas en rampas

4 RESULTADOS

4.1 Pruebas con historias de potencia ideales

La respuesta del modelo fue analizada ante historias de potencia ideales, de larga duración, que presentan rampas de potencia. Los resultados mostraron un notable incremento en los valores calculados de gas liberado, en comparación con la respuesta obtenida utilizando únicamente el modelo base incluido en DIONISIO, el cual no presenta una sensibilidad adecuada a la presencia de rampas.



Figure 3. Comparación entre las respuestas obtenidas con el modelo de rampas activado (líneas punteadas) y desactivado (líneas continuas)

La Figura 3 muestra la comparación entre las curvas de gas liberado obtenidas para una serie de ejecuciones con una historia de potencia simplificada, la cual consistió en todos los casos de un período inicial de 500 días a una potencia lineal constante de 300 W/cm, luego de la que se introduce un incremento abrupto que alcanza valores de entre 400 y 600 W/cm. Algunas de las ejecuciones fueron realizadas manteniendo fija la magnitud de la rampa, pero variando su tasa de cambio, simulando así rampas de mayor o menor rapidez. Esto tuvo un efecto que se aprecia en los valores finales de gas liberado, como se esperaba. Cada combinación de ejecuciones fue realizada dos veces, a fin de comparar los resultados obtenidos con ambos modelos, activando y desactivando la subrutina de rampas de potencia respectivamente. Las líneas continuas representan las ejecuciones realizadas con el modelo original (base), mientras que las líneas punteadas muestran los resultados obtenidos con el modelo de rampas activado, correspondientes a una velocidad de rampa específica de acuerdo con el símbolo que las acompaña. Dichos símbolos indican la magnitud y velocidad del transitorio representado, cuyos detalles se exponen en la Tabla 2. Como resultado de estas ejecuciones, se puede observar la respuesta del código a diferentes magnitudes y velocidades de transitorio, dando así una idea más clara del efecto que tienen las rampas en el comportamiento del combustible.

Simbolo	Potencia inicial (W/cm)	Potencia final (W/cm)	Transitorio Δt (min)	Tasa (W/cm.min)
	300	500	144	0.1389
-0-	300	400	144	0.0694
-4-	300	450	144	0.1042
- >-	300	450	14.4	1.0417
-▼	300	600	144	0.2083
-☆	300	500	14.4	1.3889
-⊳	300	600	14.4	2.0833

 Tabla 2. Magnitudes y velocidades de las rampas de potencia simuladas en las diferentes ejecuciones del código.

En la Figura 4 se presentan resultados realizados con una historia de potencia ideal que incluye seis transitorios, separados por períodos de potencia lineal constante y diferente duración. Esta historia de potencia fue ejecutada para probar el modelo, introduciendo sucesivamente variaciones sutiles en las velocidades de determinados transitorios. Esto se hace evidente debido a los incrementos repentinos en los valores de gas liberado que se observan en la figura, cuando el transitorio correspondiente cumple con la condición de rampa, activándose así el modelo.



Figura 4. Respuesta del modelo de liberación de gases ante una historia de potencia simplificada, con diferentes velocidades de transitorios.

Se introdujeron algunas variaciones en las velocidades del 4to y 6to transitorio, a fin de evaluar la activación del modelo de acuerdo al cumplimiento o no de la condición de rampa. En la figura 4, la curva de guiones corresponde a una ejecución en la que todos los transitorios eran suficientemente rápidos como para cumplir la condición de rampa, activando así el modelo, mientras que la curva de puntos corresponde al modelo desactivado y es la que menor valor de gas liberado predice. Las otras dos curvas corresponden a ejecuciones con el modelo activado, pero con velocidades de rampa diferentes, tal que se active el modelo únicamente en el 4to o 6to transitorio respectivamente, resultando en una mayor liberación de gas en cada una de esas rampas.

Después del período inicial de irradiación, durante el cual se produce la incubación de gas en el grano, la rampa número 1 provoca un aumento repentino de gas liberado, incrementándolo un 10% con respecto al modelo de rampas (curva de guiones). En el mismo caso, pero con el modelo desactivado, se observa que el aumento es de tan sólo un 1% (curva de puntos); tendiendo a mantenerse en valores bajos de liberación a lo largo de toda la historia de potencia. La velocidad de la rampa 1 es de 1.39 W/cm/min, la cual cumple con la condición de superar la velocidad umbral definida, que es de 1.00 W/cm/min. La siguiente liberación brusca ocurre en la rampa 4, ya que más gas logró acumularse en el borde de grano, alcanzando nuevamente la concentración de saturación y permitiendo así un aumento repentino de un 15% en el valor de gas liberado. Esta cantidad disminuye luego de la rampa, debido a la generación de un 10% adicional, para alcanzar un pico máximo de 45% de gas liberado.

4.2 Comparación de ambos modelos de gases con datos experimentales de los experimentos FUMEX

Finalmente se examinó el modelo ejecutando historias de potencia correspondientes a una serie de experimentos realizados en el marco de los programas FUMEX, avalado por el OIEA. En la Figura 5 se muestran los valores de gas liberado obtenidos con ambas subrutinas, tanto la correspondiente al modelo base de DIONISIO como aquella que incluye el modelo de rampas, indicadas por triángulos rellenos y rombos huecos respectivamente. El modelo de rampas mejora los resultados expuestos en el trabajo de Denis y Soba (Denis 2015), que presenta resultados de liberación de gases obtenidos con la versión anterior de DIONISIO. La mejora más notable se observa en la región de mayor porcentaje de liberación de gases, a partir de un 20% aproximadamente, donde la liberación es mayor. Tanto el modelo de rampas como la modificación hecha en el modelo de redisolución de gas en borde de grano contribuyeron a esta mejora en el grado de aproximación del código.



Figura 5. Comparación entre valores calculados y experimentales del porcentaje de gas liberado

5 CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos con el nuevo modelo representan una mejor aproximación y brindan flexibilidad al código DIONISIO, dado que permiten analizar un espectro más amplio de problemas, dando una respuesta más confiable ante historias de potencia que presenten rampas. Esto significa que se puede simular una mayor cantidad de situaciones, como por ejemplo bajas de potencia repentinas o excursiones de potencia, que inciden notablemente en la liberación de gases de fisión y en las condiciones de seguridad del material combustible. De hecho, en estas circunstancias, los datos experimentales muestran marcados aumentos en la

cantidad de gas liberado durante rampas de potencia. Por otra parte, las modificaciones incorporadas al modelo de redisolución permitieron optimizar el balance de gas en el grano de UO_2 , reflejándose así en una mejora integral en la capacidad de respuesta del modelo.

REFERENCIAS

- Olander, D., *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*, Technical Information Center, Energy Research and Development Administration (1976)
- Booth, A., A method of calculating fission gas diffusion from UO₂ fuel, Report Atomic Energy of Canada Limited, CRDC-721, 1957
- Speight, M., A calculation of the migration of fission gas in material exhibiting precipitation and resolution of gas atoms under irradiation, Nucl. Sci. & Eng., 37 (1969) 180
- Lösönen, P., Modelling intragranular fission gas release in irradiation of sintered LWR UO₂ fuel, J. Nucl. Mater. 304 (2002) 29
- Maldován, M., Denis, A., Piotrkowski, R., Simulation of isothermal fission gas release. An analytical solution, J. Nucl. Mater. 187 (1999) 327
- Denis, A., Piotrkowski, R., Simulation of isothermal fission gas release, J. Nucl. Mater. 229 (1996) 149
- Turnbull, J., White, R., Wise, C., *The diffusion coefficient for fission gas atoms in UO*₂, IAEA TECDOC-659/3.5 (1987) 174-181
- Ito, K., Iwasaki, R., Iwano, Y., Finite element model for analysis of fission gas release from UO₂ fuel, J. Nucl. Sci & Tech, 22(2) (1985) 129
- White, R., Tucker, M., A new fission gas release model, J. Nucl. Mater. 118 (1983) 1
- Zimmermann, H., Investigations on swelling and fission gas behaviour in Uranium dioxide, J. Nucl. Mater, 75 (1978) 154-161
- Dowling, D., *The effect of irradiation induced re-solution on fission gas release*, J. Nucl. Mater. 110 (1982) 37
- Elton, P., Coleman, P., MacInnes, D., *A mechanism for fission gas release from high temperature fuel*, J. Nucl. Mater 135 (1985) 63
- Hering, W., The KWU fission gas release model for LWR fuel rods, J. Nucl. Mater. 114 (1983) 41
- Koo Yang-Hyun, Lee Byung-Ho, Sohn, Dong-Seong, Fission gas release and gaseous swelling in UO_2 fuel under the effect of external restraint, J. Nucl. Mater. 280 (2000) 86
- CASO RISO2-GEA, publicado en International Fuel Performance Experiments (IFPE) Database, Cases for FUMEX-III, FUMEX-III.V1 15-XII-2008.
- Turnbull, J., Tucker, M., *The release of fission gas from nuclear fuels during temperature transients*, J. Nucl. Mater. 50 (1974) 53
- Forsberg, K., Massih, A., Fission gas release under time varying conditions, J. Nucl. Mater. 127 (1985) 141
- MacInnes, D., Brearley, I., A model for the release of fission gas from reactor fuel undergoing transient heating, J. Nucl. Mater. 107 (1982) 123
- Iglesias, F., Lewis, B., Reid, P., Elder, P., Fission product release mechanisms during reactor accident conditions, J. Nucl. Mater. 270 (1999) 21
- Soba, A., Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en operación, Tesis de Doctorado en Ciencias Físicas, UBA, 2007
- Soba, A., Denis, A., Simulation with DIONISIO 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods, J. Nucl. Mater. 374 (2008) 32
- Harada, Y., Doi, S., Irradiation behavior of large grain UO₂ fuel rod by active powder, J. Nucl. Sci. & Tech. 35 (1998) 411