

SIMULACIÓN DE UNA BARRA COMBUSTIBLE NUCLEAR EN CONDICIONES DE ACCIDENTE MEDIANTE EL CÓDIGO DIONISIO 2.0

Martín Lemes^a, Alejandro Soba^{a,b} y Alicia Denis^a

^a*Sección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, CAC, CNEA, Av. Gral. Paz 1499, Buenos Aires, Argentina. <http://www.cnea.gov.ar>*

^b*CSC-CONICET. Godoy Cruz 2390, CABA, Argentina, <http://www.csc-conicet.gob.ar>*

Palabras clave: Simulación, barra combustible nuclear, accidente LOCA, modelo termohidráulico.

Resumen. En los últimos años se ha incrementado el interés mundial en la predicción y evaluación de distintos escenarios de accidente en los reactores nucleares de potencia, En particular, los producidos por la pérdida parcial o total del refrigerante del núcleo del reactor (Loss Of Coolant Accident-LOCA) se encuentran entre los más severos. En estas condiciones, el sistema registra una caída de presión y/o una disminución marcada en la velocidad de circulación del refrigerante, por lo que el calor acumulado en las barras combustibles debe ser disipado en condiciones de refrigeración defectuosas. En este trabajo se ha desarrollado un modelo que permite analizar y cuantificar el comportamiento del fluido refrigerante para caracterizar la termo hidráulica del canal en función de la presión del sistema, la velocidad y el flujo del fluido. El modelo cuantifica, las fracciones de vapor y el flujo de calor crítico (CHF) en el caso de altos flujos de calor con desprendimiento de la ebullición nucleada (DNB) y en bajos flujos de calor en pared seca (DRYOUT) además de tener en cuenta otros factores que intervienen en la transferencia de calor vaina-refrigerante en las distintas posiciones de la barra como el crecimiento de la capa de óxido, tanto en condiciones normales de operación, como en condiciones de accidente por pérdida de refrigerante (LOCA). El modelo computacional ha sido incluido en DIONISIO, un código que simula el comportamiento de una barra combustible bajo irradiación en condiciones normales de funcionamiento en un reactor nuclear de potencia.

1 INTRODUCCION

En un reactor de potencia refrigerado por agua liviana o pesada, en condiciones normales de operación, el circuito primario y el correspondiente canal refrigerante asociado a cada barra opera en condiciones de presión y flujo de refrigerante, determinadas por la ingeniería del reactor, que aseguran caudales elevados de agua en rangos de temperatura de entre 200-300°C, destinadas a mantener una adecuada extracción del calor, además de asegurar la estabilidad mecánica del sistema. La presión del líquido refrigerante es elevada 70-150 bar, lo que asegura que el agua se mantenga en fase líquida.

Durante el funcionamiento normal a plena potencia de una planta nuclear las condiciones termo-mecánicas y termo-hidráulicas pueden ser descritas numéricamente mediante el uso de modelos estacionarios, considerando variaciones lentas en las condiciones de irradiación que generan una respuesta controlada de la potencia, lo que mantiene estables la distribución de temperaturas y el calor que el sistema entrega al refrigerante. Por el contrario, en condiciones de accidente, más precisamente durante un denominado LOCA que refiere al accidente caracterizado por pérdida parcial o total del refrigerante, las variaciones en el sistema resultan muy rápidas y los modelos necesarios para dar cuenta de las mismas son no estacionarios. En general, en accidentes de este tipo el sistema detecta una caída de presión en el líquido refrigerante, relacionada con una disminución de la velocidad en el circuito primario del reactor. Unos segundos después de detectado este malfuncionamiento, se produce la bajada de las barras de control dentro del núcleo, que interrumpe la fisión en cadena. El calor acumulado en las barras y el que sigue generándose por decaimiento radiactivo, no obstante, debe ser disipado en condiciones de refrigeración defectuosas hasta que el encendido del circuito auxiliar de refrigeración reactive la disipación del calor hasta lograr restablecer el equilibrio. Este transitorio puede durar entre 10 y 300 segundos dependiendo del tipo de reactor y su ingeniería e involucra diversas situaciones físicas que dependen de las condiciones del refrigerante (flujo en una sola fase, ya sea líquida o vapor, o en ambas fases). Si bien todo reactor cuenta con sistemas de emergencia que se activan ante un evento accidental de este tipo, una excursión hasta altas temperaturas puede causar daños estructurales severos, y en casos extremos, provocar la fusión del combustible y su dispersión.

Durante los últimos diez años, la Sección Códigos y Modelos de la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear del Centro Atómico Constituyentes, CNEA, viene desarrollando el código DIONISIO (Soba, 2007; Denis y Soba, 2003, Soba y Denis, 2008), para la simulación del comportamiento de una barra combustible de un reactor de potencia. Se trata de un código bidimensional que trabaja con elementos finitos y contiene más de 60 modelos interconectados (la mayor parte de los cuales fueron desarrollados por miembros del grupo). En un comienzo se abocó a las condiciones de operación normal pero luego incorporó la simulación de condiciones de quemado extendido (Lemes, M., Soba, A., Denis). El código ha participado en el experimento internacional FUMEX III (FUel Modelling EXperiment) organizado por el OIEA entre 2008 y 2011 (<http://www.iaea.org>). Actualmente el trabajo se orienta a incluir la simulación en condiciones de accidente severo y en este ámbito participa en el proyecto FUMAC (FUel Modelling in Accident Conditions) (<http://www.oecd-nea.org/science/fuel/ipelst.html>), patrocinado por la misma institución. Para este fin el código incorpora un nuevo módulo destinado a simular las condiciones termohidráulicas del refrigerante en accidentes tipo LOCA (Lemes, Soba y Denis, 2014), que constituyen las condiciones de contorno térmicas a las que opera la barra combustible.

Los numerosos fenómenos que se simulan mediante el código requieren de la formulación de diversos modelos altamente no lineales que, además de dar respuesta a cada reacción

particular, deben operar en forma interconectada. El módulo para reproducir condiciones de accidente dentro de DIONISIO, respeta su arquitectura, modo de ejecución y versatilidad, incluyendo diferentes condiciones termohidráulicas dentro de un canal de refrigeración, con los correspondientes patrones de flujo y regímenes de transferencia de calor entre la pared de la vaina y el refrigerante. El módulo contiene modelos de crecimiento de óxido a alta temperatura y de formación de nuevas fases en la vaina, además de cuantificar la deformación, el englobamiento (ballooning) y rotura de la misma (burst). En el esquema de la Figura 1. se muestra, en el recuadro de la izquierda, la estructura en bloques del código en su versión destinada a simular condiciones normales de operación. Se colorea en celeste a los modelos recientemente incorporados, mientras que en recuadro violeta se encuentran los modelos de hidruración, fractura y relocación, próximos a incorporar.

El objetivo de este trabajo es describir brevemente los modelos ya incorporados y que son considerados en el módulo dedicado a condiciones de accidentes, como así también mostrar algunos de los resultados obtenidos y su comparación con datos experimentales. El nuevo módulo ya está incluido en DIONISIO 2.0 y actualmente se encuentra en una etapa de validación, siendo sometido a distintos tipos de experimentos numéricos.

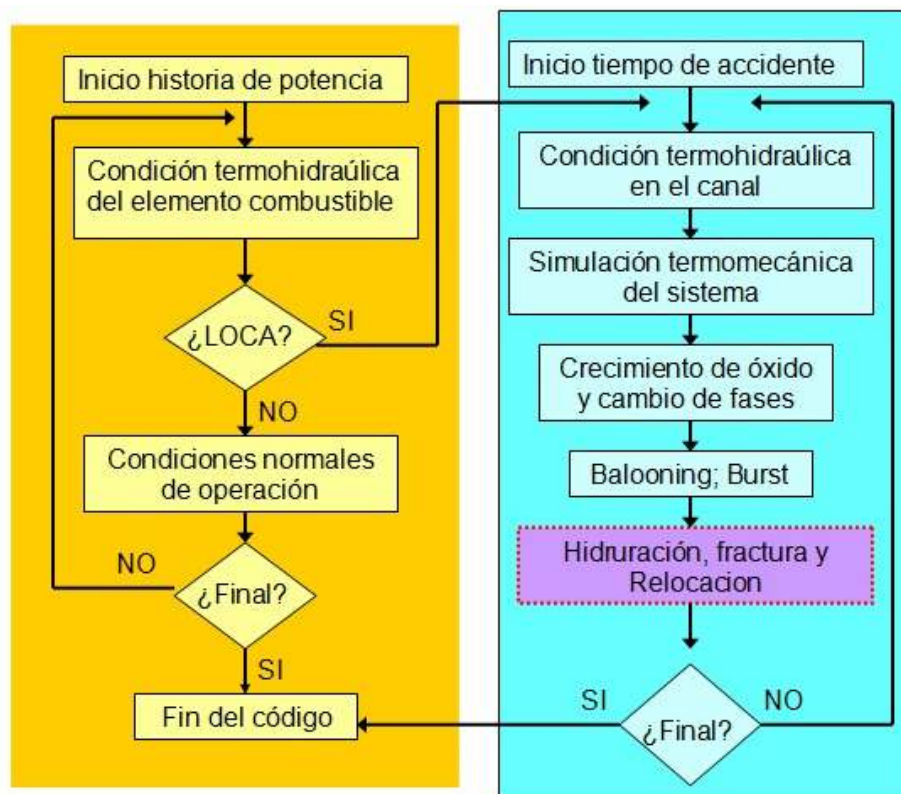


Figura 1: Esquema de incorporación de la nueva subrutina de accidente en DIONISIO 2.0, en recuadro celeste los modelos incorporados, en violeta modelos próximos a incluir

2 MODELOS DE ACCIDENTE

2.1 Distribución de temperatura

La generación y transferencia del calor en un sistema pastilla-gap-vaina-refrigerante están descritas por la ecuación del calor en coordenadas cilíndricas. Considera, como fuentes de calor, a las reacciones de fisión en la pastilla y a la oxidación de la vaina. Asimismo, una vez iniciado el accidente e interrumpida la reacción de fisión, considera como fuente al calor de decaimiento por reacciones beta y gamma. El modelo tiene en cuenta, además de las conductividades de los elementos que conforman el sistema, su densidad y su calor específico como funciones de la temperatura.

Al variar el flujo neutrónico a lo largo (del eje z) de la barra, se producen las variaciones axiales en la temperatura. DIONISIO particiona cada barra en un número de sectores a elección del usuario y en cada uno de ellos resuelve el conjunto de ecuaciones que describen la termomecánica y termoquímica con las condiciones locales, para calcular después de cada paso temporal el valor de los parámetros que corresponden a la barra entera. En la Figura 2 se observa la variación de temperatura en el refrigerante, sobre la cara externa de la capa de óxido, sobre la vaina y en el centro de la pastilla de UO_2 considerando un escenario de operación normal en una barra combustible.

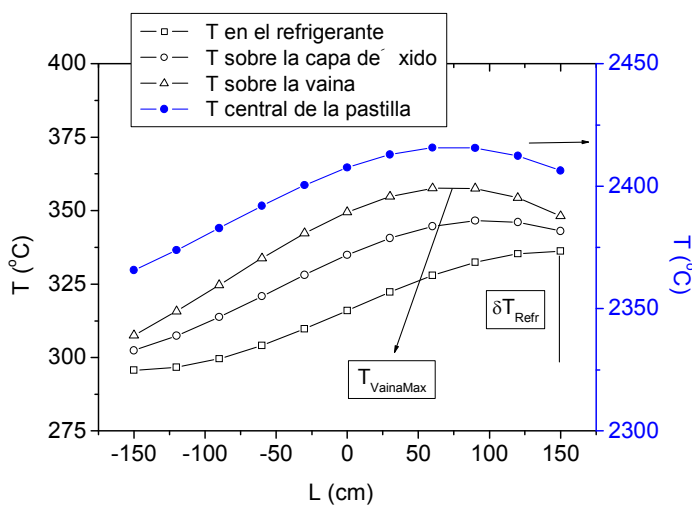


Figura 2: Distribución de temperatura en el canal, sobre la capa de óxido, sobre la vaina y en el centro de las pastillas

Para determinar la temperatura en situación de accidente se debe atender a la capacidad de extracción de calor del sistema, que depende de las condiciones termohidráulicas del refrigerante. Las correlaciones de transferencia de calor entre la vaina y el refrigerante son expresadas mediante el coeficiente convectivo. Este parámetro relaciona el flujo de calor de la superficie y la diferencia de temperatura entre la superficie de la vaina y el fluido. Para este modelo resulta crucial la determinación del flujo crítico, valor límite a partir del cual se modifican las condiciones en las que se produce la extracción del calor desde la barra combustible al refrigerante. Para las correlaciones de transferencia de calor se han utilizado modelos tomados de la literatura específica, desarrollados para cuantificar la tasa de intercambio de energía entre una superficie sólida y un fluido con velocidad sobre ella.

2.2 Condiciones termohidráulicas

2.2.1 Flujo crítico

En la superficie de una barra combustible de un reactor de potencia en contacto con el líquido refrigerante se produce la transferencia de calor desde el elemento caliente al líquido a menor temperatura. La velocidad del fluido así como la cantidad de calor a disipar desde la barra combustible son condiciones que deben tenerse en cuenta al momento del diseño de un reactor. Es necesario considerar que en la zona adyacente a la pared caliente, el líquido se encuentra sobrecalentado. Allí se nuclean burbujas de vapor que conforman una capa. Esa zona de coexistencia de burbujas y el agua a velocidad, que condiciona al proceso de transferencia, se denomina “partial nucleate boiling”. Pero si el flujo de calor se incrementa, las burbujas de vapor aumentan en densidad y se genera una zona extensa de nucleación de burbujas que afectará dicha transferencia. Esa zona dependerá de la presión, temperatura de trabajo del refrigerante, la potencia lineal del sistema, las condiciones del flujo (caudal y velocidad), etc. Para flujos de calor por encima de un cierto límite, las condiciones se alejan de las llamadas “nucleate boiling” (se suele denominar “Departure from nucleate boiling (DNB) condition”). Como consecuencia, el sistema disminuye su capacidad extractiva de calor, con lo cual la temperatura de la superficie aumenta rápidamente, situación que debe evitarse operativamente.

Para cada tipo de elemento combustible y circuito de enfriamiento, es posible predecir ese punto crítico “Critical Heat Flux” (CHF) dependiendo del flujo másico de agua, presión, temperatura, y potencia de trabajo. También depende de la geometría del elemento, básicamente del diámetro hidráulico de los elementos combustibles. Existen tablas que proporcionan un valor de flujo de calor crítico en el sistema dado y el “Departure from Nucleate Boiling Ratio” (DNBR) que indica la relación entre el flujo local de calor extraído y el flujo de calor crítico. Cuanto más alto sea el valor de DNBR en las mismas condiciones de estudio, mayor será el rango de seguridad de trabajo de nuestro diseño y más apartado estará de las condiciones críticas de extracción.

Para el cálculo del flujo de calor crítico se utilizó la correlación de Bowring ([Todreas, 1990](#)) la cual considera la presión del sistema, flujo másico, calor latente de vaporización, diámetro hidráulico, fracción de masa de vapor en el canal obtenida mediante la correlación de Levy ([Levy, 1965](#)).

2.2.2 Coeficiente convectivo

Los modelos para el coeficiente convectivo que se utilizan en general se han desarrollado a partir de correlaciones empíricas. Dadas las diferentes condiciones en que puede presentarse el fluido y las diferentes formas de transferencia de calor por convección forzada, pueden definirse una gran variedad de modos de transferencia. De todos aquellos que es posible encontrar en la literatura específica, se han elegido para este trabajo seis modos de transferencia, por considerarlos como los más representativos

- 1) Convección forzada de líquido en una sola fase en ebullición nucleada subenfriada,
- 2) Ebullición saturada,
- 3) Ebullición de transición post crítica,
- 4) Ebullición laminar post crítica,
- 5) Fase vapor en convección forzada,

6) Radiación.

Cada uno de estos modos de transferencia de calor se manifiesta en alguna región axial de la barra y es elegido en función de las condiciones del caudal y tipo de flujo del refrigerante como se muestra en la [Figura 3](#).

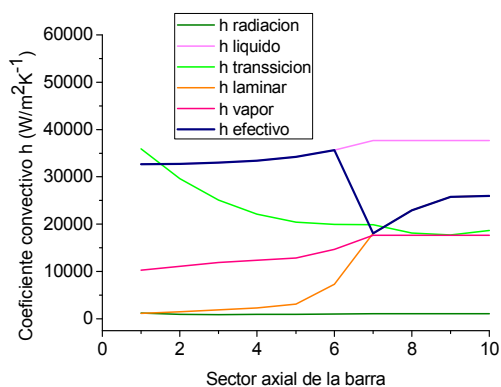


Figura 3: Modos de transferencia de calor en distintos sectores de la vaina y el modo que efectivamente es considerado en un hipotético accidente

2.2.3 Crecimiento de óxido para altas temperaturas

En el rango de alta temperatura (1273 a 2100 K), ni el flujo de calor ni la química del refrigerante tienen influencia importante en el grado de oxidación. A estas temperaturas de funcionamiento en un reactor refrigerado por agua, ésta se encuentra en fase vapor y la oxidación crece mucho más rápidamente que a temperaturas normales de funcionamiento.

En este rango de temperatura la vaina de Zr₂O₃ presenta una capa superficial de ZrO₂ que crece a expensas del metal subyacente. Éste disuelve oxígeno en forma intersticial y da lugar, por un lado, a una capa de estructura hcp denominada α -Zr(O). Más internamente el metal se presenta con estructura bcc formando la llamada fase β -Zr(O). Estas tres fases se encuentran separadas entre sí y del medio ambiente por interfases móviles.

Para el crecimiento de las distintas fases en la región exterior a alta temperatura se utilizó la correlación de Cathcart-Pawel ([Cathcart, Pawel, 1977](#)) en la que el crecimiento obedece a una ley parabólica en función del tiempo.

2.2.4 Aspectos mecánicos

Para simular condiciones de accidente, existe la necesidad de incorporar al código modelos que describan distintos fenómenos mecánicos que ocurren en la vaina. Estas subrutinas consisten en la incorporación de un modelo de predicción de rotura de la vaina (burst stress) y su localización axial y, por otro lado, de un modelo de Creep para evaluar el englobamiento (balloning).

Se supone que la rotura de la vaina ocurre cuando la tensión circunferencial excede la tensión de rotura σ_B . Para expresarla se eligió la siguiente correlación ([Rosinger, 1984](#); [Manngard, 2011](#))

$$\sigma_B = C_1 \exp(-C_2 T) \exp((C_0 W_{fO})^2) \quad (1)$$

donde C_0 , C_1 y C_2 son constantes cuyos valores para el Zry en las fases α y β se detallan en la [Tabla 1](#), T es la temperatura absoluta y W_{fO} es la fracción total en peso de oxígeno capturado en la reacción agua-metal en alta temperatura

Para el cálculo de la rapidez efectiva de creep en la vaina se utilizó la siguiente correlación ([Manngard, 2011](#))

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = C_3 \exp\left(-\frac{C_4}{T}\right) \exp(C_5 w_{fO}) \sigma_{VM}^n \quad (2)$$

válida cuando el material de la vaina se encuentra en los rangos monofásicos α o β , w_{fO} es la fracción en peso de oxígeno en el espesor de la vaina y σ_{VM} es la tensión de von Misess, las constantes C_3 , C_4 , C_5 y n toman los valores que se dan en la [Tabla 1](#), Para el caso de coexistencia de dos fases ($\alpha + \beta$), la velocidad de Creep se calcula como un promedio de las velocidades en cada fase ponderado por la fracción en volumen que ocupa cada una

	puro α -Zr	puro β -Zr
C_0	1052.63	1052.63
C_1 ($N\ cm^{-2}$)	8.3×10^4	2.3×10^5
C_2 (K^{-1})	0.001	0.003
C_3 ($s^{-1} N^{-n} cm^{2n}$)	1.4523×10^{-8}	2.1751×10^{-7}
C_4 (K)	38487.0	17079.0
C_5	342.0	0.0
n	5.89	3.78

Tabla 1: Valores de las constantes usadas en las correlaciones (1) y (2) considerando solo fase α o β

3 RESULTADOS

En esta sección se muestran las comparaciones de resultados obtenidos con DIONISIO incluyendo los modelos de accidente y resultados experimentales obtenidos dentro de una serie de ensayos denominados IFA (Instrumented Fuel Assembly) ([Lestinen, 2004](#)). Estos experimentos fueron concebidos para verificar y validar los criterios de seguridad en accidentes tipo LOCA, y fueron llevados a cabo en el reactor HALDEN en Noruega. Consisten en pruebas integrales con barras combustibles instrumentadas ante escenarios con fuertes caídas de presión y con bajo flujo de refrigerante con el objetivo de evaluar fenómenos termofísicos y termoquímicos en barras con bajo y alto grado de quemado. A excepción de los dos primeros experimentos, que se realizaron con combustibles frescos, los restantes utilizaron barras previamente irradiadas en reactores comerciales tipo PWR y BWR. Entre los datos que se obtienen del experimento se encuentran: la temperatura del revestimiento, su deformación por ballooning, hidruración, oxidación, relocación del combustible y fragmentación. En particular en esta presentación se comparan resultados del experimento IFA.650.2 ([Ek, 2005](#)) con simulaciones efectuadas con DIONISIO. El dispositivo experimental consiste en una barra combustible de 50 cm de longitud, diámetro exterior 9,50 mm y espesor 0,57 mm que contiene pastillas de UO_2 en vaina de Zry, con una presión de llenado de 40 bar de He. La barra es calentada con resistencias eléctricas dentro de un loop de agua pesada a alta presión inicialmente a $700\ Ncm^{-2}$ y flujo masico en el canal de

0.056 kg s^{-1} . En la Figura 4 se observa la historia de presión registrada en el experimento y la tomada como entrada en DIONISIO.

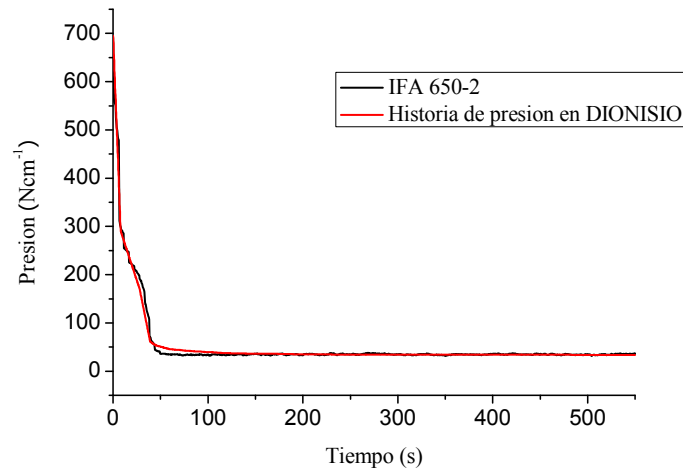


Figura 4: Historia de caída de presión del experimento IFA 650-2 y la considerada como entrada en DIONISIO

En la Figura 5 se muestran los valores medidos experimentalmente de la presión interior de la vaina y los resultados calculados con DIONISIO. El descenso abrupto en el instante $t=110 \text{ s}$ es considerado en la subrutina de accidente como el momento que ocurre el *burst* en la vaina, con la consecuente liberación de los gases contenidos y caída de su presión interna.

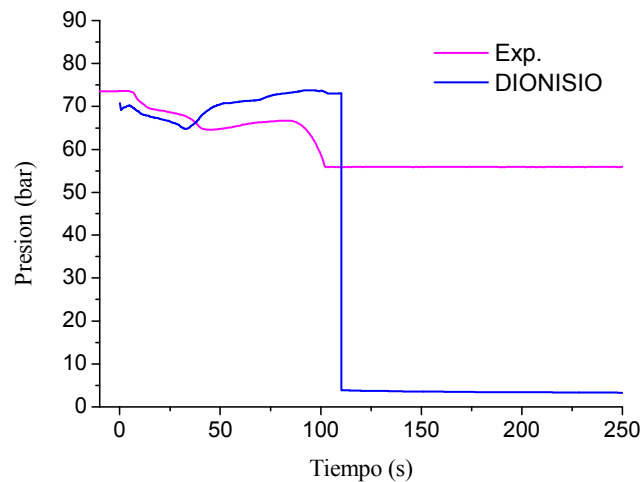


Figura 5: Comparación de la presión interna de la vaina medida en experimento IFA 650-2 y el calculado con DIONISIO

En la Figura 6 se muestra la comparación de los valores medidos de la elongación axial de la vaina en el experimento IFA 650-2 con los resultados de DIONISIO. Estos abarcan los primeros 110 segundos de comenzado el accidente. Luego de este período se produce el daño de la vaina.

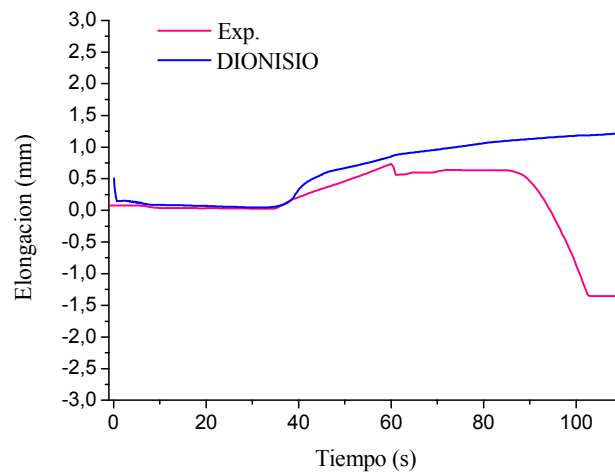


Figura 6: Comparación de la elongación axial de la vaina medida en experimento IFA650-2 y calculada con DIONISIO

En la Figura 7 se comparan las temperaturas alcanzadas en el borde exterior de la vaina medidas en el experimento IFA 650-2 y las calculadas con DIONISIO. Las mediciones en el experimento se realizaron en dos posiciones axiales distintas: la termocupla denominada TCC1 fue situada en la parte inferior de la vaina y las termocuplas TCC2 y TCC3 en la parte superior. También se muestran los instantes en que comienza a producirse el *balloning* y el *burst* comparados con los cálculos de DIONISIO.

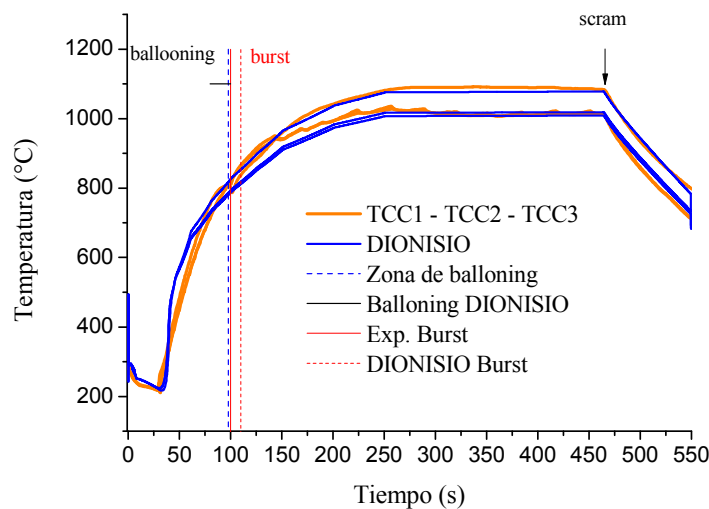


Figura 7: Comparación de la temperatura exterior de la vaina alcanzada en el experimento IFA 650-2 y la calculada con DIONISIO en dos posiciones axiales de la barra e instantes donde se produce el ballooning y el burst

Asimismo, se muestran los resultados del crecimiento de óxido durante el accidente calculados con DIONISIO. En la Figura 8.a) se observa el espesor de la capa de óxido en cada uno de los 20 sectores en que fue dividida la barra en algunos instantes, mientras que en

la Figura 8.b) se muestra la evolución durante el tiempo total del accidente en algunos de los 20 sectores.

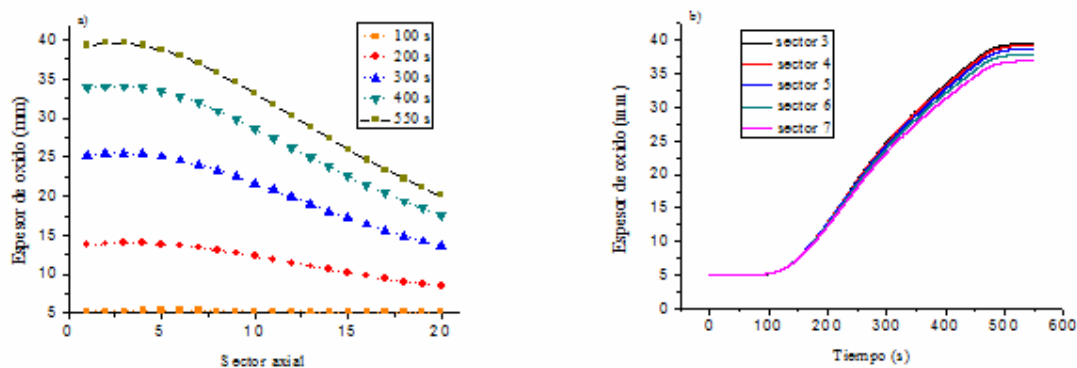


Figura 8: Crecimiento de óxido calculado con DIONISIO, a) espesor de óxido en los 20 sectores axiales en distintos instantes de accidente. b) espesor de óxido total en distintos sectores durante todo el accidente

4 CONCLUSIONES

El estado de avance de los modelos termohidráulico vaina-refrigerante, el de predicción de crecimiento de óxido a altas temperaturas y el de comportamiento mecánico incorporados permite analizar y cuantificar un gran número de parámetros y variables que intervienen en la evolución de la temperatura de la barra combustible en cada posición y en el tiempo, como ser: calor acumulado y su disipación, temperatura exterior de la vaina (y del combustible en su conjunto), temperatura del fluido en el canal refrigerante, fracciones de vapor en volumen y en masa, caídas de presión y de caudal, además de la evolución de nuevas fases en la vaina y distintos aspectos mecánicos. Estos parámetros se calculan no sólo en situaciones normales de operación del reactor sino también en casos de transitorios rápidos como los que suceden en accidentes tipo LOCA donde las condiciones de presión, caudal, temperatura, etc. del refrigerante varían drásticamente y pueden llegar incluso a afectar la integridad física y mecánica las barras combustibles.

El modelo se halla en continua mejora con el fin de construir una herramienta de simulación que describa todas las condiciones que afectan a las barras combustibles durante un LOCA, esto es: captura y liberación de hidrógeno a alta temperatura, fragilización del revestimiento y fenómenos físicos y mecánicos que sufre el combustible como fragmentación de la pastilla y su relocalación, que no han sido considerados en este trabajo.

REFERENCIAS

- Soba, A., Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en operación, *Tesis de doctorado, FCEyN, UBA*, 2007.
- Denis, A., Soba, A. Simulation of Pellet-Cladding Thermomechanical Interaction and Fission Gas Release. *Nucl. Eng. and Dgn.* 223 ,2003.
- Soba, A., Denis, A., Simulation with Dionisio 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods. *J. of Nucl. Mater.* 374, 2008.
- Lemes, M Soba, A., Denis, A. Modelo termoquímico de una barra combustible nuclear en condiciones normales y de accidente. *Revista Mecánica Computacional*, Asociación argentina de Mecánica computacional, Vol XXXIII, 2014
- Todreas, N. E., Kazimi, M. S. Nuclear Systems I, *Thermal Hydraulic Fundamentals*, Massachusetts Institute of Technology, 1990.
- Lemes, M., Soba, A., Denis, A., An empirical formulation to describe the evolution of the high burnup structure, *J. of Nucl. Mater* 456 ,174–181, 2015.
- Levy S., Forced convection subcooling boiling , prediction of vapor volumetric fraction, *Int. J. Heat mass transfer*, 10, 951-965, 1967.
- SCDAP/RELAP5/MOD3.1 Code Manual ,Volume IV: MATPRO, A Library of Materials Properties for Light-Water-Reactor Accident Analysis, 1993.
- Cathcart J. V., Pawel R. E., Zirconium Metal-Water Oxidation Kinetics IV. Reaction Rate Studies, 1977.
- Rosinger, H.E., A model to predict the failure of Zircaloy-4 fuel sheathing during postulated LOCA conditions. *J. of Nucl. Mater*, 120,1 (1984) 41-54.
- Manngard, T., Jernkvist, L. O. , Massih, A., Evaluation of Loss-of-Coolant Accident Simulation Tests with the Fuel Rod Analysis Code FRAPTRAN-1.4. Quantum Technologies AB, Report TR11-008V1 (2011).
- Lestinen, V., LOCA Testing at Halden, First Experiment IFA-650.1, HWR-762, OECD Halden Reactor Project, 2004.
- Ek, M., LOCA TESTING AT HALDEN; THE SECOND EXPERIMENT IFA-650.2, HWR-813 OECD Halden Reactor Project, 2005.