

SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE VAINAS DE COMBUSTIBLES NUCLEARES EN CONDICIONES TERMOMECAÑICAS DE ACCIDENTE CON DIONISIO 3.0

SIMULATION OF THE BEHAVIOR OF NUCLEAR FUEL CLADDINGS IN ACCIDENT THERMOMECHANICAL CONDITIONS WITH DIONISIO 3.0

Ezequiel Goldberg^{a,b}, Matías E. Loza Peralta^{a,b} y Alejandro Soba^{a,c}

^a *Sección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, Comisión Nacional de Energía Atómica, <http://www.cnea.gov.ar/>, ezequielgoldberg@cnea.gov.ar, loza@cnea.gov.ar, soba@cnea.gov.ar*

^b *Instituto de Tecnología Sábado, UNSAM-CNEA, <http://www.isabato.edu.ar/>*

^c *Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, <https://www.conicet.gov.ar/>*

Palabras clave: Dionisio, Elementos Finitos, ballooning, ruptura.

Resumen. Los materiales actualmente utilizados en la industria nuclear, así como aquellos candidatos para un futuro uso, son sometidos a experimentos de los cuales una gran cantidad se realizan fuera del reactor, aplicando historias de temperatura y/o presurización sin irradiación para evaluar sus propiedades termomecánicas. Estos ensayos pueden ser llevados a cabo en entornos inertes para determinar el comportamiento puro de la pieza examinada o en entornos que involucren el uso de vapor o altas concentraciones de yodo o hidrógeno para analizar su influencia en el material en cuestión. Dentro de la Sección Códigos y Modelos de la CNEA, hemos desarrollado un nuevo módulo en el código DIONISIO 3.0 que nos permite simular experiencias sin irradiación sobre diversos materiales. Se han seleccionado una serie de experimentos realizados sobre vainas de Zry-4 y E110 (Zr1%Nb) con el objetivo de caracterizar los fenómenos de *ballooning* y *burst* (ruptura) ante condiciones que emulan aquellas que pueden ocurrir en escenarios de accidente por pérdida de refrigerante. El modelo desarrollado permite utilizar un dominio tanto en dos dimensiones con simetría axial como uno en tres dimensiones, determinando el momento de ruptura de la vaina en conjunto con la evolución de la fisura en los instantes finales (únicamente para los dominios en tres dimensiones). Esto requirió incorporar al código modelos de predicción de *creep* en alta temperatura y de ruptura de la vaina por condiciones de tensión y/o deformación además de modelos de zona cohesiva para describir la formación y el avance de la fisura.

Keywords: Dionisio, Finite Element Method, ballooning, burst.

Abstract. The materials currently used in the nuclear industry, as well as those candidates for future use, are subjected to experiments of which a large amount is carried out outside the reactor, applying temperature and/or pressurization histories without irradiation to evaluate their thermomechanical properties. These tests can be carried out in inert environments to determine the pure behavior of the examined part or in environments that involve the use of steam or high concentrations of iodine or hydrogen to analyze its influence on the material in question. Within the Codes and Models Section of CNEA, we have developed a new module in the DIONISIO 3.0 code that allows us to simulate experiences without irradiation on various materials. A series of experiments carried out on Zry-4 and E110 (Zr1%Nb) claddings have been selected with the objective of characterizing the phenomena of ballooning and burst in conditions that emulate those that can occur in accident scenarios due to loss of coolant. The developed model allows the use of both a two-dimensional domain with axial symmetry and one in three dimensions, determining the cladding rupture moment in conjunction with the evolution of the crack in the final moments (only for the three-dimensional domains). This required incorporating into the code models for predicting high-temperature creep and cladding burst due to stress and/or strain conditions, as well as cohesive zone models to describe the formation and advancement of the crack.

1 INTRODUCCIÓN

DIONISIO es un código que simula la mayoría de los fenómenos principales que tienen lugar dentro de una barra de combustible durante la irradiación en un reactor nuclear en condiciones normales o de accidente. El código tiene una gran cantidad de modelos interconectados acoplados en una estructura modular. Predice la evolución termomecánica y termoquímica de una barra de combustible, el comportamiento termohidráulico del canal de refrigerante alrededor de la barra, la variación de temperatura del plenum y la liberación de diferentes especies generadas en la pastilla y liberadas al volumen libre en la barra, entre otros procesos que pueden tener lugar en una barra de combustible nuclear, como la fractura y la interacción mecánica pastilla-vaina (PCMI) (Denis y Soba 2003; Soba 2007; Soba y Denis 2008; 2015). El método de elementos finitos (MEF) es la principal herramienta numérica utilizada para resolver el sistema pastilla-gap-vaina, considerando un dominio bidimensional asumiendo simetría axial o una geometría tridimensional según la elección del usuario. Para simular mejor los fenómenos involucrados, la barra se divide de acuerdo con las preferencias del usuario (Soba y Denis, 2015). El código ha incorporado subrutinas para simular el comportamiento del combustible en condiciones de alto quemado (Lemes et al., 2015; Soba et al., 2013, 2014), así como condiciones de accidentes por pérdida de refrigerante (LOCA) (Lemes et al. 2017; Lemes, Denis y Soba 2019). Asimismo, los modelos de código se revisan continuamente, incluyendo mejoras que aumentan la confiabilidad de sus predicciones (Cazado y Denis, 2018; Goldberg et al., 2019).

Todo el trabajo descrito anteriormente corresponde a simulaciones de barras combustibles bajo irradiación, definiendo geometrías precisas y delimitadas para el sistema pastilla-gap-vaina. Sin embargo, existe una enorme variedad de experimentos sobre materiales relacionados con la industria nuclear que se llevan a cabo fuera de un reactor, sometiendo los materiales a historias de temperatura o presión, o simplemente pruebas termomecánicas destinadas a determinar las propiedades mecánicas. En algunos casos, las condiciones atmosféricas en las que se realizan los experimentos se modifican, exponiendo las muestras a vapor, alta concentración de yodo o hidrógeno para analizar su influencia en el material que se está evaluando (Erbacher, 1981; Griger et al., 1999; Hózer et al., 2001, 2005; Karwat, 1985; Markiewicz y Erbacher, 1988; Perez-Feró et al., 2010; Powers y Meyer, 1979; Vasáros y Matus, 1999).

Para analizar este tipo de experimentos, desarrollamos un nuevo módulo, que llamamos DIONISIO-WIRR (por *Without IRRadiation* en inglés), que utiliza el *kernel* (núcleo) del código de combustible que incluye bibliotecas de elementos finitos, generador de mallas, algoritmos para resolver sistemas de ecuaciones y, por supuesto, la biblioteca de materiales. Basado en este núcleo, el módulo WIRR resuelve un problema termomecánico en la geometría requerida en función del historial de evolución térmico, mecánico o químico al que está sometida la muestra. El módulo mecánico utiliza una formulación lagrangiana actualizada (ULF) no lineal que permite describir efectos cinemáticos no lineales debido a grandes desplazamientos, grandes rotaciones y grandes deformaciones de manera eficiente (Bathe K J. 2005). Asimismo, la evolución química del material involucrado se evalúa de acuerdo con la atmósfera en la que está inmerso y su historia térmica.

Para ejemplificar el funcionamiento del módulo, en la [sección 2](#) se presenta una serie de análisis realizados en tubos de Zircaloy-4 y Zr-1%Nb, desarrollados en diferentes instalaciones experimentales, con el objetivo de caracterizar el *ballooning* y la falla en situaciones que emulan las de un accidente causado por pérdida de refrigerante. Esto implica el uso de leyes para predecir la ruptura por tensión y deformación, así como leyes de fluencia (*creep*) a alta temperatura. En la [sección 3](#), se presenta un análisis de la evolución de las fisuras en las vainas.

Esta descripción se lleva a cabo utilizando el método de zona cohesiva (CZM), una formulación desarrollada para tratar discontinuidades que progresan en el continuo dentro del marco del MEF (Barenblatt 1962; Dugdale 1960; Rice 1968). Finalmente, en la [sección 4](#) presentamos algunas conclusiones.

2 EXPERIMENTOS DE BALLOONING EN TUBOS DE ZRY-4 Y ZR-1%NB

2.1 Modelos mecánicos

La simulación de condiciones de operación anormales impone la necesidad de incorporar en el código diversos modelos mecánicos específicos para tales casos. En primer lugar, agregamos a la base de datos de nuestro código las propiedades termomecánicas y termofísicas relacionadas con Zr-1%Nb y verificamos que los modelos incluidos para Zircaloy-4 son válidos en el rango de alta temperatura. Todos los modelos incorporados en la base de datos de materiales de DIONISIO para los experimentos probados en este documento se enumeran en la [Tabla 1](#). En la tabla, se utiliza el sistema internacional de unidades. Todas las propiedades termomecánicas para la aleación Zr-1%Nb fueron tomadas de una base de datos por [Yegorova et al., \(1999\)](#). Para Zircaloy-4, las ecuaciones utilizadas para el coeficiente de Poisson y la tensión de fluencia se seleccionaron de [Kinoshita e Ichikawa, \(1980\)](#), la ley para el módulo de Young de [MATPRO Version11, \(1979\)](#) y [Olander, \(1976\)](#), la dilatación térmica utilizada es de [Olander, \(1976\)](#) y la conductividad térmica se presentó en un artículo anterior ([Soba y Denis, 2008](#)).

	Zry-4	Zr-1%Nb
Módulo de Young E [Pa]	$1.236 \times 10^{11} - 6.221 \times 10^7 T$	$T < 1073$ $1.121 \times 10^{11} - 6.438 \times 10^7 T$ $T \geq 1073$ $9.129 \times 10^{10} - 4.5 \times 10^7 T$
Ratio de Poisson μ	0.32	$0.42628 - 5.556 \times 10^{-5} T$
Tensión de fluencia, σ_Y [Pa]	$6.578 \times 10^4 (1 - 1.686 \times 10^{-3} T + 7.748 \times 10^{-7} T^2)$	$2.634 \times T^5 - 8.757 \times T^4 + 1.108 \times T^3 - 6.622 \times T^2 + 1.818 \times T - 1.537$
Dilatación térmica α [K ⁻¹]	$\frac{-2.07 \times 10^{-3} + 6.72 \times 10^{-6} T}{\Delta T}$	Dirección axial $293 < T < 393 \rightarrow 5.3 \times 10^{-6}$ $393 < T < 573 \rightarrow 5.4 \times 10^{-6}$ $573 < T < 773 \rightarrow 5.5 \times 10^{-6}$ $773 < T < 923 \rightarrow 5.6 \times 10^{-6}$ Dirección radial $293 < T < 393 \rightarrow 5.7 \times 10^{-6}$ $393 < T < 573 \rightarrow 5.9 \times 10^{-6}$ $573 < T < 773 \rightarrow 6.3 \times 10^{-6}$ $773 < T < 923 \rightarrow 6.8 \times 10^{-6}$

Conductividad térmica k [W m ⁻¹ K ⁻¹]	$7.51 + 2.09 \times 10^{-2}T$ $- 1.45 \times 10^{-5}T^2$ $+ 7.67 \times 10^{-9}T^3$	$T < 373$ $9.5 \times 10^{-3}(T - 273) + 17.01$
		$373 < T < 673$ $10.3848 (T - 273)^{0.117} e^{-0.115 \times 10^{-3}(T-273)}$
		$673 < T < 1273$ $167.88 (T - 273)^{-0.429} e^{1.169 \times 10^{-3}(T-273)}$

Tabla 1 Propiedades termomecánicas de Zry-4 y Zr-1%Nb

En segundo lugar, se incorporaron modelos para predecir la falla de la vaina (condiciones de *burst* por tensión y deformación) y modelos de fluencia (*creep*) para evaluar el *ballooning* de la vaina. Se asume que la falla ocurre cuando la tensión circunferencial excede la tensión crítica, o la deformación alcanza el criterio de falla de deformación plástica. Existen varias correlaciones empíricas conocidas para predecir el estallido, de las cuales utilizamos la ley de Rosinger para Zrycaloy-4 (Erbacher et al. 1982) y la ley de Van Uffelen (Van Uffelen et al. 2008) o la ley alternativa publicada por Yegorova et al., (1999) para el material Zr-1%Nb.

La ley de *creep* para Zry-4 fue tomada de Manngård et al., (2011) mientras que para Zr-1%Nb la ley fue tomada de Kaddour et al., (2004). Las temperaturas de los límites de fases y la tasa de fracción de volumen transformada a la fase beta en función del tiempo y la temperatura se construyeron a partir Manngård et al., (2011) y Kaddour et al., (2004) para Zry-4 y Zr-1%Nb respectivamente.

En la **Tabla 2** se enumeran las expresiones utilizadas para el *burst* junto a las diferentes constantes y los parámetros involucrados, mientras que en la **Tabla 3** se presentan las leyes de *creep*. En ambas tablas, las temperaturas están en K, w_{f0} es la fracción total en peso de oxígeno recogido en las reacciones de agua-metal a alta temperatura en el caso de una atmósfera de vapor y las tensiones (tensión efectiva de Von Mises, σ_{VM}) se expresan en Pa. Para la región de dos fases ($\alpha + \beta$), la velocidad de fluencia se calcula como un promedio de ambas tasas monofásicas pesadas con las fracciones de volumen de cada fase.

	Zry-4	Zr-1%Nb
Tensión de burst	$\sigma_B = C_1 e^{-C_2 T} e^{-(C_0 w_{f0})^2}$ [C ₀] = adim ; [C ₁] = Pa ; [C ₂] = K ⁻¹	
	$C_0 = 1052.6$	$C_0 = 0$
	$T < 1085$ $C_1 = 8.3 \times 10^8 ; C_2 = 0.001$	$T < 1033$ $C_1 = 1.419 \times 10^9$ $C_2 = 0.002545$
	$1085 \leq T \leq 1166$ $C_1 = 8.3 \times 10^8 + 2.17 \times 10^5 (T - 1085)/81$ $C_2 = 0.001 + 0.002(T - 1085)/81$	$1033 \leq T \leq 1176$ $C_1 = 4.103 \times 10^{14}$ $C_2 = 0.01472$
	$1166 < T \leq 1248$ $C_1 = 3 \times 10^9 - 7 \times 10^4 (T - 1166)/82$ $C_2 = 0.003$	$T > 1176$ $C_1 = 2.703 \times 10^8$ $C_2 = 0.002622$
$T > 1248$ $C_1 = 2.3 \times 10^9 ; C_2 = 0.003$		

		<p>Coefficientes alternativos</p> <p>$T < 973$</p> $C_1 = 1.99522 \times 10^9$ $C_2 = 0.002622$ <p>$973 \leq T \leq 1176.44$</p> $C_1 = 2.99522 \times 10^{12}$ $C_2 = 0.00952232$ <p>$T > 1176.44$</p> $C_1 = 1.41573 \times 10^9$ $C_2 = 0.00301426$
Deformación de burst	$\varepsilon_B = C_3 T^4 - C_4 T^3 + C_5 T^2 - C_6 T + C_7$ $[C_3] = K^{-4}; [C_4] = K^{-3}; [C_5] = K^{-2}; [C_6] = K^{-1}; [C_7] = \text{adim}$	
	<p>$940 \leq T \leq 1200$</p> $C_3 = 1.587979 \times 10^{-9}$ $C_4 = 6.692798 \times 10^{-6}$ $C_5 = 1.053049 \times 10^{-2}; C_6 = 7.331051$ $C_7 = 1906.17$ <p>$1200 < T < 1700$</p> $C_3 = 0; C_4 = 1.67939 \times 10^{-8}$ $C_5 = 6.23050 \times 10^{-5}$ $C_6 = 7.360497 \times 10^{-2}$ $C_7 = 28.1199$ <p>$T \geq 1700$</p> $C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = 0$ $C_7 = 0.544589$	<p>$C_3 = 0$</p> <p>$973 \leq T \leq 1108$</p> $C_4 = -2.08674 \times 10^{-7}$ $C_5 = -6.7244 \times 10^{-4}$ $C_6 = -0.717577$ $C_7 = -252.941$ <p>$1108 < T < 1473$</p> $C_4 = 0; C_5 = 9.42896 \times 10^{-6}$ $C_6 = 0.0243805; C_7 = 15.8911$ <p>$T \geq 1473$</p> $C_4 = C_5 = C_6 = 0$ $C_7 = 0.44$

Tabla 2 Ecuaciones para predecir tensión y deformación de *burst* incluidas en Dionisio

Zry-4	$\frac{d\varepsilon}{dt} = A(e^{-B w_{fo}})(e^{-\frac{Q}{RT}})\sigma_{VM}^n$ $A_{\alpha} = 4 \times 10^{-32} [Pa^{-n}s^{-1}]$ $B_{\alpha} = 342 [adim]$ $Q_{\alpha}/R = 38487 [K]$ $n_{\alpha} = 5.89 [adim]$ $A_{\beta} = 1.65 \times 10^{-22} [Pa^{-n}s^{-1}]$ $B_{\beta} = 0 [adim]$ $Q_{\beta}/R = 17079 [K]$ $n_{\alpha} = 3.78 [adim]$
Zr-1%Nb	$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{A}{T} (e^{-\frac{Q}{RT}})\sigma_{VM}^n$ <p>$\sigma_{VM} < 1500$</p> $A_{\alpha} = 6.78 \times 10^3 [K MPa^{-n}s^{-1}]$ $Q_{\alpha}/R = 15996 [K]$ $n_{\alpha} = 1 [adim]$ <p>$\sigma_{VM} \geq 1500$</p> $A_{\alpha} = 2.28 \times 10^3 [K MPa^{-n}s^{-1}]$ $Q_{\alpha}/R = 23333 [K]$ $n_{\alpha} = 4 [adim]$ <p>Pure β</p> $A_{\beta} = 1.23 \times 10^3 [K MPa^{-n}s^{-1}]$ $Q_{\beta}/R = 17088 [K]$ $n_{\beta} = 4.3 [adim]$ <p>$\alpha + \beta$</p> $A_{\beta} = 5.01 \times 10^2 [K MPa^{-n}s^{-1}]$ $Q_{\beta}/R = 15000 [K]$ $n_{\beta} = 4.0 [adim]$

Tabla 3 Leyes de *creep* adoptadas para Zry-4 y Zr-1%Nb

2.2 Comparación con datos de los experimentos PUZRY, PUKI y BALL

Se desarrollaron ensayos de explosión de una única barra para vainas de Zircaloy-4 y Zr-

1%Nb para investigar el *ballooning* y *burst* en escenarios que emulan condiciones de accidente. Los experimentos se realizaron en dos configuraciones principales: presión interna inicial fija y temperatura incremental o temperatura constante y presión interna incremental (ver [Tabla 4](#) para la caracterización de los experimentos).

Para el primer tipo, elegimos una serie de experimentos llamados REBEKA llevados a cabo en equipos de prueba de barra simple en KfK en el Instituto IRB ([F. J. Erbacher, 1981](#); [Markiewicz y Erbacher, 1988](#)) para tubos de Zircaloy-4 obtenidos de NRG (Alemania) y CONUAR (Argentina) y la serie BALL 1 ([Karwat, 1985](#); [Powers y Meyer, 1979](#)) del instituto AEKI. Para el segundo tipo, seleccionamos las series BALL 2 ([Karwat, 1985](#); [Powers y Meyer, 1979](#)), PUZRY ([Hózer et al., 2001](#); [Vasáros y Matus, 1999](#)) y PUKI ([Griger et al. 1999](#); [Györi et al. 1998](#); [Hózer et al. 2001](#)), todas desarrolladas en el instituto AEKI ([Perez-Feró et al. 2010](#)).

	REBEKA	AEKI BALL 1	AEKI BALL 2	AEKI PUZRY	AEKI PUKI
Material	Zircaloy-4	Zr-1%Nb		Zircaloy-4	Zr-1%Nb
Tipo de Reactor	PHWR	VVER		PWR	VVER
Número de ensayos (simulados/total)	44/44	12/12	11/11	31/31	27/54
Diámetro	11.9 mm	9.1 mm		10.75 mm	9.1 mm
Espesor de la pared	0.55mm	0.65mm		0.725mm	0.65mm
Longitud	500mm	150mm		50mm	50mm
Temperatura	Rampas de temperatura 1 K/s	Rampas de temperatura 6.4-13.5 K/s	Rango 1073-1473 K	Rango 973-1473 K	Rango 923-1473 K
Presión	Rango 6.5-98 bar	Rango 10-40 bar (inicial)	Rampas de presión 0.6-6.6 bar/s	Rampas de presión 0.007-0.26 bar/s	Rampas de presión 0.007-0.17 bar/s
Atmósfera	Vapor	Vapor & Ar.	Ar.	Ar.	Ar.

Tabla 4 Caracterización de los experimentos seleccionados

Para reproducir estos experimentos, utilizamos las nuevas capacidades de DIONISIO, el módulo WIRR con rampas de tasas de calentamiento o tasas de presión alternativamente, resolviendo la evolución termomecánica de la muestra y las modificaciones químicas en el material debidas a la variación de la atmósfera.

La [Fig. 1](#) presenta el tiempo de *burst* experimental en comparación con el predicho por DIONISIO para todas las pruebas utilizadas en este trabajo. La línea de acuerdo perfecto junto con las que indican una desviación de $\pm 10\%$ también se dibujan para hacer evidente la precisión de los resultados. En la [Fig. 2](#) presentamos la misma comparación referida a la presión de *burst* (izquierda) en los experimentos PUZRY, PUKI y BALL y la temperatura de *burst* (derecha) para los experimentos REBEKA y BALL. En el caso de los experimentos BALL, se informa la presurización inicial de las mini barras, pero la presión interna final se controla durante el

experimento y su aumento sigue los cambios en el volumen y la temperatura.

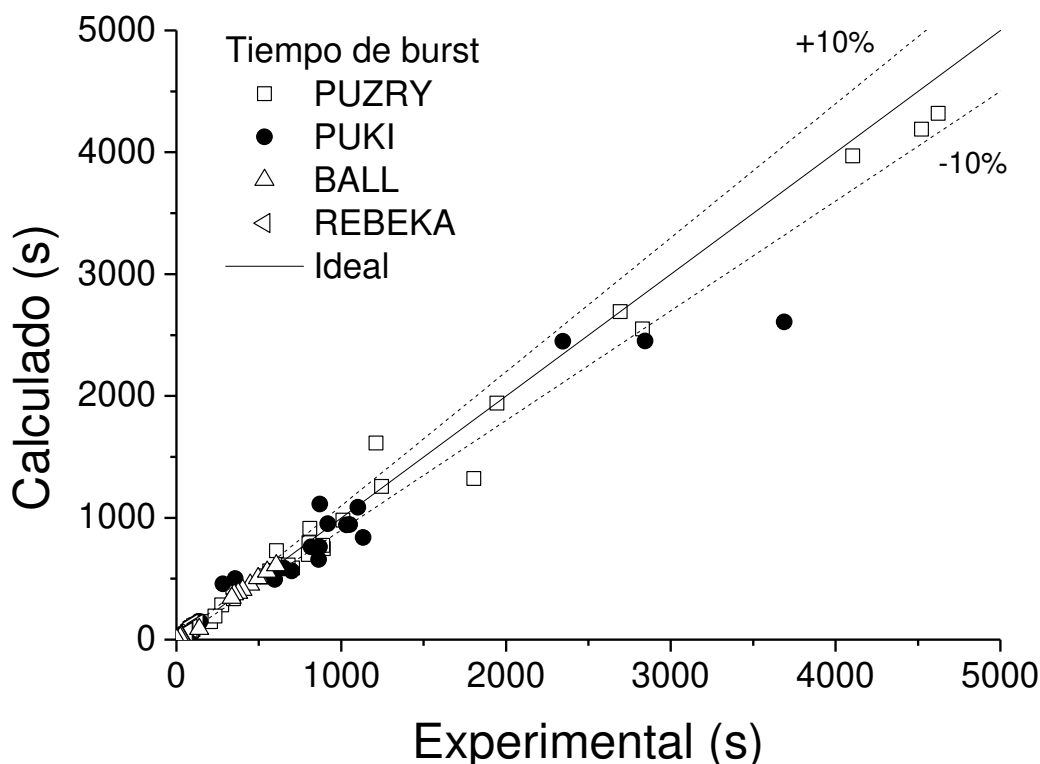


Fig. 1 Tiempo de *burst* para los experimentos vs. los casos simulados.

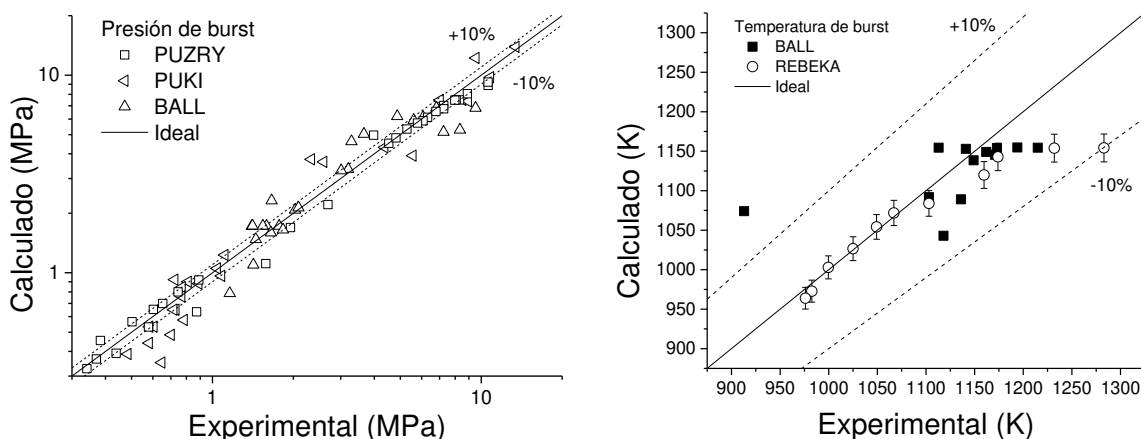


Fig. 2 Izquierda. presión de *burst* para los tres experimentos (PUZRY, PUKI y BALL). Derecha: temperatura de *burst* para los experimentos BALL y REBEKA.

En la mitad superior de la Fig. 3 presentamos curvas de tiempo y presión en el instante de *burst* en función de la temperatura, para experimentos seleccionados que siguen el descenso predicho por la teoría (Erbacher 1981) en comparación con el comportamiento experimental. En la mitad inferior, presentamos la evolución de la tensión circunferencial para los casos seleccionados y la tensión de *burst* predicha de forma teórica. Ambos experimentos incluyen casos (973 y 1173 K para el experimento PUZRY a la izquierda y 973 y 1073 K para el experimento PUKI a la derecha) que no alcanzan el estrés de *burst* previsto, dado que llegan a

los límites predichos de deformación, causando la falla de la vaina.

Todos los gráficos muestran un acuerdo aceptable entre los resultados calculados y medidos, considerando que el tiempo total involucrado en cada experimento está en el rango de segundos. Se observa cierta dispersión en los experimentos PUKI y BALL. Ambos ensayos utilizan Zr-1%Nb y las leyes teóricas utilizadas para predecir el *creep* a alta temperatura presentan algunos problemas en la zona de transición de fase para el circonio. Por esa razón, fue necesario ajustar la ley para este rango de temperatura específico (ver [Tabla 3](#)). En el caso de los experimentos PUZRY, las simulaciones producen buenas predicciones del tiempo de *burst* para los casos de mayor temperatura (> 1173 K), mientras que ciertas predicciones se observan por debajo de lo esperado en casos de temperaturas más bajas. Por otro lado, para el experimento PUKI, se presenta una situación espejada, observando una buena precisión en casos de temperaturas más bajas y una predicción excesiva cuando se considera una temperatura más alta, como se puede observar en las imágenes inferiores de la [Fig. 3](#).

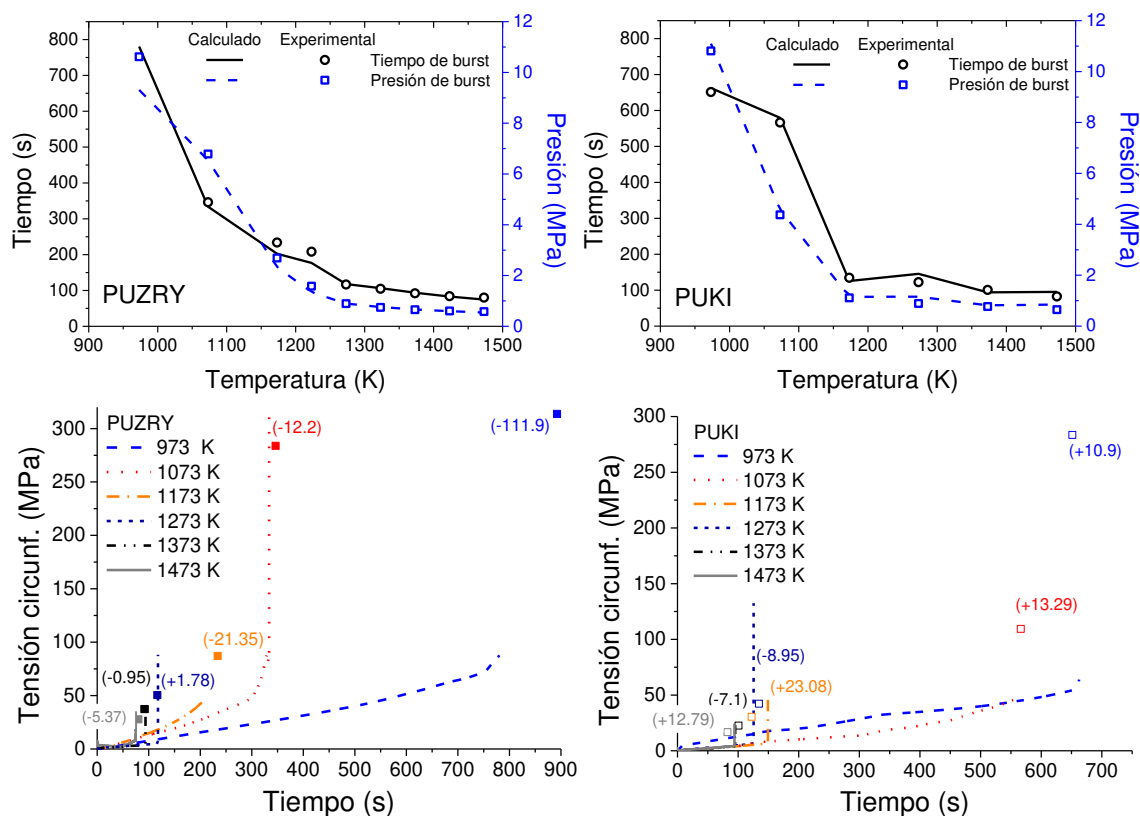


Fig. 3 Arriba: comparación de la dependencia del tiempo, la presión y la ruptura con la temperatura para los experimentos PUZRY (izquierda) y PUKI (derecha). Abajo: evolución de la tensión circunferencial de la vaina en el tiempo para casos seleccionados de los experimentos PUZRY (izquierda) y PUKI (derecha). Los casos sin línea vertical al final de la curva alcanzan el *burst* por la condición de deformación (973 y 1173 K para PUZRY, 973 y 1073 K para PUKI). Los paréntesis muestran la diferencia en tiempo de *burst* entre los resultados experimentales y calculados para cada caso.

3 ANÁLISIS DE FRACTURA

En la versión bidimensional axisimétrica del modelo utilizado para simular los experimentos de explosión mencionados anteriormente, el código puede predecir con alta precisión la tensión, la deformación y las variaciones geométricas, así como el tiempo de *burst*, dependiente de la

temperatura o la presión alcanzada en cada experimento. Su desventaja más notoria es su incapacidad para reproducir la falla de la vaina como consecuencia de las simetrías involucradas. Por esta razón, también se desarrolló una versión tridimensional del modelo, que da como resultado predicciones muy similares de los resultados de los experimentos y nos permite introducir la fisura en el punto de falla de la vaina y simular su evolución en los instantes finales del experimento. Para lograr esto, implementamos el Método de Zona Cohesiva (MZC), que fue ideado como un medio para lidiar con las discontinuidades que surgen dentro del continuo ampliando el marco de trabajo del MEF (Barenblatt 1962; Dugdale 1960; Rice 1968).

El MZC considera la fractura como un fenómeno en el cual dos superficies virtuales adyacentes representan una extensión del extremo de la fisura (la zona cohesiva) y su separación es resistida por fuerzas cohesivas, representadas por leyes de tensión-separación que relacionan el mecanismo de falla microestructural con el campo de deformación del continuo. A diferencia de una fisura convencional que no transmite tensión entre las superficies correspondientes, la falla virtual descrita por la zona cohesiva encierra un campo dinámico de tensión interactiva. El proceso de fractura se caracteriza por la disminución progresiva de la resistencia del material sobre las superficies virtuales adyacentes mencionadas (Xu y Needleman, 1994).

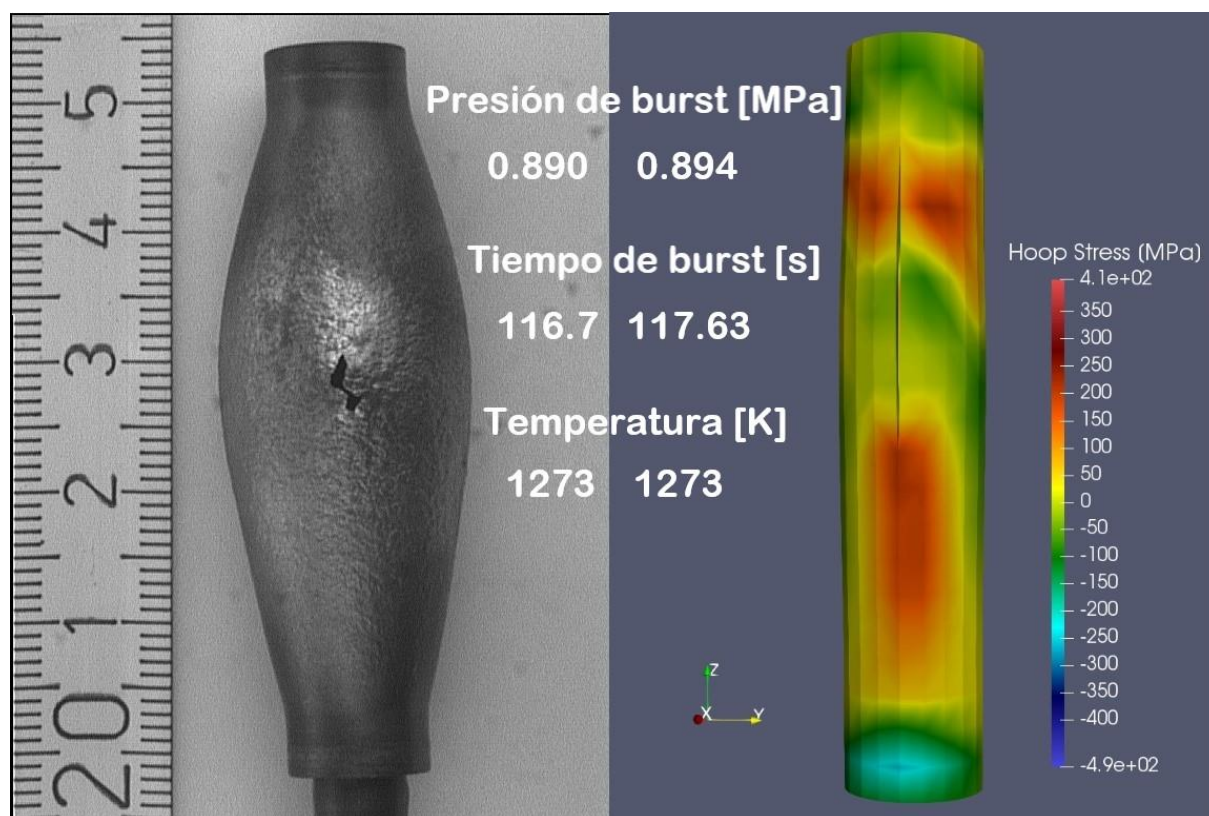


Fig. 4 Izquierda: imagen del PUZRY 8 luego del experimento. Derecha: estadio final de la simulación.

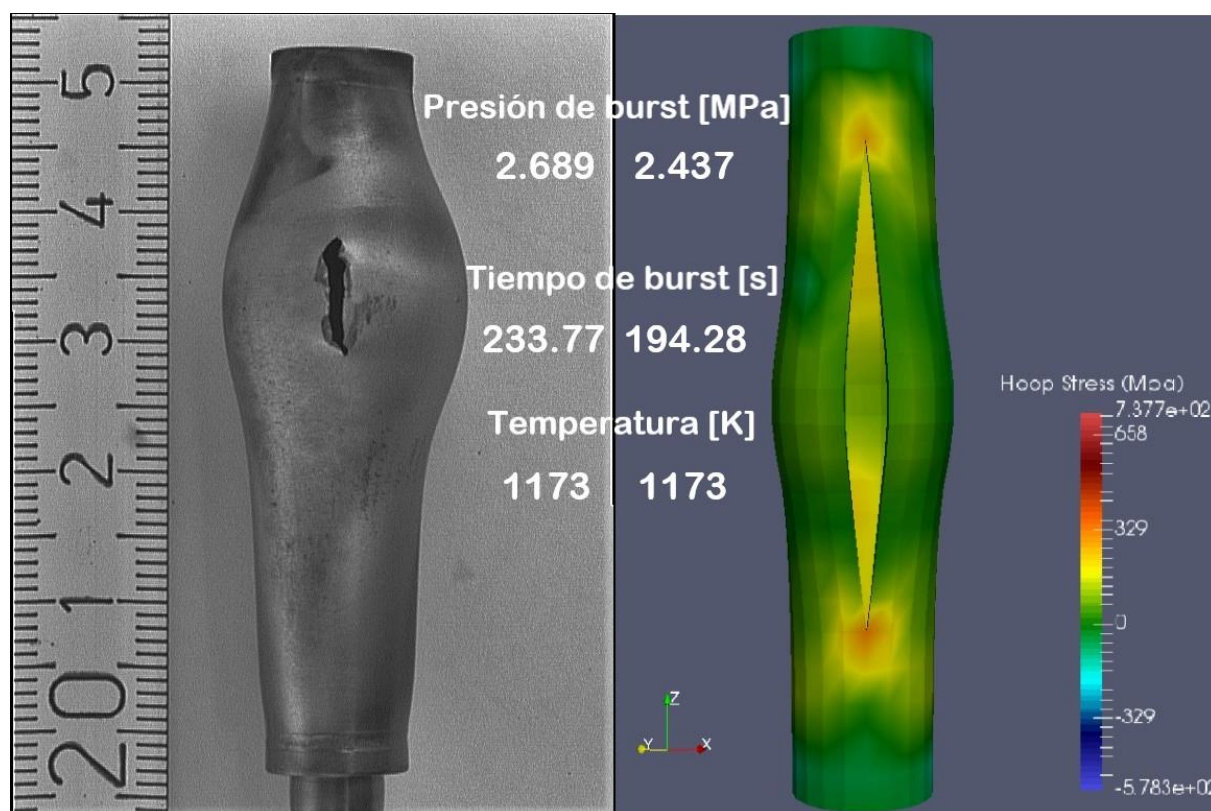


Fig. 5 Izquierda: imagen del PUZRY 18 luego del experimento. Derecha: estadio final de la simulación.

Los casos presentados en esta sección se resuelven hasta el momento del *burst* utilizando el método descrito en la [sección 2](#) para la evolución termomecánica de la vaina junto con otros aspectos como las variaciones químicas en el material. Cuando se cumple alguna de las condiciones de *burst* (ya sea por tensión o por deformación), se aplican elementos cohesivos en las proximidades del área que alcanzó la condición de falla, utilizando el MZC para desarrollar la fisura en la etapa final de la simulación. Vale la pena señalar que la primera parte del modelo antes de que ocurra la explosión requiere simular varios segundos, en otras palabras, prácticamente la duración completa del experimento, mientras que se espera que el MZC resuelva un fenómeno cuya duración es solo de una fracción de segundo, desde el momento en que se cumple la condición de *burst* hasta que se igualan las presiones internas y externas y las tensiones en la vaina se han relajado.

Las [figs. 4-7](#) muestran las imágenes de las muestras tomadas después del experimento a la izquierda, junto con el estado final de la simulación a la derecha, para los casos 8, 18, 26 y 30 del experimento PUZRY descrito en la [sección 2.2](#). Las fotografías del experimento están tomadas de [Perez-Feró et al., 2010](#), base de datos experimental de vainas E110 en condiciones de accidente. Las imágenes de las simulaciones muestran la tensión circunferencial la vaina en color y se pueden observar las fisuras con diferencias considerables en su apertura entre los casos, que se correlacionan con las condiciones de cada escenario, como la temperatura, la tensión y la deformación. Cada figura muestra en el centro para el caso correspondiente los datos del experimento y los resultados obtenidos de la simulación.

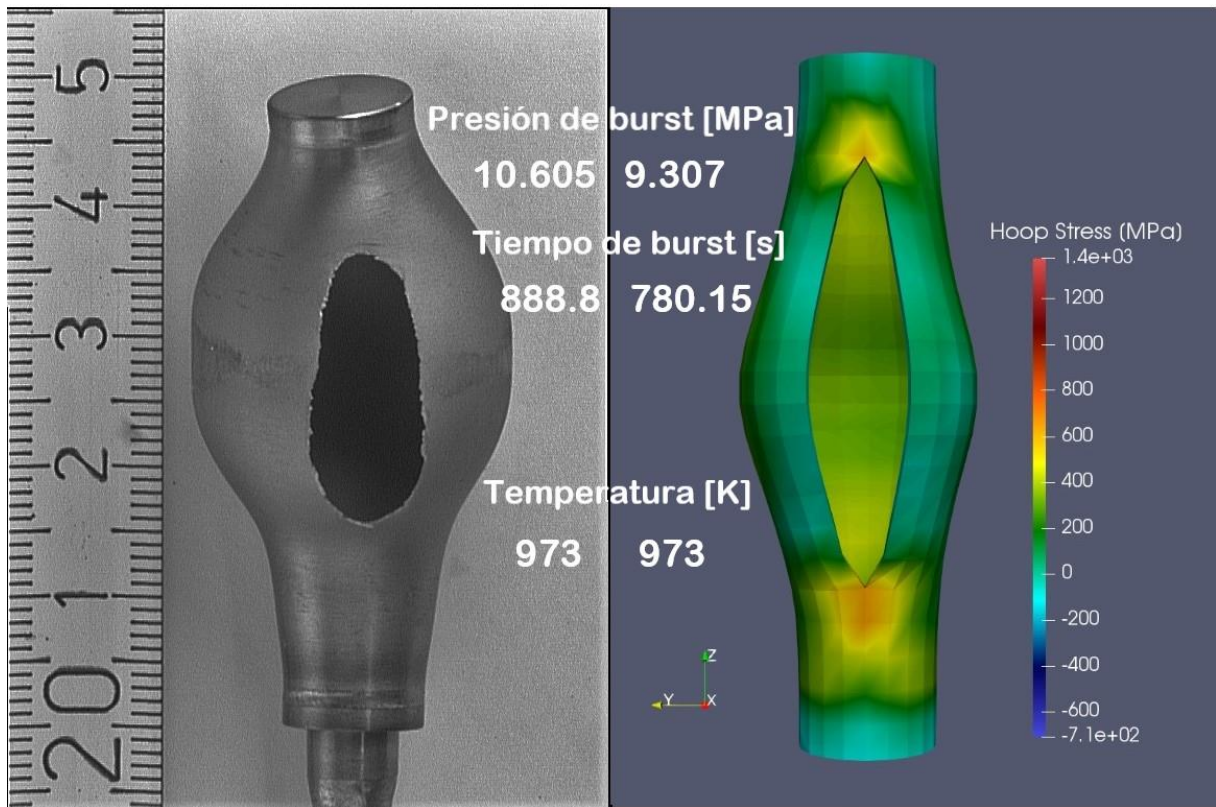


Fig. 6 Izquierda: imagen del PUZRY 26 luego del experimento. Derecha: estadio final de la simulación.

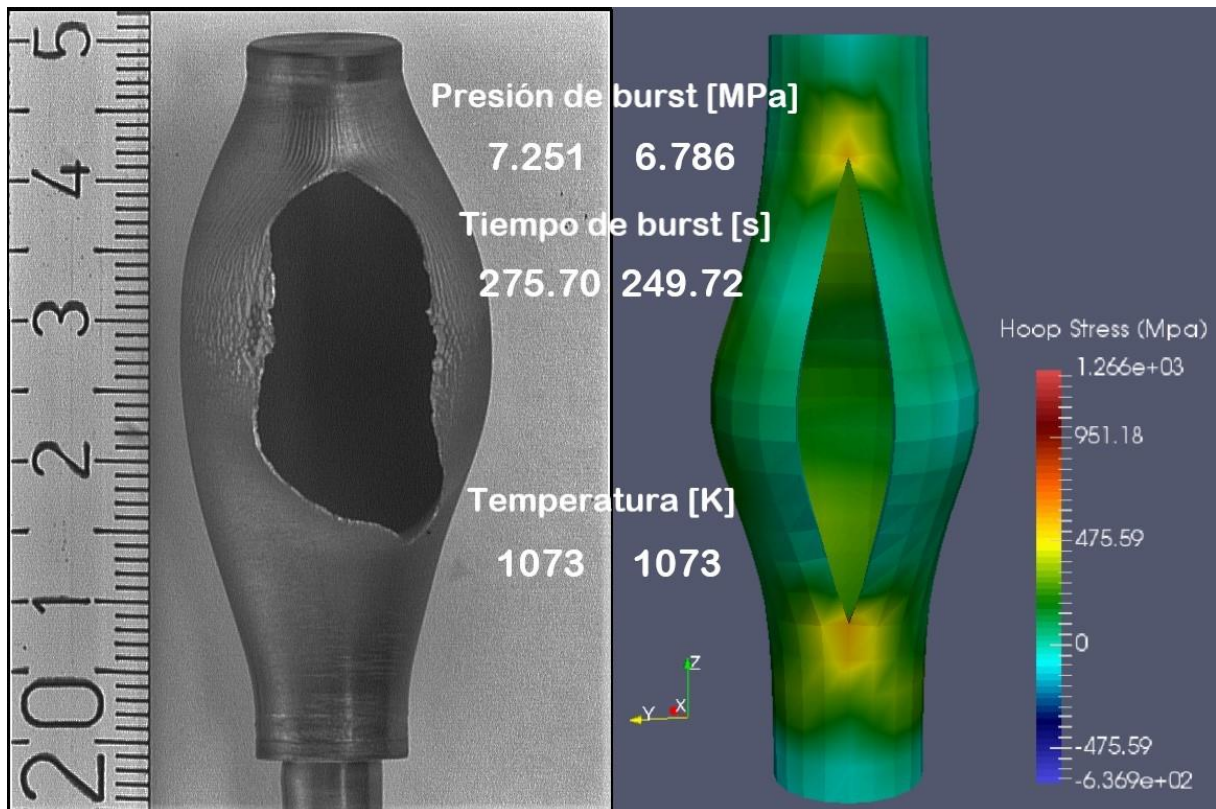


Fig. 7 Izquierda: imagen del PUZRY 30 luego del experimento. Derecha: estadio final de la simulación.

4 CONCLUSIONES

En este trabajo se presentan resultados obtenidos mediante un reciente módulo del código DIONISIO 3.0. Utilizando las propiedades y leyes tanto termomecánicas como termoquímicas para predecir la falla de la vaina y el *creep* a alta temperatura, en este caso para Zircaloy-4 y Zr-1%Nb, se simularon ensayos de *ballooning* y *burst* realizados en los experimentos REBEKA, BALL 1, BALL 2, PUZRY y PUKI. Los ensayos involucraban condiciones que son propias de los accidentes por pérdida de refrigerante, considerando criterios de falla tanto por tensión como por deformación, así como los cambios de fase de circonio y las alteraciones que produce en las propiedades y leyes consideradas.

Los resultados que provee el código tienen un buen acuerdo con las mediciones, donde la mayoría de los casos derivan en una desviación inferior al 10% respecto de sus contrapartes experimentales cuando se considera el tiempo de explosión, así como la presión o temperatura de ruptura, según el caso. La curva esperada se obtiene al trazar los resultados del tiempo de *burst* que disminuye a medida que aumenta la temperatura. Pudimos extender estas simulaciones al complementarlas con el método de zona cohesiva para desarrollar la fisura desde el punto de falla en la geometría para simulaciones tridimensionales. Esto resultó en diversos tamaños de apertura según las condiciones de cada caso, coincidiendo con las fotos tomadas de las muestras después de los experimentos, como se muestra en la [sección 3](#).

El nuevo módulo, respaldado por el núcleo de DIONISIO y su creciente biblioteca de materiales, proporciona un rendimiento muy satisfactorio al simular experimentos sin irradiación en geometrías axisimétricas o tridimensionales. Extiende las capacidades del código y proporciona un camino para continuar mejorando la simulación de varios materiales en diversos escenarios de relevancia para el campo nuclear.

REFERENCIAS

- BARENBLATT, G.I., 1962. The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture. *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 7. S.l.: s.n., pp. 55-129.
- BATHE K J., 2005. *Finite Element Procedures [M]*. Second Edi. S.l.: Prentice Hall. ISBN 0133014584.
- CAZADO, M.E. y DENIS, A.C., 2018. Model of nuclear fuel pellets densification under irradiation and isothermal conditions: Application to UO₂ fuels. *Journal of Nuclear Materials*, vol. 510, pp. 585-595. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2018.08.029.
- DENIS, A. y SOBA, A., 2003. Simulation of pellet-cladding thermomechanical interaction and fission gas release. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 223, no. 2, pp. 211-229. ISSN 00295493. DOI 10.1016/S0029-5493(02)00390-4.
- DUGDALE, D.S., 1960. Yielding of steel sheets containing slits. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 8, no. 2, pp. 100-104. ISSN 00225096. DOI 10.1016/0022-5096(60)90013-2.
- ERBACHER, F.J., 1981. REBEKA test results. *9th Water Reactor Safety Information Meeting*. Gaithersburg, USA: NRC,
- ERBACHER, F.J., NEITZEL, H.J., ROSINGER, H., SCHMIDT, H. y WIEHR, K., 1982. Burst Criterion of Zircaloy Fuel Claddings in a Loss-of-Coolant Accident. En: D.G. FRANKLIN (ed.), *ASTM Special Technical Publication*. West Conshohocken: PA: ASTM International, pp. 271-283. DOI 10.1520/stp37058s.
- GOLDBERG, E., LOZA PERALTA, M.E. y SOBA, A., 2019. DIONISIO 3.0: Comprehensive 3D nuclear fuel simulation through PCMI cohesive and PLENUM models. *Journal of Nuclear Materials* [en línea], vol. 523, pp. 121-134. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2019.06.005. Disponible en:

- <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.06.005>.
- GRIGER, Á., MARÓTI, L., MATUS, L. y WINDBERG, P., 1999. Ambient and high temperature mechanical properties of ZrNb1 cladding with different oxygen and hydrogen content. *Enlarged Halden Programme Group Meeting*. S.l.: s.n.,
- GYÖRI, C., HBZER, Z., MARDTI, L. y MAFUS, L., 1998. VVER Ballooning Experiments. *Enlarged Halden Programme Group Meeting*. S.l.: s.n.,
- HÓZER, Z., GYÖRI, C., HORVÁTH, M., NAGY, I., MARÓTI, L., MATUS, L., WINDBERG, P. y FRECSKA, J., 2005. Ballooning experiments with VVER cladding. *Nuclear Technology*, vol. 152, no. 3, pp. 273-285. ISSN 00295450. DOI 10.13182/NT05-A3676.
- HÓZER, Z., MARÓTI, L., MATUS, L. y WINDBERG, P., 2001. Experiments with VVER fuels to confirm safety criteria. *TopFuel*, pp. 1-7.
- KADDOUR, D., FRECHINET, S., GOURGUES, A.F., BRACHET, J.C., PORTIER, L. y PINEAU, A., 2004. Experimental determination of creep properties of zirconium alloys together with phase transformation. *Scripta Materialia*, vol. 51, no. 6, pp. 515-519. ISSN 13596462. DOI 10.1016/j.scriptamat.2004.05.046.
- KARWAT, H., 1985. Behaviour of a fuel bundle simulator during a specified heatup and flooding period OECD/NEA/CSNI Report No. 98 (REBEKA Experiment). . S.l.:
- KINOSHITA, M. y ICHIKAWA, M., 1980. Fuel rod deformation code FEMAXI-II and its application. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 56, no. 1, pp. 49-56. ISSN 00295493. DOI 10.1016/0029-5493(80)90167-3.
- LEMES, M., DENIS, A. y SOBA, A., 2019. Simulation of nuclear fuel behavior in accident conditions with the DIONISIO code. *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science*, vol. 5, no. 2. ISSN 23328975. DOI 10.1115/1.4042705.
- LEMES, M., SOBA, A., DAVERIO, H. y DENIS, A., 2017. Inclusion of models to describe severe accident conditions in the fuel simulation code DIONISIO. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 315, pp. 1-10. ISSN 00295493. DOI 10.1016/j.nucengdes.2017.02.015.
- LEMES, M., SOBA, A. y DENIS, A., 2015. An empirical formulation to describe the evolution of the high burnup structure. *Journal of Nuclear Materials*, vol. 456, pp. 174-181. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2014.09.048.
- MANNGÅRD, T., JERNKVIST, L.O. y MASSIH, A.R., 2011. Evaluation of Loss-of-Coolant Accident Simulation Tests with the Fuel Rod Analysis Code FRAPTRAN-1.4, Quantum Tech. Report TR11-008v1. . S.l.:
- MARKIEWICZ, M.E., 1988. Experiments on Ballooning in Pressurized and Transiently Heated Zircaloy-4 Tubes Kernforschungszentrum Karlsruhe. [en línea], Disponible en: https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:19068773.
- MATPRO—VERSION11, 1979. A handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior. En: D.L. HAGRMAN y G.A. REYMANN (eds.), *NUREG/CR-0497, TREE-1280*. S.l.: s.n.,
- OLANDER, D.R., 1976. *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*. S.l.: U.S. Dept. of Commerce, No. TID-26711-P1. ISBN 978-0870790317.
- PEREZ-FERÓ, E., GYORI, C., MATUS, L., VASÁROS, L., HÓZER, Z., WINDBERG, P., MARÓTI, L., HORVÁTH, M., NAGY, I., PINTÉR-CSORDÁS, A. y NOVOTNY, T., 2010. Experimental database of E110 claddings exposed to accident conditions. *Journal of Nuclear Materials*, vol. 397, no. 1-3, pp. 48-54. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2009.12.005.
- POWERS, D.A.A. y MEYER, R.O.O., 1979. Evaluation of Simulated-LOCA Tests That Produced Large Fuel Cladding Balloning US NRC Report NUREG-0536. . S.l.:
- RICE, J.R., 1968. Mathematical Analysis in the Mechanics of Fracture. En: H. LIEBOWITZ

- (ed.), *Mathematical Fundamentals*. New York: Academic Press, pp. 191-311. ISBN 0148-0227.
- SOBA, A., 2007. *Simulación del comportamiento termomecánico de una barra combustible en operación*. S.I.: Universidad de Buenos Aires.
- SOBA, A. y DENIS, A., 2008. Simulation with DIONISIO 1.0 of thermal and mechanical pellet-cladding interaction in nuclear fuel rods. *Journal of Nuclear Materials*, vol. 374, no. 1-2. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2007.06.020.
- SOBA, A. y DENIS, A., 2015. DIONISIO 2.0: New version of the code for simulating a whole nuclear fuel rod under extended irradiation. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 292. ISSN 00295493. DOI 10.1016/j.nucengdes.2015.06.008.
- SOBA, A., DENIS, A., ROMERO, L., VILLARINO, E. y SARDELLA, F., 2013. A high burnup model developed for the DIONISIO code. *Journal of Nuclear Materials* [en línea], vol. 433, no. 1-3, pp. 160-166. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2012.08.016. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.08.016>.
- SOBA, A., LEMES, M., GONZÁLEZ, M.E., DENIS, A. y ROMERO, L., 2014. Simulation of the behaviour of nuclear fuel under high burnup conditions. *Annals of Nuclear Energy* [en línea], vol. 70, pp. 147-156. ISSN 18732100. DOI 10.1016/j.anucene.2014.03.004. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2014.03.004>.
- VAN UFFELEN, P., GYORI, C., SCHUBERT, A., VAN DE LAAR, J., HÓZER, Z. y SPYKMAN, G., 2008. Extending the application range of a fuel performance code from normal operating to design basis accident conditions. *Journal of Nuclear Materials*, vol. 383, no. 1-2, pp. 137-143. ISSN 00223115. DOI 10.1016/j.jnucmat.2008.08.043.
- VASÁROS, L. y MATUS, L., 1999. Steam oxidation of Zr-alloys with H content, release of absorbed hydrogen. *5th International QUENCH Workshop*. S.I.: s.n.,
- XU, X.P. y NEEDLEMAN, A., 1994. Numerical simulations of fast crack growth in brittle solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 42, no. 9, pp. 1397-1434. ISSN 00225096. DOI 10.1016/0022-5096(94)90003-5.
- YEGOROVA, L.A., U.S. NUCLEAR REGULATORY COMMISSION. OFFICE OF NUCLEAR REGULATORY RESEARCH., U.S. NUCLEAR REGULATORY COMMISSION., INSTITUT DE PROTECTION ET DE SURETÉ NUCLÉAIRE (FRANCE) y RUSSIA (FEDERATION). MINISTERSTVO NAUKI I TEKHNICHESKOĬ POLITIKI., 1999. Data base on the behavior of high burnup fuel rods with Zr-1% Nb cladding and UO₂ fuel (VVER Type) under reactivity accident conditions, US NRC Report NUREG/IA-0156. *International agreement report*. S.I.: