Mecánica Computacional Vol XL, págs. 1257-1266 (artículo completo) F.A. Avid, L.C. Bessone, P. Gamazo, J.J. Penco, M.A. Pucheta, M.A. Storti (Eds.) Concordia, 6-9 Noviembre 2023

## INCORPORACIÓN DE NUEVOS MODELOS DE HINCHAMIENTO Y LIBERACIÓN DE GASES DE FISIÓN AL CÓDIGO DE COMBUSTIBLE DIONISIO

# INCORPORATION OF NEW SWELLING AND FISSION GAS RELEASE MODELS INTO THE DIONISIO NUCLEAR FUEL CODE

## Francisco Rotea<sup>a</sup>, Mauricio E. Cazado<sup>a,b,c</sup> y Alejandro Soba<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup>Instituto Sábato, Universidad Nacional de San Martín/Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San Martín, Buenos Aires, Argentina, <a href="https://www.isabato.edu.ar/">https://www.isabato.edu.ar/</a>

<sup>b</sup>Sección Códigos y Modelos, Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear, Comisión Nacional de Energía Atómica, Av. Gral. Paz 1499, B1650KNA San Martín, Buenos Aires, Argentina, <a href="http://www.cnea.gov.ar/">http://www.cnea.gov.ar/</a>

<sup>c</sup>Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Godoy Cruz 2290, CABA, Buenos Aires, Argentina, https://www.conicet.gov.ar/

Palabras clave: Hinchamiento, liberación de gases de fisión, dióxido de uranio, DIONISIO.

**Resumen.** En este trabajo se presenta la incorporación de un nuevo módulo al código de combustible DIONISIO, dedicado al modelado del hinchamiento debido a productos sólidos y gaseosos de fisión, así como también del fenómeno de liberación de gases hacia el volumen libre de la barra combustible. En una primera instancia, los modelos fueron implementados y testeados en forma separada, para luego pasar a formar parte del código, integrados al funcionamiento general. Para analizar el grado de mejoras obtenidas con la nueva implementación, se realizaron diversas simulaciones de barras completas, correspondientes a los experimentos CONTACT y RISØ-3. Los resultados obtenidos muestran que la nueva subrutina produce una solución más precisa en comparación con los datos experimentales. Por último, los algoritmos utilizados para desarrollar esta nueva subrutina son más eficaces desde el punto de vista computacional, con lo cual se logró acelerar significativamente los tiempos de ejecución.

Keywords: Swelling, fission gas release, uranium dioxide, DIONISIO

**Abstract.** This paper presents the incorporation of a new module into the DIONISIO nuclear fuel code, dedicated to modeling swelling due to solid and gaseous fission products, as well as the fission gas release phenomenon. The models were initially tested separately and then integrated into the general code. To evaluate the performance of the new module, simulations were conducted on complete rods that corresponded to the CONTACT and RISØ-3 series of experiments. The results show that the new subroutine produces a more accurate solution compared to experimental data. Additionally, the algorithms used to develop the subroutine are more computationally efficient than the previous model implementation, which has led to a significant reduction in execution times.

## 1. INTRODUCCIÓN

Entre los múltiples fenómenos fisicoquímicos que se producen en una pastilla de UO2 sometida a irradiación, el hinchamiento es uno de los mecanismos más influyentes en los cambios dimensionales de dicha pastilla combustible. El hinchamiento se produce a partir de la acumulación de productos de fisión sólidos y gaseosos generados durante la irradiación, y resulta en una expansión volumétrica con efectos perjudiciales para la vida útil del combustible. Por un lado, facilita el contacto entre la pastilla y la vaina, creando zonas de alta solicitación mecánica. Por otra parte, se reduce la conductividad térmica del combustible, lo cual implica mayores temperaturas en la pastilla, acelerando todos los procesos térmicamente activados. Además, el fenómeno de hinchamiento por productos gaseosos se encuentra directamente relacionado a la liberación de gases de fisión hacia el volumen libre de la barra combustible, lo cual conlleva nuevamente a efectos negativos, tales como el aumento en la presión interna de la barra y la degradación de la conductividad térmica en el gap entre la pastilla y la vaina. Estas razones hacen que el modelado del hinchamiento y de la liberación de gases de fisión sean parte fundamental en la predicción del desempeño termomecánico de combustibles nucleares bajo irradiación mediante códigos de combustible.

En este trabajo se presenta la incorporación de nuevos modelos mecanísticos para la simulación del hinchamiento y la liberación de gases al código de combustible DIONISIO, desarrollado íntegramente por la Sección Códigos y Modelos de la Gerencia Ciclo del Combustible Nuclear de la Comisión Nacional de Energía Atómica. El código permite simular el comportamiento de combustibles de reactores de potencia y de investigación en condiciones de operación normal y de accidentes sobre un dominio compuesto por una pastilla y el segmento de vaina y gap correspondientes. El modelo de hinchamiento incorporado se basa en un modelo presentado en un trabajo anterior (Rotea et al., 2022), que fue validado frente a resultados experimentales disponibles en la literatura funcionando de manera aislada. Este modelo fue extendido para considerar el efecto de los productos sólidos de fisión y la liberación de gases. Luego, una vez acoplado al código DIONISIO, se simularon dos experimentos sobre barras completas, cuyos datos están disponibles en las bibliotecas que el Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) ofrece a los grupos de investigación que participan de sus programas (NEA Data Bank). Se trata de la serie de experimentos CONTACT, compuesto por tres barras combustibles, y los experimentos RISØ-3, compuesto por 11 barras combustibles.

## 2. HINCHAMIENTO

En la presente sección se detallan los modelos de hinchamiento sólido y gaseoso implementados. Una descripción más detallada del módulo de hinchamiento por productos gaseosos se encuentra en Rotea et al. (2022).

## 2.1. Hinchamiento por productos gaseosos

Aproximadamente un 30 % de los productos de fisión creados durante la operación normal de un reactor son gases nobles, Xe y Kr. Como la solubilidad de estos átomos en la red es muy baja (Konings, 2012), los mismos tienden a precipitar formando burbujas en el interior del grano (burbujas intragranulares) o a difundir por la red cristalina hacia los bordes de grano, en donde pueden precipitar en forma de burbujas intergranulares o tomar caminos rápidos de difusión hacia el exterior de la pastilla. Como la densidad del gas dentro de las burbujas es menor que la del combustible sólido, los átomos de gas que se encuentran dentro de las burbujas ocupan un volumen mayor que el de los átomos físiles que reemplazaron (Olander, 1976). Esto produce

un hinchamiento que resulta ser mayor que la expansión volumétrica que resultaría en el caso que los átomos de gas se hubieran mantenido en solución en la matriz del combustible.

Las burbujas intragranulares alcanzan tamaños del orden de unos pocos nanómetros. Su modelado contempla la resolución de la ecuación de difusión en coordenadas esféricas teniendo en cuenta la producción de átomos de gas debido a los eventos de fisión, así como también los procesos de nucleación de burbujas, su crecimiento debido a la acumulación de átomos de gas, y su destrucción debido a la interacción con fragmentos energéticos de fisión. Por otra parte, las burbujas intergranulares tienden a alcanzar tamaños mayores, tomando valores de cientos de nanómetros, con lo cual representan la mayor contribución al cambio de volumen del combustible (Massih y Forsberg, 2008). Para su modelado, se considera que los átomos de gas disuelto que llegan al borde de grano pasan a formar parte de burbujas con morfología lenticular de manera inmediata. El crecimiento de las burbujas se da por esta acumulación de átomos de gas, a la que también se le suma la absorción de vacancias controlada por difusión. Eventualmente, el crecimiento de estas burbujas hará que comiencen a interferir mecánicamente unas con otras. Este fenómeno, denominado coalescencia, da como resultado una menor cantidad de burbujas pero de mayor tamaño. La interconexión de las burbujas intergranulares genera "redes de túneles" o un camino de percolación, a partir del cual se puede producir la liberación de gases hacia el exterior del combustible. Este fenómeno se discute en la Sección 3.

## 2.2. Hinchamiento por productos sólidos

A diferencia de los productos gaseosos de fisión, los productos sólidos no precipitan en forma de burbujas, con lo cual se los suele considerar de manera separada. Según Olander (1976), los productos sólidos de fisión que se generan durante la irradiación del combustible pueden ser clasificados en:

- Productos sólidos solubles. Por ejemplo: Y, Zr, La, tierras raras (Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd).
- Inclusiones metálicas. Por ejemplo: Mo, Ru, Tc, Rh, Pd.
- Inclusiones de óxidos alcalino-térreos. Por ejemplo: BaZrO<sub>3</sub> y SrZrO<sub>3</sub>.
- Sólidos iónicos. Por ejemplo: I, Te, Cs, Rb, Ge, As, Se, Br, Ag, Cd, In, Sn, Sb.

El hinchamiento debido a productos sólidos se puede calcular a partir del volumen parcial  $(v_i)$  de cada elemento mencionado como:

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{\text{sol}} = \left(\sum_{\text{sol}} Y_i \frac{v_i}{v_U} - 1\right) \text{Bu}$$
(1)

donde  $Y_i$  es el rendimiento de cada producto de fisión,  $v_U$  es el volumen de cada molécula de  $UO_2$  y Bu es el quemado.

En base a estimaciones de los cambios de volumen en la matriz introducidos por la presencia de los distintos productos sólidos, Olander (1976) obtiene la siguiente expresión simplificada para el hinchamiento:

$$\left(\frac{\Delta V}{V_0}\right)_{\text{sol}} = 0.32 \cdot \text{Bu} \tag{2}$$

donde el quemado Bu se encuentra en unidades de FIMA.

Es importante tener en cuenta las limitaciones de este modelo. En primer lugar, el cálculo considera una tasa de fisiones constante, lo cual hace que el quemado dependa linealmente del tiempo de irradiación, y haciendo que la concentración relativa de cada producto de fisión aumente linealmente con el quemado. Un modelo más realista debería tener en cuenta la evolución de la composición del combustible de acuerdo a la historia de potencia a la que fue sometido, considerando la evolución de las especies estables e inestables, sus cadenas de decaimiento, etc. Por otra parte, este modelo no tiene en cuenta la migración de los productos sólidos de fisión. Por último, los volúmenes parciales de cada elemento y sus estados físico-químicos sólo pueden ser estimados, y cuentan con un nivel de incertidumbre considerable. Por estas razones, se suele estimar una banda de error de ±50 % del valor pronosticado para el hinchamiento sólido (Olander, 1976).

## 3. LIBERACIÓN DE GASES DE FISIÓN

Como se mencionó en la Sección 2.1, el crecimiento y la interacción mecánica que se da entre las burbujas intergranulares conducen a la creación de una porosidad abierta que puede concluir en la liberación de los gases de fisión hacia el exterior de la pastilla. El modelado de este fenómeno, basado en el trabajo de Pastore et al. (2013), se simplifica a partir de un principio de saturación del borde de grano; luego de que se produce la interconexión de burbujas, llega un punto donde el parámetro de cobertura fraccional F (es decir, la fracción de área de borde de grano que se encuentra cubierta por burbujas) alcanza un valor de saturación  $F_{sat}$ :

$$F = N_{qf} A_{qf} = F_{c,sat} \tag{3}$$

donde  $N_{gf}$  es la concentración de burbujas intergranulares [burbujas/m²] y  $A_{gf}$  es el área de una burbuja proyectada sobre el borde de grano [m²/burbuja]. Desde el punto de vista de la física del proceso, luego de alcanzada la condición de saturación se produce la generación de los canales debido a la interconexión de las burbujas, con lo cual comienza la liberación de gases. La liberación de gas hace que los canales se despresuricen y colapsen, generando una disminución de la concentración de burbujas, lo cual a su vez disminuye el parámetro de cobertura fraccional ( $F_c < F_{c,sat}$ ). Sin embargo, las burbujas siguen creciendo por los procesos de difusión, haciendo que se vuelva a alcanzar nuevamente la condición de saturación, repitiendo el proceso previamente mencionado y manteniendo el parámetro de cobertura fraccional promedio aproximadamente constante. En base a datos experimentales, se obtiene que la condición de saturación se produce cuando  $F_{c,sat} = 0,5$  (Veshchunov, 2008).

En el modelo, una vez que se llega a la saturación, tanto la concentración de burbujas como el área proyectada deben balancearse de forma tal que:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = 0\tag{4}$$

Luego, la tasa de disminución en la concentración de burbujas intergranulares debido a la liberación de gases está dada por:

$$\frac{\mathrm{d}N_{gf}}{\mathrm{d}t} = -\frac{N_{gf}}{A_{gf}}\frac{\mathrm{d}A_{gf}}{\mathrm{d}t} \tag{5}$$

Una vez alcanzada la condición de saturación, la misma se debe mantener en todo momento. Esto implica que una fracción del gas intergranular es liberada para compensar el crecimiento de las burbujas. Como se puede observar en la Ecuación (5), esta fracción de gas intergranular se

modela como una disminución en la concentración de burbujas intergranulares. La ecuación general que gobierna la concentración de burbujas, teniendo en cuenta el modelo de coalescencia propuesto por White (2004), será entonces:

$$\frac{\mathrm{d}N_{gf}}{\mathrm{d}t} = \begin{cases}
-2N_{gf}^2 \frac{\mathrm{d}A_{gf}}{\mathrm{d}t}, & \text{si } F < F_{sat} & \text{(coalescencia)} \\
-\frac{N_{gf}}{A_{gf}} \frac{\mathrm{d}A_{gf}}{\mathrm{d}t}, & \text{si } F = F_{sat} & \text{(liberacion de gases)}
\end{cases}$$
(6)

Por último, como cada burbuja contiene  $n_g$  átomos de gas de fisión, se puede calcular la liberación de gases de fisión como:

$$\frac{\mathrm{d}n_{fgr}}{\mathrm{d}t} = \begin{cases} 0, & \text{si } F < F_{sat} \\ n_g \frac{N_{gf}}{A_{qf}} \frac{\mathrm{d}A_{gf}}{\mathrm{d}t}, & \text{si } F = F_{sat} \end{cases}$$
(7)

donde  $n_{fgr}$  es el número de átomos de gas de fisión por unidad de área de borde grano que se liberan al volumen libre de la barra combustible. Es importante destacar que este enfoque permite tener en cuenta el acople existente entre el hinchamiento y el fenómeno de liberación de gas: una vez que comienza la liberación, la tasa de hinchamiento intergranular se verá reducida debido a que parte de ese gas está siendo liberado del borde de grano.

Por otra parte, existe otro mecanismo de liberación que no involucra la difusión, y que es importante considerarlo en transitorios rápidos de potencia. Este mecanismo resulta en una liberación repentina de los gases de fisión debido a micro-fisuras que se producen en los bordes de grano por el efecto de las tensiones térmicas y la presión del gas de las burbujas. Las micro-fisuras producen una separación de los bordes de grano, haciendo que el gas que estaba contenido en los bordes de grano sea liberado rápidamente. Este fenómeno es tenido en cuenta por el modelo mediante la implementación del modelo de micro-fisuras desarrollado por Barani et al. (2017). Este modelo contempla tanto la pérdida del gas presente en las burbujas intergranulares, así como también la pérdida de la capacidad del borde de grano de almacenar gas una vez fisurado.

## 3.1. Validación del modelo de liberación de gases de fisión

Para validar el modelo presentado en la sección previa funcionando de manera aislada (es decir, sin el acople con el código DIONISIO), se utilizan dos series de experimentos disponibles en la literatura. Por un lado, se tienen los datos experimentales de Zimmermann (1977, 1978), que presenta resultados de liberación de gases de fisión para combustibles de UO<sub>2</sub> de alta densidad irradiados hasta alcanzar quemados de entre 0.8 y 9.8 at %<sup>1</sup>. Esta serie de experimentos cuenta con la ventaja de comprender un amplio espectro de liberación de gases (entre 1 y 95 %) así como también distintas condiciones de presión hidrostática (entre 0 y 50 MPa). Por otra parte, se consideran los resultados experimentales obtenidos por Vitanza et al. (1979). Este trabajo introduce el concepto de "límite de Vitanza", un criterio utilizado para expresar el quemado necesario para obtener un 1 % de liberación de gases (es decir, el "tiempo de incubación" necesario para el comienzo de la liberación) para distintas temperaturas de la línea central del combustible. En la Figura 1 se muestran los resultados de la validación con ambas bases de datos.

 $<sup>^1</sup> Un$  nivel de quemado del 1 % de los átomos iniciales de uranio se corresponde aproximadamente a 8.27 MWd/kgUO $_2$ .

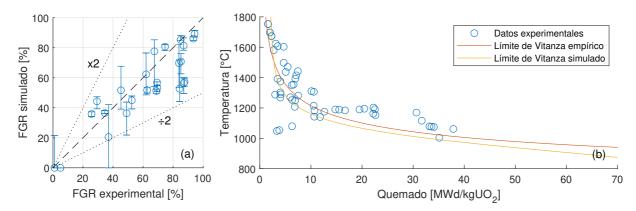


Figura 1: Validación del modelo de liberación de gases de fisión (FGR) a partir de (a) los datos experimentales de Zimmermann (1977, 1978) y (b) los datos experimentales de Vitanza et al. (1979).

Como se puede observar, el modelo logra un buen acuerdo con los datos experimentales obtenidos por Zimmermann, teniendo en cuenta que el rango de tolerancia asociado típicamente a predicciones de liberación de gases a partir de códigos de combustible consiste en un factor de  $\pm 2$  (Pastore et al., 2015). Con respecto al límite de Vitanza, se puede observar que el modelo logra un buen acuerdo si se lo compara con el límite empírico que surge del ajuste a los datos experimentales. El modelo logra reproducir correctamente la dependencia del tiempo de incubación con la temperatura: a mayores temperaturas, se necesitan menores quemados para dar comienzo a la liberación de gases, ya que el aumento en los coeficientes de difusión en volumen y borde de grano hace que se alcance más rápidamente la condición de saturación. Por otra parte, menores temperaturas implican mayores tiempos de incubación.

## 4. RESULTADOS

Luego de la validación de cada uno de los modelos presentados en este trabajo en forma autónoma, se procedió a incorporarlos al código DIONISIO para testear su respuesta en conjunción con el resto de los modelos termomecánicos del código. La validación se realizó utilizando barras combustibles completas, inter comparando todos los resultados medidos en las mismas. Se tomaron para esto dos series de experimentos disponibles en la literatura: los experimentos IF-PE/CONTACT y los experimentos IFPE/RISOE-3. En el primero, se pone énfasis en el estudio del contacto mecánico entre el combustible y la vaina (*pellet-cladding mechanical interaction* o PCMI), mientras que en el segundo se analiza la liberación de gases de fisión (*fission gas release* o FGR). Ambos fenómenos se encuentran altamente relacionados con el modelo de hinchamiento y liberación de gases de fisión desarrollados en este trabajo.

## 4.1. CONTACT

La serie de experimentos IFPE/CONTACT fue un programa de pruebas realizadas en el reactor Siloe (Grenoble, Francia) por parte de la Comisión de Energía Atómica de Francia (CEA) y Framatome. Los experimentos fueron realizados en barras cortas compuestas de cinco pastillas de UO<sub>2</sub> y vainas de Zr-4, en un diseño PWR típico de 17x17. Cada barra fue instrumentada con termocuplas para la medición de la temperatura en la línea central del combustible, un instrumento para medir el diámetro exterior de la vaina, e instrumentos para medir la liberación de gases de fisión, entre otros. Estos resultados experimentales permiten la comparación con el modelo de hinchamiento y liberación de gases de fisión implementados en este trabajo; en particular, los resultados de las mediciones del diámetro exterior de la vaina permiten detectar

el inicio del contacto mecánico entre el combustible y la vaina, el cual se genera como producto de los cambios dimensionales tanto de la pastilla (debido al hinchamiento y la densificación) como de la vaina (debido a los fenómenos de *creep* y crecimiento por irradiación).

En la Figura 2 se muestran los resultados para la temperatura de la línea central del combustible en dos experimentos de la serie CONTACT. Los modelos de hinchamiento y liberación de gases tienen influencia sobre el cálculo de la temperatura, ya que los gases Xe y Kr degradan la conductividad térmica tanto en la pastilla como en el gap. Como se puede observar, la predicción realizada por DIONISIO resulta ser satisfactoria para ambos experimentos, con lo cual se puede deducir que la influencia de los modelos implementados sobre la conductividad térmica resulta ser aceptable.

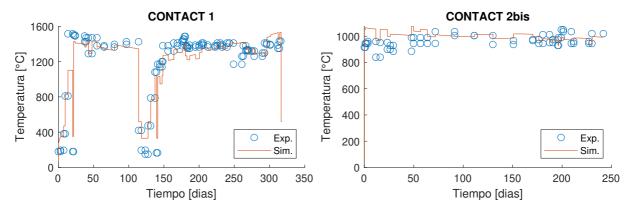


Figura 2: Datos experimentales y resultados simulados para la temperatura de la línea central del combustible en dos experimentos de la serie IFPE/CONTACT.

En la Figura 3 se muestran los resultados para la liberación de gases de fisión. Se puede notar que el experimento CONTACT 1 presenta mayores niveles de liberación debido a las mayores temperaturas alcanzadas, y que se logra un buen ajuste a los datos experimentales. Por otra parte, el experimento CONTACT 2bis resulta en una sobre-estimación de la liberación. Es importante destacar que el rango de liberación de 0 a 10 % resulta ser el más complejo de simular mediante códigos de combustible, con lo cual la tolerancia asociada para las predicciones se aumenta a un factor  $\pm 3$  (Pastore et al., 2015). De todas maneras, se puede notar que el tiempo de incubación es simulado correctamente.

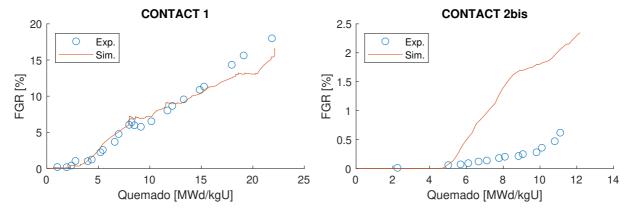


Figura 3: Datos experimentales y resultados simulados para la liberación de gases de fisión en dos experimentos de la serie IFPE/CONTACT.

Por último, en la Figura 4 se muestran los resultados para la medición de la variación del

diámetro original de la vaina en función del quemado. En el caso del experimento CONTACT 1 existe una reducción inicial del diámetro debido a los efectos del *creep* y el crecimiento por irradiación, seguido de una expansión gradual luego de alcanzado el contacto pastilla-vaina por efecto del hinchamiento, a un nivel de quemado de ~8 MWd/kgU. En el caso del experimento CONTACT 2bis, cuyas condiciones térmicas son menos demandantes que el caso anterior, el contacto se produce hacia el final del período de irradiación (~10 MWd/kgU), luego de una disminución progresiva del diámetro externo de la vaina por las mismas razones citadas previamente. Se puede notar que, aunque la simulación sigue la misma tendencia que los datos experimentales, se predice una mayor reducción del diámetro de la vaina.

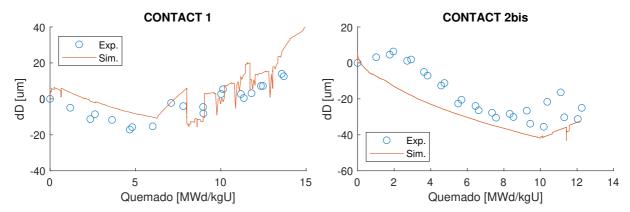


Figura 4: Datos experimentales y resultados simulados para la variación del diámetro externo de la vaina en dos experimentos de la serie IFPE/CONTACT.

#### 4.2. RISØ-3

El Laboratorio Nacional Risø (Dinamarca) llevó a cabo tres programas de irradiación donde se involucran rampas de potencia con el objetivo de investigar la liberación de gases de fisión y los cambios en la microestructura del combustible. El tercer proyecto, denominado IFPE/RISOE-3, se desarrolló entre 1986 y 1990 y es de especial interés para la validación de este trabajo, ya que cuenta con mediciones de la evolución de la presión, la temperatura central del combustible y la liberación de gases durante las distintas rampas de potencia. Estos datos son obtenidos a partir de una re-fabricación del combustible luego de un período de irradiación base, para ser instrumentado con termocuplas y/o transductores de presión. En general, en las rampas se alcanzaron potencias lineales de entre 350-400 W/cm, con tiempos que van desde unas pocas horas hasta seis días de duración.

En la Figura 5 (a) se muestra la comparación entre los resultados obtenidos experimentalmente y mediante la simulación computacional para la liberación de gases de fisión al final del período de irradiación. En general, se puede observar que el modelo tiende a subestimar el nivel de liberación al final del período de irradiación, sin embargo, la mayor parte de los datos se encuentra dentro de la banda de incertidumbre asociada típicamente para las simulaciones de liberación de gases mediante códigos de combustible. Por otra parte, una de las ventajas que aporta este nuevo modelo se vincula con una reducción en el tiempo de ejecución de cada experimento. Esta disminución se debe, principalmente, a la implementación de un nuevo método para la resolución de la ecuación de difusión (Forsberg y Massih, 1985b,a). Este algoritmo es significativamente más eficiente que el método de resolución en el que estaba basado el modelo anterior —que consistía en la utilización de un esquema de modelos finitos unidimensional aplicado sobre el radio del grano esférico—, sin que esto implique una gran pérdida en la precisión.

A modo de demostración, en la Figura 5 (b) se puede observar el tiempo de ejecución total de cada experimento, donde el único cambio en los parámetros de entrada a DIONISIO consiste en la utilización del modelo anterior o el modelo desarrollado en este trabajo para el hinchamiento y liberación de gases de fisión. Las simulaciones fueron realizadas en una computadora personal que cuenta con un procesador Intel Core i5-12600K 12th Gen 3.7 GHz (16 CPUs) y 32GB de RAM. Se puede notar que el modelo implementado logra una disminución en los tiempos de ejecución en todos los experimentos analizados. El tiempo de ejecución promedio para todos los experimentos es de 139.72 s para este trabajo, mientras que para el modelo anterior se corresponde con 323.33 s, lo cual implica una reducción del 56.8 %. Esta reducción en el tiempo de ejecución resulta ser significativa, en particular en aquellos casos donde se deben simular series compuestas por varios experimentos, experimentos complejos con varios pasos de potencia o número de sectores, o si se deben correr varias simulaciones para hacer estudios de sensibilidad.

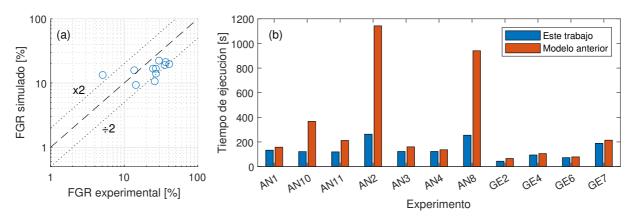


Figura 5: (a) Datos experimentales y resultados simulados para la liberación de gases de fisión en la serie de experimentos IFPE/RISOE-3, y (b) comparación de los tiempos de ejecución de cada experimento utilizando el modelo implementado en este trabajo y el modelo utilizado previamente en DIONISIO.

## 5. CONCLUSIONES

En este trabajo se extiende el modelo de hinchamiento gaseoso presentado en un trabajo anterior, (Rotea et al., 2022) de manera de incluir el hinchamiento debido a los productos sólidos de fisión y el fenómeno de liberación de gases. El modelo de liberación de gases fue validado funcionando de manera aislada a partir de diferentes datos experimentales disponibles en la literatura, obteniéndose un acuerdo satisfactorio. Luego, todos los modelos fueron incorporados al código DIONISIO para comprobar su funcionamiento en conjunto con todas las subrutinas incluidas en el mismo. Para validar el modelo funcionando en manera conjunta, se escogieron dos series de experimentos realizados sobre barras completas que cuentan con datos experimentales de temperatura, liberación de gases y variación del diámetro de la vaina. Los resultados obtenidos indican que el nuevo modelo logra un buen acuerdo con los datos experimentales. Por último, se realizó una comparación del tiempo de ejecución total requerido por cada experimento utilizando el modelo desarrollado en este trabajo y el modelo previo de hinchamiento y liberación de gases incluido en DIONISIO. Se comprobó que el nuevo modelo logra una reducción significativa del tiempo de ejecución de cada simulación.

#### REFERENCIAS

- Barani T., Bruschi E., Pizzocri D., Pastore G., Van Uffelen P., Williamson R.L., y Luzzi L. Analysis of transient fission gas behaviour in oxide fuel using bison and transuranus. *Journal of Nuclear Materials*, 486:96–110, 2017.
- Forsberg K. y Massih A.R. Diffusion theory of fission gas migration in irradiated nuclear fuel UO<sub>2</sub>. *Journal of Nuclear Materials*, 135:140–148, 1985a.
- Forsberg K. y Massih A.R. Fission gas release under time-varying conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 127:141–145, 1985b.
- IFPE/CONTACT. PWR Fuel Performance Tests Siloe Reactor. https://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/NEA-1595/. 2003.
- IFPE/RISOE-3. Fuel Performance Data from 3rd Risoe Fission Gas Release. https://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/NEA-1493/. 2005.
- Konings R.J.M., editor. Comprehensive Nuclear Materials, Volume 3: Advanced Fuels/Fuel Cladding/Nuclear Fuel Performance Modeling and Simulation, Chapter 3.19: Oxide Fuel Performance Modeling and Simulations. Elsevier Science, 2012. ISBN 978-0-08-056033-5.
- Massih A.R. y Forsberg K. Calculation of grain boundary gaseous swelling in UO<sub>2</sub>. *Journal of Nuclear Materials*, 377:406–408, 2008.
- NEA Data Bank. Computer Program Services. https://www.oecd-nea.org/dbcps/. 2023.
- Olander D.R. *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*. Technical Information Center, Office of Public Affairs, Energy Research and Development Administration, 1976. ISBN 0-87079-031-5.
- Pastore G., Luzzi L., Di Marcello V., y Van Uffelen P. Physics-based modelling of fission gas swelling and release in uo<sub>2</sub> applied to integral fuel rod analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 256:75–86, 2013.
- Pastore G., Swiler L.P., Hales J.D., Novascone S.R., Perez D.M., Spencer B.W., Luzzi L., Van Uffelen P., y Williamson R.L. Uncertainty and sensitivity analysis of fission gas behavior in engineering-scale fuel modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 456:398–408, 2015.
- Rotea F., Cazado M., y Soba A. Avances en el modelado del hinchamiento de pastillas combustibles bajo irradiación. En *XXXVIII Congreso Argentino de Mecánica Computacional*, páginas 1142–1150. MECOM, 2022. ISSN 2591–3522.
- Veshchunov M.S. Modelling of grain face bubbles coalescence in irradiated UO<sub>2</sub> fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 374:44–53, 2008.
- Vitanza C., Kolstad E., y Graziani U. Fission gas release from UO<sub>2</sub> pellet fuel at high burn-up. En *Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance*, páginas 361–366. Portland, OR, 1979.
- White R.J. The development of grain-face porosity in irradiated oxide fuel. *Journal of Nuclear Materials*, 325:61–77, 2004.
- Zimmermann H. Untersuchungen zum schwellen und spaltgasverhalten in oxidischem kernbrennstoff unter neutronenbestrahlung. Informe Técnico KFK 2467, Karlsruhe Research Center, Karlsruhe, Alemania, 1977.
- Zimmermann H. Investigations on swelling and fission gas behaviour in uranium dioxide. *Journal of Nuclear Materials*, 75:154–161, 1978.