



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
Ingeniería en Energía – Sistemas nucleoelectrónicos

**TERMOMECÁNICA DE LA BARRA DE COMBUSTIBLE NUCLEAR Y
ACOPLAMIENTO MULTIESCALA Y MULTIFÍSICO EN LA PLATAFORMA
AZTLAN**

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
JAVIER CENTENO PÉREZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. GILBERTO ESPINOSA PAREDES, UAM IZTAPALAPA
COMITÉ TUTOR
DR. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE, FI UNAM
DRA. CECILIA MARTÍN DEL CAMPO MÁRQUEZ, FI UNAM
DR. ARMANDO MIGUEL GÓMEZ TORRES, ININ
DR. RODOLFO VÁZQUEZ RODRÍGUEZ, UAM IZTAPALAPA

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO, A DICIEMBRE DE 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

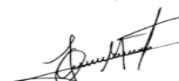
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO

Presidente: Dr. Francois Lacouture Juan Luis



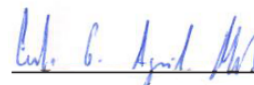
Secretario: Dr. Gómez Torres Armando Miguel



Vocal: Dr. Espinosa Paredes Gilberto



1er. Suplente: Dr. Aguilar Madera Carlos Gilberto



2do. Suplente: Dra. Pérez Valseca Alejandría Denisse



Lugar donde se realizó la tesis: CIUDAD UNIVERSITARIA, FACULTAD DE INGENIERÍA.

TUTOR DE TESIS:

GILBERTO ESPINOSA PAREDES



FIRMA

DEDICATORIA

Dedico esta Tesis a mi padre, Emilio Centeno Zarate Q.E.P.D; a mi madre, Juana Pérez Palacios; a mis abuelas: Julia Zarate Paz Q.E.P.D, Julia Palacios Solís; a mi hermana, Dalia Emilia Centeno Pérez y a mi sobrino, Diego Alejandro Acevedo Centeno.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco profundamente a mi asesor, el Dr. Gilberto Espinosa Paredes, a la Dra. Alejandría Denisse Pérez Valseca y al Dr. Carlos Gilberto Aguilar Madera por su invaluable ayuda, comprensión e infinita paciencia, así como también al Dr. Erick Hernández Herrera.

A mi comité tutorial: el Dr. Juan Luis François Lacouture, la Dra. Cecilia Martín del Campo Márquez, el Dr. Armando Miguel Gómez Torres y el Dr. Rodolfo Vázquez Rodríguez.

En especial al Dr. Armando Miguel Gómez Torres por su invaluable ayuda en la elaboración y publicación del artículo derivado de este trabajo de investigación.

También a mis amigos, compañeros y conocidos.

Finalmente, y muy importante al Consejo Nacional de Ciencias y Tecnología (CONACyT) por la beca con número 470869, que me otorgó durante la realización de este trabajo doctoral.

CONTENIDO

| | |
|---|------|
| CONTENIDO..... | III |
| ÍNDICE DE FIGURAS..... | V |
| ÍNDICE DE TABLAS..... | VIII |
| NOMENCLATURA..... | X |
| ACRONIMOS | XVI |
| RESUMEN | XVII |
| 1. Introducción..... | 1 |
| 2. Objetivos..... | 5 |
| 2.1. Objetivos Generales | 5 |
| 2.2. Objetivos Particulares | 5 |
| 3. Planteamiento del problema | 7 |
| 4. Ecuación de desplazamiento..... | 9 |
| 5. Condición de frontera interfaciales..... | 14 |
| 5.1. La condición de frontera debido a la presión de gas..... | 18 |
| 6. Metodología..... | 23 |
| 7. Modelo escalado..... | 28 |
| 7.1 Ecuación de gobierno escalada..... | 30 |

| | |
|---|-----|
| 8. Solución formal para $\tilde{\mathbf{u}}_s$ | 37 |
| 9. Estimación numérica de las variables de cerradura | 45 |
| 10. Ecuación de desplazamiento escalada | 49 |
| 11. Estimación de los módulos escalados | 52 |
| 12. Comparación del modelo directo y el modelo escalado | 58 |
| 12.1 Análisis de malla | 60 |
| 12.2. Experimentos numéricos sin efectos térmicos | 61 |
| 12.3. Análisis termomecánico | 69 |
| 13. Análisis termomecánico de un Reactor Rápido Enfriado con Plomo con un modelo de corridas rápidas. | 77 |
| 13.1 Breve descripción de códigos basados en modelos termomecánicos. | 78 |
| 13.2 Caso de referencia: reactor ALFRED. | 81 |
| 13.3 Modelo matemático..... | 83 |
| 13. 4 Resultados numéricos | 95 |
| Conclusiones | 105 |
| Referencias | 109 |
| A. Coeficientes efectivos..... | 117 |
| B. Problemas de valor a la frontera para las variables de cerradura. | 119 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 5.1. Diagrama esquemático de escalas jerárquicas en un reactor nuclear: Desde la escala del reactor a la microescala de la pastilla de combustible. | 15 |
| Figura 5.2. Volúmenes e interfaces. | 16 |
| Figura 5.3. Fuerzas interfaciales. | 16 |
| Figura 5.4. Desplazamiento en la interface sólido-gas. | 19 |
| Figura 6.1. Volumen representativo (REV) a partir de la escala del poro (microestructura). | 25 |
| Figura 7.1. Diagrama esquemático mostrando las interacciones en la interface solido-gas. | 30 |
| Figura 8.1. Celda Unitaria 3D. (a) Simétrica y (b) Asimétrica. | 42 |
| Figura 9.1. Celda unitaria computacional con 40 000 elementos de dominio. (a) Simétrica y (b) Asimétrica | 46 |
| Figura 9.2. Campos de la variable de cerradura \mathbf{b}_{1s} | 47 |
| Figura 9.3. Campos de la variable de cerradura \mathbf{b}_{2s} | 47 |
| Figura 9.4. Campo de la variable de cerradura S | 48 |
| Figura 12.1. Diagrama esquemático de una pastilla de combustible nuclear. | 59 |
| Figura 12.2. Mallado en la pastilla de combustible. a) malla gruesa con 79124 elementos y b) malla fina con 313624 elementos. | 61 |

| | |
|---|----|
| Figura 12.3. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 1\text{MPa}$ | 62 |
| Figura 12.4. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 2\text{MPa}$ | 64 |
| Figura 12.5. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 1\text{MPa}$ | 66 |
| Figura 12.6. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 2\text{MPa}$ | 67 |
| Figura 12.7. Problema directo: (a) $P_f = 2\text{MPa}$ y (b) $P_f = 2.5\text{MPa}$ | 68 |
| Figura 12.8. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 1\text{MPa}$ | 71 |
| Figura 12.9. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 2\text{MPa}$ | 72 |
| Figura 12.10. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 1\text{MPa}$ | 73 |
| Figura 12.11. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 2\text{MPa}$ | 74 |
| Figura 12.12. Problema directo con efectos térmicos: (a) $P_f = 2\text{MPa}$ y (b) $P_f = 2.5\text{MPa}$ | 76 |

| | |
|--|-----|
| Figura 13.1 A la izquierda plano del núcleo de ALFRED, corte anular. Dimensiones de barra combustible..... | 81 |
| Figura 13.2 Perfiles de temperatura de la pastilla, el huelgo, el encamisado y el plomo, a) perfil axial y b) perfil radial en $z = 0$ m, $z = 0.36$ m y $z = 0.6$ m..... | 91 |
| Figura 13.3 Distribución 2D de la temperatura en Kelvin del modelo de referencia..... | 95 |
| Figura 13.4 Comparación detallada de la distribución del desplazamiento a lo largo de la dirección radial | 95 |
| Figura 13.5 Esfuerzos transversal y axial en la barra combustible, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c)..... | 96 |
| Figura 13.6 Deformación transversal y axial en la barra combustible, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c)..... | 98 |
| Figura 13.7 Desplazamiento radial en el encamisado, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c). | 99 |
| Figura 13.8 Esfuerzo, deformación y desplazamiento para la posición radial del encamisado en las posiciones axiales $z = 0$ m, $z = 0.36$ m y $z = 0.6$ m. | 100 |
| Figura 13.9 Esfuerzo, deformación y desplazamiento del encamisado variando la posición axial para el estado estacionario. | 102 |
| Figura 13.10 Esfuerzo, deformación y desplazamiento del encamisado variando la posición axial para 100%, 75%, 50% y 25% de potencia nuclear. | 104 |

ÍNDICE DE TABLAS

| | |
|--|----|
| Tabla 11.1. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo E_1/E_s y E_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda simétrica y a 1 MPa. | 53 |
| Tabla 11.2. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo E_1/E_s y E_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda simétrica y a 2 MPa. | 53 |
| Tabla 11.3. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo E_1/E_s y E_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda asimétrica y a 1 MPa.. | 54 |
| Tabla 11.4. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo E_1/E_s y E_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda asimétrica y a 2 MPa.. | 55 |
| Tabla 11.5. Componentes del <i>coeficiente de elasticidad interfacial</i> a diferente fracción de volumen para $P_g = 1.0$ MPa..... | 56 |
| Tabla 11.6. Componentes del <i>coeficiente de elasticidad interfacial</i> a diferente fracción de volumen para $P_g = 2.0$ MPa | 57 |
| Tabla 12.1. Valores de E_1/E_s y E_2/E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1$ MPa en una celda simétrica..... | 61 |
| Tabla 12.2. Valores de $s/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1$ MPa | 62 |
| Tabla 12.3. Valores de E_1/E_s y E_2/E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2$ MPa en una celda simétrica..... | 63 |

| | |
|--|----|
| Tabla 12.4. Valores de $s/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda simétrica. | 63 |
| Tabla 12.5. Valores de E_1/E_s y E_2/E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$ en una celda asimétrica. | 64 |
| Tabla 12.6. Valores de $s/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$ en una celda asimétrica. | 65 |
| Tabla 12.7. Valores de E_1/E_s y E_2/E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda asimétrica. | 66 |
| Tabla 12.8. Valores de $s/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda asimétrica. | 66 |
| Tabla 13.1 Principales parámetros de ALFRED, (Grasso, et al., 2014). | 81 |
| Tabla 13.2 Dimensiones geométricas y características del núcleo de ALFRED, (Grasso, et al., 2014). | 82 |
| Tabla 13.3 Propiedades térmicas de la pastilla combustible | 90 |
| Tabla 13.4 Propiedades térmicas del huelgo y del encamisado..... | 90 |
| Tabla 13.5 Propiedades del material del disco 2D para la verificación del modelo | 94 |

NOMENCLATURA

Caracteres Latinos

| | | |
|--------------------|--|--------------------|
| A | Área | $[m^2]$ |
| A | Constante para el cálculo del calor específico de la pastilla combustible. | $[-]$ |
| A_{sg} | Área interfacial dentro del volumen V | $[m^2]$ |
| a | Densidad de área interfacial | $[m^{-1}]$ |
| B | Constante para el cálculo del calor específico de la pastilla combustible. | $[-]$ |
| b_{1s} | Variable de cerradura 1s | $[m]$ |
| b_{2s} | Variable de cerradura 2s | $[m]$ |
| C | Constante de integración | $[-]$ |
| C_1 | Constante de integración 1 | $[-]$ |
| C_2 | Constante de integración 2 | $[-]$ |
| C_3 | Constante de integración 3 | $[-]$ |
| Cp | Calor específico | $[Jkg^{-1}K^{-1}]$ |
| D_h | Diámetro equivalente | $[m]$ |
| e | Tensor de deformación | $[-]$ |
| $e_{\theta\theta}$ | Deformación en la dirección angular | $[-]$ |

| | | |
|----------------|---|---------------------|
| E | Módulo de elasticidad | [Pa] |
| E_{pellet} | Módulo de elasticidad en la pastilla combustible | [Pa] |
| E_s | Módulo de elasticidad de la fracción sólido | [Pa] |
| E_1 | Módulo de elasticidad relacionado con coeficiente de Lammé, 1 | [Pa] |
| E_2 | Módulo de elasticidad relacionado con coeficiente de Lammé, 2 | [Pa] |
| \mathbf{E}_1 | Coficiente efectivo, tensor, 1 | [Pa] |
| \mathbf{E}_2 | Coficiente efectivo, tensor, 2 | [Pa] |
| \mathbf{f} | Fuerza específica | [Nkg^{-1}] |
| F_{Ag} | Fuerza del gas sobre el área de la interface | [Nm^{-2}] |
| F_{Vs} | Fuerza que se ejerce sobre el volumen del sólido | [Nm^{-3}] |
| g | Fase gas | [-] |
| h | Coficiente de transferencia de calor | [$Wm^{-2}K^{-1}$] |
| h_l | Coficiente de transferencia de calor del plomo | [$Wm^{-2}K^{-1}$] |
| h_g | Conductancia del huelgo | [$Wm^{-1}K^{-1}$] |
| \mathbf{I} | Tensor identidad | [-] |
| k | Índice de fase | [-] |
| k | Conductividad térmica | [$Wm^{-1}K^{-1}$] |
| ℓ_k | Longitud característica de la fase k | [m] |
| L | Longitud característica de la pastilla de combustible. | [m] |

| | | |
|-----------------------------|--|--------------------|
| \mathbf{l}_i | Vector para replica la celda unitaria en dirección- i | [-] |
| \mathbf{m}_s | Efectos externos: térmicos, irradiación, quemado, etc. | $[kgm^{-2}s^{-2}]$ |
| m | Función de ponderación | [-] |
| \mathbf{n}_{gs} | Vector normal unitario desde la fase gas a la fase sólida | [-] |
| \mathbf{n}_{sg} | Vector normal unitario desde la fase sólida a la fase gas. | [-] |
| Nu | Número de Nusselt | [-] |
| P | Presión | $[Pa]$ |
| P_0 | Presión del refrigerante | $[Pa]$ |
| P_g | Presión del gas | $[Pa]$ |
| $P_{\text{before contact}}$ | Presión antes del contacto entre pastilla y encamisado | $[Pa]$ |
| P_{contact} | Presión del contacto entre pastilla y encamisado | $[Pa]$ |
| P | Potencia térmica | $[W]$ |
| q''' | Fuente de calor | $[Wm^{-3}]$ |
| r | Radio | $[m]$ |
| r_0 | Longitud característica del volumen de promediado | $[m]$ |
| R_a | Radio del orificio interior de la pastilla combustible | $[m]$ |
| R_f, R_{pellet} | Radio de la pastilla combustible (pellet) | $[m]$ |
| R_{gap} | Radio del huelgo, (gap) | $[m]$ |
| R_{ci} | Radio interno del encamisado, (cladding) | $[m]$ |
| $R_{ci,cold}$ | Radio interno del encamisado en frío. | $[m]$ |

| | | |
|----------------------------------|--|-----------------------|
| R_{co} | Radio externo del encamisado, cladding | [m] |
| $R_{co,cold}$ | Radio externo del encamisado en frío. | [m] |
| R_v | Constante universal de los gases | [$Jmol^{-1}K^{-1}$] |
| s | Fase sólida | [-] |
| S | Variable de cerradura | [-] |
| s | Coefficiente efectivo, vector | [Pam^{-1}] |
| T | Temperatura | [K] |
| T_∞ | Temperatura del refrigerante | [K] |
| T_f | Temperatura de la pastilla combustible | [K] |
| T_g | Temperatura del huelgo | [K] |
| T_c | Temperatura del encamisado | [K] |
| T_l | Temperatura del refrigerante (plomo) | [K] |
| t | Tiempo | [s] |
| u | Desplazamiento | [m] |
| \mathbf{u}_s | Vector de desplazamiento | [m] |
| u_θ | Desplazamiento en la dirección angular | [m] |
| $\langle \mathbf{u}_s \rangle$ | Vector de desplazamiento promediado | [m] |
| $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$ | Vector de desplazamiento promediado intrínseco | [m] |
| $\tilde{\mathbf{u}}_s$ | Desviación espacial | [m] |
| V | Volumen limitado por la superficie | [m^3] |
| V_k | Volumen de la fase k | [m^3] |

| | | |
|-------------------|--|-------------|
| \mathbf{w}_{sg} | Velocidad interfacial | $[ms^{-1}]$ |
| \mathbf{x} | Vector de posición localizado en el centroide de V | $[-]$ |
| \mathbf{y} | Vector que se puede localizarse ambas fases. | $[-]$ |
| \mathbf{y}_k | Punto localizado en la región V asociado con la fase s | $[-]$ |

Caracteres Griegos

| | | |
|---------------------------|---|--------------|
| α_T | Coeficiente de expansión térmico lineal | $[K^{-1}]$ |
| δ_{ij} | Delta de Kronecker | $[-]$ |
| ε_k | Fracción volumen de la fase k . | $[-]$ |
| ε_r^{th} | Deformación térmica radial. | $[-]$ |
| ε_θ^{th} | Deformación térmica circunferencial. | $[-]$ |
| ε_r | Deformación radial. | $[-]$ |
| ε_θ | Deformación circunferencial. | $[-]$ |
| ε_z | Deformación axial. | $[-]$ |
| λ | Coeficiente de Lammé, Lambda | $[Pa]$ |
| μ | Coeficiente de Lammé, Mu | $[Pa]$ |
| ν | Coeficiente de Poisson | $[-]$ |
| ρ | Densidad | $[kgm^{-3}]$ |
| σ | Tensor de esfuerzos | $[Nm^{-2}]$ |
| σ_{As} | Esfuerzo en el área de la interface | $[Nm^{-2}]$ |

| | | |
|--|---|-------------|
| σ_{rr}, σ_r | Esfuerzo en la dirección radial | $[Nm^{-2}]$ |
| $\sigma_{\theta\theta}, \sigma_\theta$ | Esfuerzo en la dirección angular | $[Nm^{-2}]$ |
| σ_{zz}, σ_z | Esfuerzo en la dirección axial | $[Nm^{-2}]$ |
| τ | Constante para el cálculo de la conductividad térmica de la pastilla combustible. | $[-]$ |
| ψ_k | Variable auxiliar (escalar, vector o tensor) | $[-]$ |

ACRÓNIMOS

| | |
|----------|---|
| ALFRED | Advanced Lead-cooled Fast Reactor European Demonstrator |
| c-c | Con contacto entre la pastilla y el clad |
| CTF | COBRA TF |
| FEM | Finite Element Method |
| FRACAS-I | Fuel Rod And Cladding Analysis Subcode |
| FRAPTRAN | Fuel Rod Analysis Program Transient |
| GIF | Generation IV International Forum |
| irBPD | Irregular (reformulated) Bond-based PeriDynamic model |
| LBE | Lead-Bismuth Eutectic |
| LFR | Lead-coled Fast Reactor |
| LWR | Light Water Reactor |
| MOOSE | Multiphysics Object-Oriented Simulation Enviroment |
| rBPD | Regular Bond-based PeriDynamic model |
| SCANAIR | System of Codes for Analyzing Reactivity-Initiated Accident |
| s-c | Sin contacto entre la pastilla y el clad |
| ULOF | Unprotected Loss-of-Flow |

RESUMEN

En este trabajo se analiza el módulo de elasticidad con efectos sinterizados de una pastilla de combustible nuclear de un reactor BWR. La microestructura de la pastilla de combustible nuclear es un material sinterizado con características heterogéneas, constituido por la fase sólida (partícula de combustible) y la fase gaseosa (espacio entre la fase sólida). Se aplicó el método de promediado volumétrico (VAM) para calcular el módulo de elasticidad escalado, que es una función de la fracción de volumen de la fase sólida. La aplicación sistemática de VAM para las ecuaciones gobernantes de los fenómenos de transporte a escala de microestructura conduce a una ecuación válida a escala de la pastilla. El análisis presentado en este trabajo considera una microestructura simétrica y asimétrica, en donde se calculó el módulo de elasticidad escalado. De acuerdo con las pruebas realizadas, se encontró que el módulo escalado es prácticamente constante con la presión del gas, sin embargo, presenta cambios importantes con la fracción de volumen de la fase sólida.

1. Introducción

El desarrollo e investigación en ingeniería de reactores nucleares se lleva a cabo en diferentes áreas clave. Una de estas áreas está dedicada al diseño del núcleo del reactor, en la cual se incluyen los procesos neutrónicos, termohidráulicos, termomecánicos y el análisis de la seguridad del reactor. El análisis termomecánico de la barra de combustible es importante ya que está directamente relacionado con los procesos neutrónicos, debido a la interacción de las partículas a través de los procesos de fisión y la generación de calor. El análisis de la transferencia de calor es relevante debido a que los gradientes de temperatura generan deformaciones estructurales en el combustible y el revestimiento e impactan el rendimiento térmico de la varilla y los sistemas estructurales. Desde el punto de vista del modelado, las interacciones entre los distintos fenómenos en la barra de combustible generan desafíos numéricos debido al acoplamiento de modelos y los valores correctos de las propiedades del material.

Los primeros análisis termomecánicos formales se informaron a fines de la década de 1960, algunos años después de las primeras investigaciones sobre reactores nucleares. El interés por los fenómenos termomecánicos surge por el hinchamiento del revestimiento en el encamisado de combustible en los reactores reproductores rápidos, así como por la falla en el revestimiento y el combustible en los reactores de agua ligera (LWR). El desarrollo de modelos matemáticos hizo posible la descripción de fenómenos en el encamisado de combustible. Estos fenómenos son la termo-elasticidad del combustible, la fisión y el deslizamiento inducido por calor, el hinchamiento de los productos de fisión gaseosos y sólidos, el prensado en caliente y la sinterización junto con la migración de la porosidad de

fabricación, que puede resultar en la reestructuración y formación de un orificio central y gránulos, además del agrietamiento y reordenación (Olander, 1976; Van Uffelen et al., 2019).

Las propiedades mecánicas y térmicas fueron compiladas por el Laboratorio Nacional de Idaho en el Manual MATPRO en 1970 (INL, 1979). Este manual presenta las correlaciones de las propiedades termomecánicas, así como algunos códigos numéricos desarrollados para analizar el comportamiento de los materiales combustibles LWR. El combustible y el revestimiento presentan algunos fenómenos que modifican su microestructura y en consecuencia las propiedades mecánicas. Un tiempo de irradiación prolongado afecta el comportamiento mecánico de las barras de combustible, fundamentalmente en las propiedades elásticas de los materiales (módulo de Young) y la porosidad. Mientras tanto, las variaciones de temperatura provocan una influencia indirecta. Spino y colaboradores (Spino et al., 1996; Matzke y Spino, 1997; Spino et al., 2003) midieron la variación de dureza y resistencia a la fractura en combustibles de alto quemado mediante técnicas de microindentación. Recientemente, Cappia et al. (2016) y Terrani et al. (2018) han contribuido a este tipo de análisis.

Desarrollar una comprensión mecanicista de la microestructura y las propiedades del combustible, que en última instancia gobiernan el rendimiento del combustible durante la operación del reactor, es una parte importante del esfuerzo de calificación del combustible. En este sentido, Ajantiwalay et al. (2020) presentó una revisión sobre técnicas modernas de caracterización de combustibles nucleares. Estas técnicas incluyen datos experimentales disponibles como la evolución microestructural de combustibles. Un modelo matemático completo capaz de explicar el rendimiento termomecánico del combustible es complejo

debido a la microestructura y la distribución heterogénea de las propiedades del material. Algunos investigadores consideran que las propiedades de los materiales son funciones de la irradiación del combustible durante el proceso de fisión (Fidelma et al., 2021; Lee et al., 2020; Newman et al., 2009). Este efecto se ha aplicado al modelo de Reactores de agua ligera (Ikonen et al., 2015) y Reactores rápidos de metal líquido (Acosta et al., 2019). Algunas de las propiedades del combustible se describen mediante correlaciones como: el calor específico, la conductividad térmica y la deformación térmica. Se pueden estimar a través de las correlaciones FRAPTRAN (Geelhood et al., 2011a, b; Luscher y Geelhood, 2011), que se aplican a los combustibles UOX y MOX. Todas estas correlaciones son funciones de temperatura e irradiación.

Conceptualmente, la pastilla puede verse como un medio poroso que tiene en cuenta el volumen de partículas de combustible y gas entre estas partículas; de esta forma las propiedades termomecánicas y térmicas pueden ser función de la fracción de volumen de cada fase. Es decir, las propiedades incluyen la información de cada fase, permitiendo simplificar las correlaciones y los modelos, además de tener una reducción de la complejidad del modelo y reducir el tiempo computacional al resolverse. En este trabajo analizamos la microestructura del pellet de combustible con efectos sinterizados que constituyen un material heterogéneo con dos fases: gas y sólido, es decir, la fase sólida es la partícula de combustible y la fase gaseosa es el espacio entre las partículas de combustible. Se aplicó el método de promediado volumétrico (VAM, por sus siglas en inglés) (Whitaker, 1999) para calcular el módulo de elasticidad mejorado. La aplicación sistemática del VAM a las ecuaciones que gobiernan los fenómenos de transporte a escala de microestructura conduce a una ecuación válida a escalas mayores, es decir, hasta la escala de pellets de

combustible con efectos sinterizados. Además de proporcionar la forma de la ecuación ampliada, el método de promediado volumétrico permite conocer el vínculo matemático con la física en escalas inferiores. Este método ha sido aplicado en modelado de reactores nucleares, abordando la parte termohidráulica, como el trabajo de [Pérez-Valseca et al. \(2021\)](#) en donde se estiman los coeficientes de transferencia de calor a partir de la aplicación de VAM. El escalamiento a partir del VAM ha sido también aplicado ampliamente en el modelo neutrónico de los reactores nucleares, como en los trabajos de [Espinosa - Paredes et al. \(2020\)](#), [Aguilar-Madera et al. \(2020a, 2020b, 2020c\)](#), [Aguilar-Madera et al. \(2019\)](#) en donde escalan la ecuación de difusión de neutrones para diferentes reactores, así como el trabajo [Espinosa - Paredes y Aguilar-Madera \(2018\)](#), en donde presentan un escalamiento de la cinética neutrónica puntual.

2. Objetivos

2.1. Objetivos Generales

Obtener un modelo escalado de los fenómenos de desplazamiento mecánico en la pastilla de combustible nuclear, a través de la aplicación de la metodología de promedio volumétrico (VAM), homogeneizando el sistema y obteniendo coeficientes efectivos del módulo de elasticidad de Young.

2.2. Objetivos Particulares

- Derivar la ecuación de desplazamientos mecánicos para la microestructura de la pastilla de combustible, considerando el sistema como un medio poroso.
- Establecer las condiciones de frontera entre ambas fases del medio poroso, tomando en cuenta la presión del gas sobre la fase sólida.
- Aplicar la metodología de promediado volumétrico para escalar la ecuación de desplazamientos mecánicos.
- Proponer una solución formal para las desviaciones del desplazamiento en la ecuación escalada, con lo que se derivan los problemas de cerradura.
- Resolver los problemas de cerradura en las celdas unitarias representativas del sistema y obtener el valor de los coeficientes efectivos del módulo de Young, en función de la presión del gas y de la fracción volumen del sólido.
- Resolver el modelo local y el modelo escalado para validar los resultados obtenidos.

- Aplicar el modelo escalado de mecánica a un módulo de termomecánica de barra de combustible nuclear, en una plataforma multiescala y multifísica de diseño y análisis de reactores nucleares.

3. Planteamiento del problema

En los reactores tipo LWR (Reactor de agua ligera, por sus siglas en inglés), específicamente en los BWR-5 (Reactor de agua en ebullición, por sus siglas en inglés), el combustible utilizado para generar las reacciones de fisión nuclear es óxido de uranio, UO_2 , el cual es un medio heterogéneo. La pastilla de combustible se fabrica por medio de sinterización, resultando en un material poroso, permitiendo tener espacio para los productos de fisión gaseosos y la expansión del material, la cual puede provocar que la pastilla combustible y el encamisado se junten, generando puntos calientes en la barra de combustible, aumentando la probabilidad de falla de la barrera física.

La microestructura del combustible nuclear sinterizado (del orden de micras) está constituido de una fase gas y una fase sólida, sin embargo, a escala de la pastilla de combustible, estas fases no son consideradas en las propiedades mecánicas, evitando así tener información precisa en función de la presión del gas y de la cantidad de material de cada fase (fracción volumen).

El problema que se plantea en esta tesis de doctorado es obtener propiedades mecánicas efectivas o escaladas del módulo de Young, que permitan realizar estimaciones para diseño y análisis, en función de la presión del gas y el volumen que ocupa cada fase.

La propuesta de este trabajo es obtener un modelo escalado de los desplazamientos mecánicos con coeficientes escalados del módulo de Young, en donde se considere la microestructura de la pastilla.

El método seleccionado para escalar la ecuación local de desplazamientos es el Método de Promedio Volumétrico ([Whitaker, 1999](#)).

Con el objetivo de establecer las ecuaciones gobernantes de los fenómenos a escala local, en el capítulo siguiente se presenta la deducción de a ecuación de desplazamiento. Posteriormente, se aplica el promedio volumétrico como método de escalamiento de la ecuación gobernante.

4. Ecuación de desplazamiento

En esta sección se deriva y se discute la ecuación de desplazamiento a partir de relaciones fundamentales y condiciones de equilibrio. Las ecuaciones fundamentales de la mecánica de materiales considerando un medio continuo (estado sólido), son las siguientes

Deformación-desplazamiento

$$\mathbf{e} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T) \quad (4.1)$$

Equilibrio mecánico

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho\mathbf{f} = 0 \quad (4.2)$$

Esfuerzos-deformación (Ley de Hook)

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \text{tr}\mathbf{e}\delta_{ij} + 2\mu\mathbf{e} \quad (4.3)$$

Inicialmente, para un sistema en el que se considera solamente los efectos mecánicos y despreciando aquellos de origen térmico la densidad ρ , es constante. También, si se adiciona la aceleración negativa \mathbf{f} debido a la fuerza específica del cuerpo en estudio, la ecuación (4.2) se convierte en la forma local del teorema de momento lineal, lo que es necesario para el tratamiento del desplazamiento.

Las ecuaciones tensoriales (4.1)-(4.3), representan 15 ecuaciones diferenciales escalares para las incógnitas de desplazamiento \mathbf{u} , deformación \mathbf{e} , y esfuerzo, $\boldsymbol{\sigma}$. En este sistema de ecuaciones diferenciales no consideran variables termodinámicas, y esta misma

consideración aplica a las condiciones de frontera e iniciales, el problema es solamente mecánico y por lo tanto el tratamiento matemático es isotérmico.

Eliminando dos grupos de ecuaciones del sistema anteriormente mencionado, es posible reducir el número de ecuaciones diferenciales de tal forma que resulte un sistema sencillo de ecuaciones, por ejemplo, para el desplazamiento o para los esfuerzos solamente. Así, el problema se puede simplificar en lo que respecta a las ecuaciones diferenciales. En general, sin embargo, esta simplificación es acompañada por una complicación en las condiciones de frontera, ya que éstas usualmente contienen más de un conjunto de incógnitas.

Si se eliminan los componentes de la deformación con la ayuda de la relación de cinemática representada por la ecuación (4.1), entonces la Ley de Hook dada por la ecuación (4.3) se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda \frac{1}{2} \text{tr}(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \boldsymbol{\delta}_{ij} + \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (4.4)$$

Obteniendo la divergencia de $\boldsymbol{\sigma}$, se obtiene:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \lambda \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (4.5)$$

Sustituyendo la condición de equilibrio mecánico dada por la ecuación (4.2), conduce a:

$$\lambda \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) + \rho \mathbf{f} = 0 \quad (4.6)$$

La cual se puede reescribir como:

$$\mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\mu + \lambda) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f} = 0 \quad (4.7)$$

Considerando la definición de fuerza específica,

$$\mathbf{f} = \frac{\mathbf{F}}{m} \quad (4.8)$$

La fuerza \mathbf{F} , se define a través de la segunda Ley de Newton:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (4.9)$$

donde la aceleración \mathbf{a} , representa la segunda derivada respecto al tiempo del desplazamiento:

$$\mathbf{a} = \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \quad (4.10)$$

Entonces como era de esperarse \mathbf{f} representa la segunda derivada respecto al tiempo del vector desplazamiento, entonces la ecuación (4.7) se puede escribir como:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -\mu \nabla^2 \mathbf{u} - (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (4.11)$$

Esta expresión es la ecuación gobernante de los desplazamientos locales e instantáneos ampliamente conocida en la literatura (Ziegler, 2012; Cheng, 2016), la cual constituye el punto de partida de este trabajo para describir la microestructura de una pastilla de combustible sinterizada.

Clasificando la Ec. 4.11 a la que se acomoda de la siguiente manera, considerando una aceleración negativa:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} = E_s \nabla \cdot \left[\frac{1}{2(1+\nu)} \nabla \mathbf{u}_s + \frac{1}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \mathbf{I}(\nabla \cdot \mathbf{u}_s) \right] \quad (4.12)$$

donde:

E_s es el módulo de elasticidad, módulo de Young y ν es el coeficiente de Poisson de la pastilla combustible, fase sólida.

A partir de la forma general de una ecuación diferencial de segundo orden:

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + d \frac{\partial u}{\partial t} + e \frac{\partial u}{\partial x} + fu = g \quad (4.13)$$

Donde los coeficientes a, b, c, d, e, f y g de la Ec. (4.13) son constantes o funciones de las variables independientes.

Las tres formas canónicas de la ecuación diferencial parcial de segundo orden (4.13) son determinadas por los siguientes criterios:

si $b^2 - ac < 0$ es una ecuación elíptica

si $b^2 - ac = 0$ es una ecuación parabólica

si $b^2 - ac > 0$ es una ecuación hiperbólica

Simplificando la Ec. (4.12) para un solo componente se obtiene:

$$-\rho_s \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + E_s \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0,$$

donde:

$$b = 0, \quad a = -\rho_s \quad \text{y} \quad c = E_s$$

Con estos coeficientes $b^2 - ac > 0$, lo que significa que la clasificación de la ecuación diferencial parcial, desde un punto de vista matemático es hiperbólica, y desde un punto de

vista de los fenómenos físicos representa una ecuación de onda, cuyo desplazamiento se propaga como una onda:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

donde la velocidad de propagación está dada por:

$$c = \sqrt{\frac{E_s}{\rho_s}} \quad (4.14)$$

Que es la definición de ecuación de onda (Richards & Williams, 1972).

No obstante, para construir un problema de valores a la frontera se requieren discutir las condiciones de salto interfacial (o simplemente condiciones de frontera interfaciales) de la microestructura entre la fase gas y la fase sólida, lo cual es el objetivo del siguiente capítulo.

5. Condición de frontera interfaciales

Un reactor nuclear es un sistema heterogéneo y de múltiples escalas con características importantes en cada escala, tanto en tiempo como en espacio. Las múltiples escalas espaciales de un reactor se representan en la **Figura 5.1**, donde el reactor, el núcleo, el conjunto, la varilla y la pastilla de combustible constituyen las escalas características. Un combustible nuclear de reactor de agua ligera (LWR) consiste en tubos de revestimiento de aleación de circonio llenos de pastillas de combustible de UO_2 policristalino sinterizado (a escala de microestructura). Estos tubos (barras de combustible) se encuentran sumergidos en un material de enfriamiento que puede ser flujo monofásico (por ejemplo, un reactor PWR) o flujo en una y dos fases (reactores BWRs). Normalmente, los arreglos (conjuntos, celdas y barras) son periódicas con anisotropía caracterizada por la geometría del arreglo nominal. La escala representativa en este estudio es a escala de la pastilla de combustible (**Figura 5.1**).

Es importante mencionar se pueden realizar análisis termomecánico a diferentes escalas con las influencias de su entorno. No obstante, los efectos térmicos y mecánicos a escala de pastilla de combustible son cruciales en la seguridad nuclear a escalas incluso más allá de la escala de reactor, por ejemplo en la contención y edificio del reactor en casos de falla.

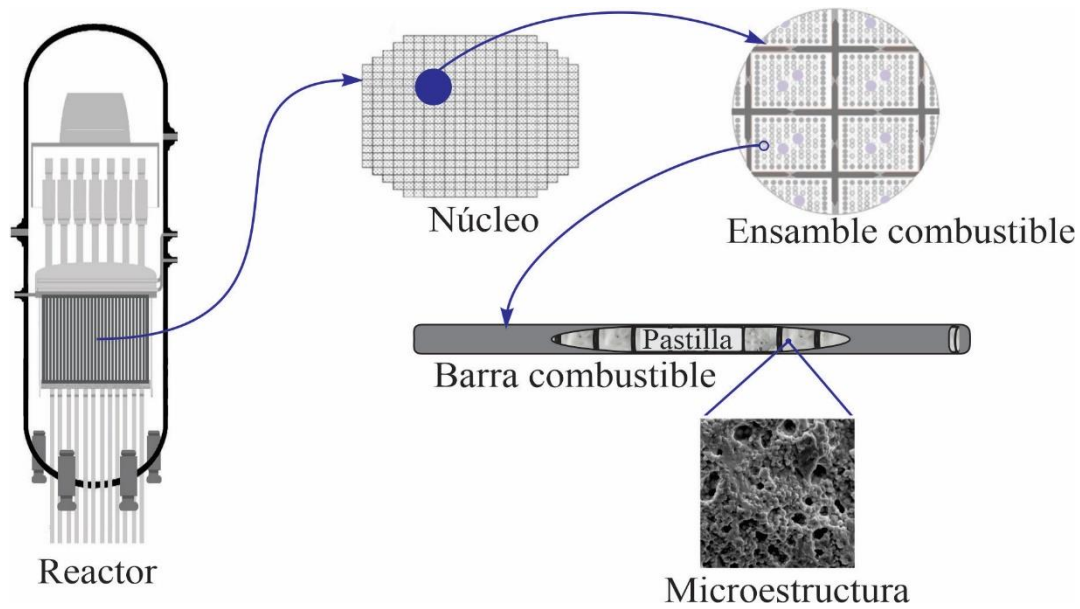


Figura 5.1. Diagrama esquemático de escalas jerárquicas en un reactor nuclear: Desde la escala del reactor a la microescala de la pastilla de combustible.

De acuerdo las escalas jerárquicas, y estableciendo que el estudio en esta tesis doctoral se lleva a cabo en la escala de la microestructura de la pastilla de combustible, se tiene un orden de magnitud de micras (**Figura 5.1**). La microestructura de la pastilla de combustible es un sistema heterogéneo compuesto principalmente por dos fases: una fase sólida y una fase gas.

Para establecer las condiciones de frontera interfacial o condición de salto de entre ambas fases, consideramos un diagrama esquemático idealizado como se muestra en la **Figura 5.2**. En esta figura se presenta el volumen que ocupa la fase sólida V_s , y el volumen que ocupa la fase gas V_g , estos volúmenes establecidos están separados por una frontera o mejor conocida como interface A_{sg} , también se presentan las fuerzas que se ejercen en las superficies del volumen de la fase sólida F_s , y fase gas F_g .

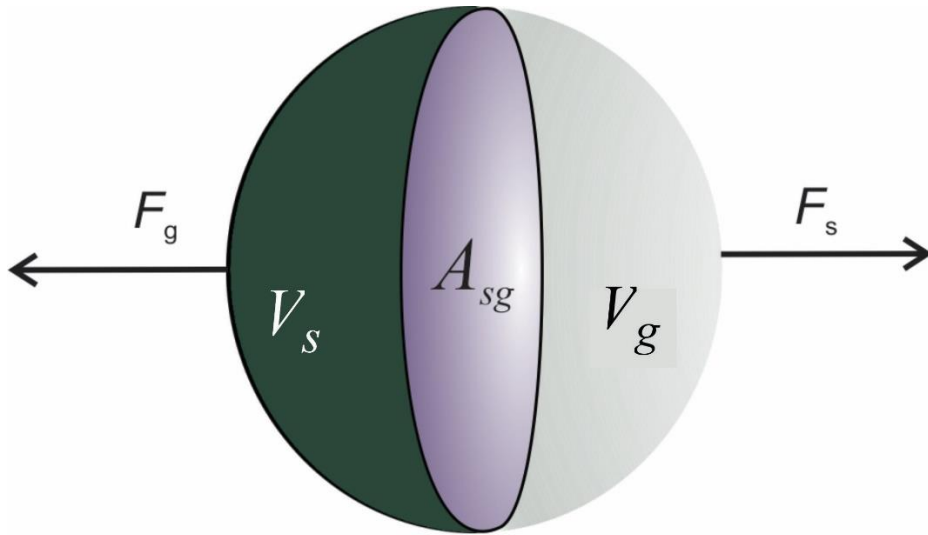


Figura 5.2. Volúmenes e interfaces.

Para realizar un análisis de fuerzas en la interfaz, recurrimos al diagrama esquemático dado por la **Figura 5.3**, donde se presentan las fuerzas normales respecto a la interfaz.

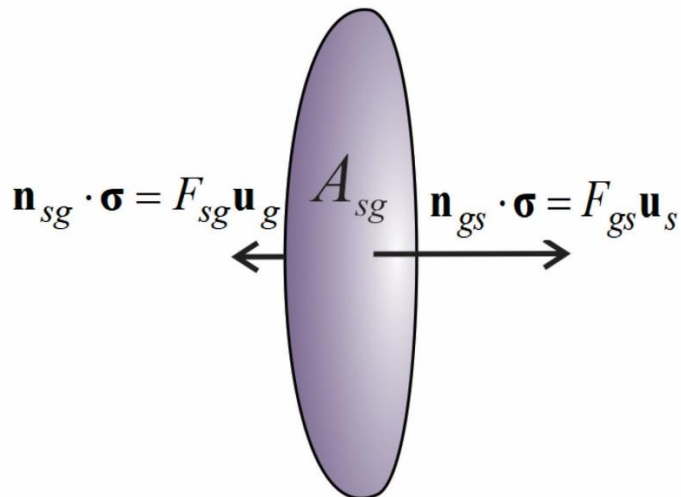


Figura 5.3. Fuerzas interfaciales.

El balance de fuerzas en equilibrio mecánico está dado por:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{n}_{sg} \cdot \boldsymbol{\sigma} = F_{Vs} \mathbf{u}_{As} \quad (5.1)$$

donde

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{n}_{gs} F_{gs} \quad (5.1)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{n}_{sg} F_{sg} \quad (5.2)$$

En la ecuación (5.1), $F_{Vs} \mathbf{u}_{As}$ es un término fuente interfacial.

En este punto introducimos dos definiciones útiles en este desarrollo, la Ley de Hook escrita de la siguiente forma

$$\boldsymbol{\sigma} = E_s \mathbf{e} \quad (5.3)$$

y la definición simplificada de la deformación-desplazamiento definida en la interfaz como

$$\mathbf{e} = \nabla \mathbf{u}_{As} \quad (5.4)$$

donde E_s es el módulo de elasticidad y \mathbf{u}_{As} es el vector desplazamiento en la interfaz.

Sustituyendo las ecuaciones (5.3) y (5.4) en (5.1), se obtiene

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot (E_s \nabla \mathbf{u}_{As}) - \mathbf{n}_{sg} E_s (\nabla \cdot \mathbf{u}_{As}) = F_{Vs} \mathbf{u}_{As} \quad (5.5)$$

que se puede reescribir como:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot (E_s \nabla \mathbf{u}_{As} + E_s \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_{As}) = F_{Vs} \mathbf{u}_{As} \quad (5.6)$$

donde $\mathbf{n}_{sg} = -\mathbf{n}_{gs}$.

Es importante mencionar que F_{Vs} está relacionada con la presión de la fase gas P_g y la densidad de área interfacial a :

$$F_{Vg} = aP_g \quad (5.7)$$

La densidad de área interfacial se define como:

$$a = \frac{A_{sg}}{V} \quad (5.8)$$

Como se explicará más adelante en un volumen representativo V de la microestructura A_{sg} es el área interfacial dentro de V .

5.1. La condición de frontera debido a la presión de gas

En la **Figura 5.4** se presenta el fenómeno de desplazamiento entre la fase gas y sólida en la microestructura. En donde se observa que la presión del gas P_g , actúa sobre la fase sólida. Ésta, según la característica de cuerpo elástico que están determinado por el módulo de elasticidad E_s , se desplaza en dirección normal. Para la fuerza que ejerce la presión del gas sobre el área interfacial hay una respuesta de la fase sólida, la cual es el esfuerzo σ_r en la dirección normal. Según la propiedad elástica del material, después de que se ejerce la presión y el deslizamiento es en dirección de dicha presión, se tiende a recupera la forma anterior, pero aun así surge un pequeño desplazamiento y la geometría a escala de microestructura se deforma y cambia con respecto a la forma que tenía anteriormente. Este fenómeno se ilustra esquemáticamente en la **Figura 5.4**.

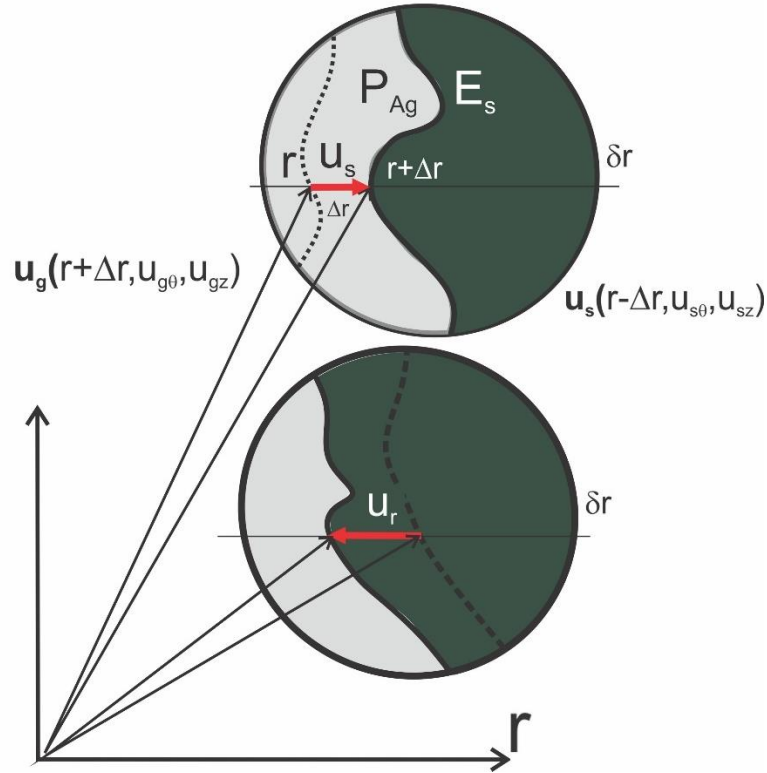


Figura 5.4. Desplazamiento en la interfaz sólido-gas.

Para encontrar una condición de frontera interfacial originada por la presión del gas P_g , sobre la interfaz, se hace las siguientes consideraciones:

- En la interfaz el componente del esfuerzo normal interfacial es igual a la presión del gas.

$$\sigma_{As} = -P_g \quad (5.9)$$

- Se puede suponer sin pérdida de generalidad que la presión del gas es igual esfuerzo normal radial y al esfuerzo normal angular:

$$\sigma_{As} = \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -P_{Ag} \quad (5.10)$$

- Se aplica la ecuación de equilibrio mecánico en coordenadas cilíndricas

$$\frac{\partial \sigma_{rr}}{\partial r} + \frac{1}{r}(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}) = 0 \quad (5.11)$$

- Se considera que el esfuerzo normal radial es constante en la posición por lo que su derivada es cero, entonces:

$$\frac{1}{r}(\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta}) = 0 \quad (5.12)$$

Lo cual implica que

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} \quad (5.13)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = -P_{As} \quad (5.14)$$

El componente angular aplicando la Ley de Hooke está dado por:

$$\sigma_{\theta\theta} = E_s e_{\theta\theta} \quad (5.15)$$

Como la deformación angular es igual al desplazamiento sobre el radio, y considerando que desplazamiento es despreciable, (Ziegler, 2012):

$$\frac{u}{r} \gg \frac{\partial u}{\partial r} \quad (5.16)$$

Entonces la deformación en la dirección- $\theta\theta$ está dada por:

$$e_{\theta\theta} = \frac{u_{\theta\theta}}{r} = \frac{u_{As}}{r} \quad (5.17)$$

Sustituyendo la ecuación (5.17) en (5.15)

$$\sigma_{\theta\theta} = E_s \frac{u_{As}}{r} \quad (5.18)$$

y de (5.10), se obtiene:

$$u_{As} = -\frac{P_g}{E_s} r \quad (5.19)$$

La cual se puede representar como:

$$\mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{u}_s = -\frac{P_g}{E_s} r \quad (5.20)$$

También aplicando consideraciones termomecánicas, los esfuerzos normales radial y angular están dados por:

$$\sigma_{rr} = \lambda \left(\frac{\partial u_s}{\partial r} + \frac{u_s}{r} \right) - (3\lambda + 2\mu) \alpha_T (T - T_\infty) + 2\mu \frac{\partial u_s}{\partial r} \quad (5.21)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \lambda \left(\frac{\partial u_s}{\partial r} + \frac{u_s}{r} \right) - (3\lambda + 2\mu) \alpha_T (T - T_\infty) + 2\mu \frac{u_s}{r} \quad (5.22)$$

Se sustituye en la ecuación de equilibrio mecánico dada por la ecuación (5.11), y considerando la misma suposición donde los esfuerzos son constantes en la dirección radial, resulta:

$$\frac{2\mu}{r} \left(\frac{\partial u_s}{\partial r} - \frac{u_s}{r} \right) = 0 \quad (5.23)$$

Se puede observar que los efectos térmicos desaparecen. La ecuación anterior se puede reescribir como:

$$\frac{du_s}{dr} = \frac{u_s}{r} \quad (5.24)$$

Cuya solución es:

$$u_s = Cr \quad (5.25)$$

donde C es una constante de integración y si ésta está dada por

$$C = -\frac{P_g}{E_s} \quad (5.26)$$

Se obtiene el mismo resultado dado por la ecuación (5.20).

6. Metodología

El método del promedio volumétrico permite escalar las ecuaciones gobernantes de los fenómenos termomecánicos en la microescala de la pastilla de combustible, y eventualmente, desarrollar restricciones físicas, definiciones de variables promedio y coeficientes efectivos ([Whitaker, 1999](#)).

Una característica importante del método de promedio volumétrico es que se identifican los llamados *problemas de cerradura* para el cálculo analítico o numérico de coeficientes efectivos, es decir, se proponen variables de cerradura que permitan tener el mismo número de ecuaciones y de incógnitas, para poder establecer una solución de la ecuación escalada.

Los problemas de cerradura son problemas de valores a la frontera, cuya solución debe realizarse en geometrías representativas (celdas unitarias) del medio que se está analizando ([Aguilar-Madera et al. \(2019\)](#)). En este trabajo, se consideran celdas representativas de la microestructura del combustible, considerado como un medio poroso.

Para realizar el escalamiento de la ecuación local de los *desplazamientos* termomecánicos, se consideran los siguientes pasos:

Paso 1. Definir la ecuación gobernante de los *desplazamientos* a la escala de la microestructura.

Paso 2. Aplicación del método del promedio volumétrico a la ecuación gobernante para obtener la ecuación escalada.

Paso 3. Identificar y aplicar las restricciones de escala para reducir la complejidad de la ecuación escalada.

Paso 4. Definir las variables promedio y los coeficientes efectivos.

Paso 5. Obtener el problema *no-cerrado* (mal condicionado) en función de las variables promedio y las desviaciones espaciales.

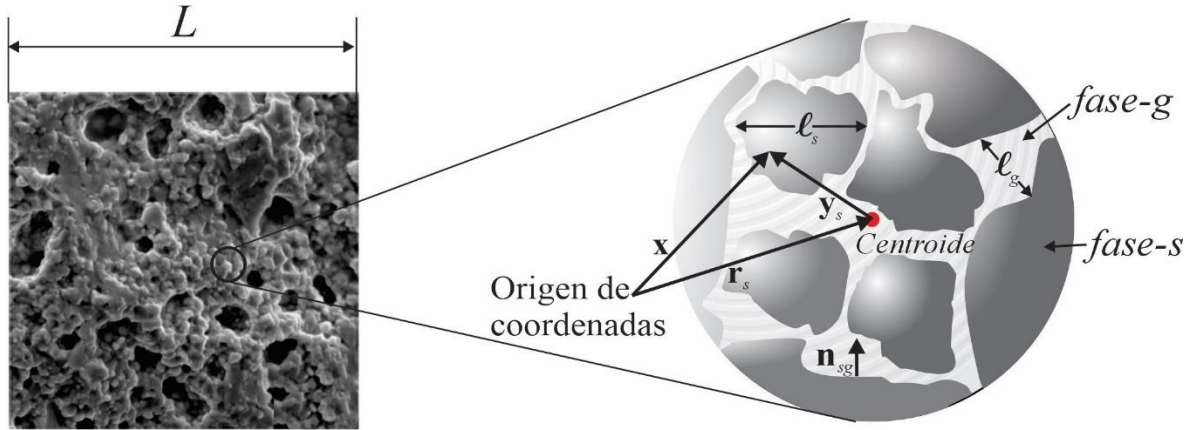
Paso 6. Proponer la solución formal de las desviaciones espaciales, cuya estructura deriva en los *problemas de cerradura*.

Paso 7. Resolver numéricamente los *problemas de cerradura* en celdas representativas de la microestructura.

Paso 8. Estimar los coeficientes efectivos de la ecuación escalada de *desplazamiento* termomecánico.

El método de promedio volumétrico es una técnica que se puede utilizar para derivar de forma rigurosa ecuaciones continuas para un sistema multifásico (Whitaker, 1999). En la aplicación sistemática del método las ecuaciones gobernantes a una escala determinada conduce a ecuaciones promediadas válidas a escalas mayores, y proporciona el vínculo matemático con la física a escalas inferiores.

Para la aplicación del método se asume que hay dos fases bien definidas con propiedades homogéneas en la pastilla del combustible. De acuerdo con la microestructura de la pastilla, el sistema se puede conceptualizar como un medio poroso. Por lo tanto, a la escala de poros hay dos fases homogéneas (gas y sólido), en este trabajo la fase gaseosa se identifica por g mientras que la fase sólida con la letra s .



Microestructura

Figura 6.1. Volumen representativo (REV) a partir de la escala del poro (microestructura).

En el enfoque de promediado, las ecuaciones gobernantes se promedian espacialmente sobre un volumen representativo (REV). Hay varias formas de definir cantidades promedio, con base en un marco Euleriano, se puede definir el promedio ponderado superficial de la función asociada con la fase k de la siguiente manera (Quintard y Whitaker, 1994):

$$m(\mathbf{y}) \langle \psi_k \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_V m(\mathbf{y}) \psi_k(\mathbf{x} + \mathbf{y}_k, t) dV, \quad k = g, s \quad (6.1)$$

en donde V es el volumen limitado por la superficie, dicha región puede o no contener ambas fases. La función ψ_k depende del tiempo y del espacio, mientras que la función de ponderación m solo varía en el espacio. El volumen representativo se presenta en la **Figura 6.1**, (que permite comprender el significado físico y geométrico de la ecuación (6.1)), en donde \mathbf{x} es el vector de posición localizado en el centroide de V y \mathbf{y}_s es el punto localizado en la región V asociado con la fase s ; el vector \mathbf{y} puede localizarse ambas fases. La función de ponderación debe tener una condición de normalización y poseer derivadas en todas las direcciones de \mathbf{y} , i.e., $m(\mathbf{y}) = V^{-1} \quad |\mathbf{y}| \leq r_0$ (r_0 es el tamaño del

volumen de promediado, por otra parte, $m(\mathbf{y}) = 0$). En el método de promedio volumétrico se utilizan los operadores de promediado en volumen superficial e intrínseco, los cuales se definen de la siguiente manera:

$$\text{Promedio superficial} \quad \langle \psi_k \rangle(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \psi_k(\mathbf{x} + \mathbf{y}_k, t) dV, \quad k = g, s \quad (6.2)$$

$$\text{Promedio intrínseco} \quad \langle \psi_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \psi_k dV, \quad k = g, s \quad (6.3)$$

en donde V_k es el volumen de la fase k dentro del volumen V . Los promedios superficial e intrínseco se relacionan entre sí a partir de la siguiente expresión:

$$\langle \psi_k \rangle = \varepsilon_k \langle \psi_k \rangle^k, \quad k = g, s \quad (6.4)$$

en dónde ε_k es la fracción volumen de la fase k .

Además de las definiciones de promediado en volumen, se utiliza el teorema de promedio espacial, el cual se puede expresar como (Howes and Whitaker, 1985):

$$\langle \nabla \psi_s \rangle = \nabla \langle \psi_s \rangle^s + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \psi_s \mathbf{n}_{sg} dA, \quad k = s \quad (6.5)$$

De igual forma, se utilizará el teorema de transporte de Reynolds, definido como:

$$\left\langle \frac{\partial \psi_s}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_s \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \psi_s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA, \quad k = s \quad (6.6)$$

Estos teoremas se aplican de igual manera a ambas fases. En las ecuaciones anteriores, \mathbf{w}_{sg} es la velocidad interfacial, A_{sg} es el área interfacial dentro del volumen V , y \mathbf{n}_{sg} es el

vector normal unitario, partiendo de la fase sólida a la fase gas. (ver **Figura 6.1**), cumpliéndose que $\mathbf{n}_{sg} = -\mathbf{n}_{gs}$.

El método de promedio volumétrico está sujeto a las siguientes restricciones de escala:

$$\ell_k \ll r_0 \ll L, \quad k = g, s \quad (6.7)$$

En donde ℓ_k es la longitud característica de la fase k , r_0 es la longitud característica del volumen de promediado (r_0 es aproximadamente $V^{1/3}$), y L es la longitud característica de la pastilla de combustible.

Siguiendo la metodología y utilizando las definiciones presentadas en esta sección, se lleva a cabo el escalamiento de la ecuación local de desplazamientos termomecánicos, presentado en la siguiente sección, con el fin de obtener la ecuación escalada con coeficientes efectivos a la escala de la pastilla.

7. Modelo escalado

Considérese ahora el sistema mostrado, donde se esquematizan granos de UO_2 rodeado de poros. Al conjunto de granos que forman el combustible se denotará fase s , mientras que los poros gaseosos serán la fase g .

De acuerdo con la metodología establecida el **Paso 1**, es establecer la ecuación local-instantánea para la fase sólida, la cual en términos del vector \mathbf{u}_s con condiciones iniciales y a la frontera está dada por el siguiente problema matemático de valores a la frontera:

Ecuación gobernante

$$\rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} = -\nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) + \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \quad (7.1)$$

Condición Inicial 1:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} = 0 \quad \text{en} \quad t = 0 \quad (7.2)$$

Condición Inicial 2:

$$\mathbf{u}_s = 0 \quad \text{en} \quad t = 0 \quad (7.3)$$

Condición Frontera 1:

$$-\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) = a P_g \mathbf{u}_s \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (7.4)$$

Condición Frontera 2:

$$\mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{u}_s = \frac{P_g}{E_s} r \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (7.5)$$

En estas ecuaciones, ρ es la densidad, T es la temperatura, E_s es el coeficiente de elasticidad, y E_1 and E_2 en este trabajo son definidos como:

$$E_1 = \mu \quad (7.6)$$

$$E_2 = \mu + \lambda \quad (7.7)$$

donde μ y λ son los coeficientes de Lamé

$$\mu = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \quad (7.8)$$

$$\lambda = \frac{\nu E_s}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (7.9)$$

Aquí ν es el coeficiente de Poisson. El último término del lado derecho de la ecuación (7.1) considera efectos externos, como por ejemplo térmicos:

$$\mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) = \alpha_s \left(\lambda_s + \frac{2\mu_s}{3} \right) \nabla T_s \quad (7.10)$$

Es importante recordar que las condiciones de frontera se definen a escala de poro entre las fases sólida y el gas, donde las fuerzas interfaciales se consideran en la dirección normal \mathbf{n}_{sg} , cómo se ilustra en la **Figura 7.1**. Los subíndices sg indican que el vector normal apunta de la fase sólida a la fase gas, dicho vector tiene la propiedad: $\mathbf{n}_{sg} = -\mathbf{n}_{gs}$.

En la Condición de Frontera 1, P_g representa la presión del gas en la interfaz y a es la densidad de área interfacial definida como:

$$a = \frac{A_{sg}}{V} \quad (7.11)$$

La condición de frontera 1 se puede interpretar físicamente a través del diagrama esquemático de la **Figura 7.1**, el cual muestra las fuerzas que actúan en la interfaz:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n}_{sg} F \quad (7.12)$$

donde

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \quad (7.13)$$

$$\mathbf{n}_{sg} F = a P_g \mathbf{u}_s \quad (7.14)$$

para $\mathbf{u}_s = \mathbf{n}_{sg} u_s$.

Respecto a la Condición de Frontera 2, consideramos que $\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = -P_g$ y aplicando la Ley de Hook, i.e., $\sigma_{\theta\theta} = E_s e_{\theta\theta}$. El escuerzo angular $e_{\theta\theta} = u_{sg} r^{-1}$ (donde $u_{sg} = \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{u}_s$ en A_{sg}) cuando el cambio en el desplazamiento es despreciable (Ziegler, 2012).

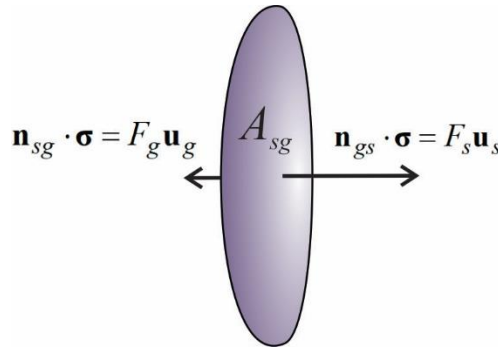


Figura 7.1. Diagrama esquemático mostrando las interacciones en la interfaz sólido-gas.

7.1 Ecuación de gobierno escalada

El desarrollo teórico de la ecuación de desplazamiento escalada de la fase sólida constituye el **Paso 2** de la metodología. Luego, aplicando el operador dado por la ecuación (6.2) a la ecuación (7.1):

$$\left\langle \rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} \right\rangle = -\left\langle \nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \right\rangle + \left\langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \right\rangle \quad (7.15)$$

El teorema de Reynolds dado por la ecuación (6.6) se aplica dos veces en el término del lado izquierdo de la ecuación (7.15):

$$\left\langle \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right) \right\rangle = \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left\langle \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right\rangle - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \rho_s \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.16)$$

Se puede observar que ρ_s es constante respecto al operador promedio, debido a que ésta depende de la temperatura principalmente. Aplicando por segunda vez el teorema de Reynolds:

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.17)$$

Ahora, substituyendo (7.17) en (7.16)

$$\begin{aligned} \left\langle \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right) \right\rangle &= \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t^2} - \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \\ &\quad - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \rho_s \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \end{aligned} \quad (7.18)$$

En estas ecuaciones \mathbf{w}_{sg} representa la velocidad interfacial, existe una discusión física alrededor de este fenómeno, por ejemplo, en la interfaz se puede considerar $\mathbf{w}_{sg} \approx \mathbf{u}_s$ en A_{sg} , sin embargo, atacar este problema es muy complicado desde un punto de vista matemático que puede abordarse considerando las ecuaciones de la fase gas. En otras palabras, constituye una nueva línea de investigación. Entonces, nuestra suposición es que la fracción volumen de la fase sólida ε_s es constante, lo cual implica que los términos de las integrales son nulos debido a que $\mathbf{w}_{sg} = 0$. Por lo tanto, la ecuación (7.19) se simplifica como:

$$\left\langle \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right) \right\rangle = \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t^2} \quad (7.19)$$

Como siguiente paso, desarrollamos el primer término del lado derecho de la ecuación (7.16), para ello aplicamos el teorema del promedio especial dada por la ecuación (6.5):

$$\begin{aligned} \left\langle \nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \right\rangle &= \nabla \cdot \langle E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s \rangle \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \end{aligned} \quad (7.20)$$

Aplicamos por segunda vez el teorema de promedio espacial:

$$\begin{aligned} \langle E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s \rangle &= E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \\ &+ E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \end{aligned} \quad (7.21)$$

Se puede observar que E_1 y E_2 son constante respecto al operador promedio, debido a que son propiedades del material.

Sustituyendo la ecuación (7.21) en (7.20):

$$\begin{aligned} &\left\langle \nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \right\rangle \\ &= \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) + E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \end{aligned} \quad (7.22)$$

El último término de esta ecuación se puede substituir por la Condición de Frontera 1:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \cdot \mathbf{n}_{sg} dA = -\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA \quad (7.23)$$

Sustituyendo ecuaciones (7.22) and (7.23) en (7.20), se obtiene el siguiente resultado:

$$\begin{aligned}
\langle \nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \rangle &= \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\
&+ \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA
\end{aligned} \tag{7.24}$$

Combinando las ecuaciones (7.15), (7.17) y (7.24):

$$\begin{aligned}
\rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t^2} &= -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\
-\nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] &+ \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle
\end{aligned} \tag{7.25}$$

La cual representa una ecuación escalada o promedio fase, con efectos interfaciales de desplazamiento y presión. El promedio fase está relacionado con el promedio intrínseco a través de la siguiente relación:

$$\langle \mathbf{u}_s \rangle = \varepsilon_s \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \tag{7.26}$$

El promedio fase se le conoce como una cantidad superficial, no obstante, nos interesan los efectos de desplazamiento en la fase sólida, por lo que es necesario expresar la ecuación en términos del promedio intrínseco:

$$\begin{aligned}
\rho_s \varepsilon_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} &= -\varepsilon_s \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\
-\varepsilon_s \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] &+ \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA + \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s
\end{aligned} \tag{7.27}$$

donde es importante recordar que la fracción volumen de a fase sólida ε_s se considera constante.

La ecuación (7.27) es no local, ya que necesita el cálculo de la deformación alrededor de la frontera que limita el sólido con la fase gaseosa. Para abordar este inconveniente,

sustituimos el valor local por una variación espacial alrededor del valor promedio (Gray, 1975):

$$\mathbf{u}_s = \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s \quad (7.28)$$

Los términos con integrales de la ecuación (7.27) con la relación dada en (7.28) quedan como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA &= \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s) \mathbf{n}_{sg} dA \\ &= \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \mathbf{n}_{sg} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \end{aligned} \quad (7.29)$$

Debido a las restricciones de escala de longitud dada por la ecuación (6.7) el promedio intrínseco es constante respecto el promedio, i.e.:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \mathbf{n}_{sg} dA = \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} dA \right) \quad (7.30)$$

Tenemos que encontrar el significado de la integral del vector normal, para ellos podemos hacer $\psi_s = 1$ en el teorema del promedio espacial

$$\langle \nabla 1 \rangle = \nabla \langle 1 \rangle^s + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.31)$$

donde $\langle \nabla 1 \rangle = 0$ y $\langle 1 \rangle^s = \varepsilon_s$, entonces:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} dA = -\nabla \varepsilon_s \quad (7.32)$$

Dada la hipótesis impuesta en este trabajo, la fracción volumen de la fase gas es constante por lo que $\nabla \varepsilon_s = 0$. Entonces, aplicando estos principios cada una de las integrales de la ecuación (7.27) son dadas por:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.33)$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.34)$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA = \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g dA \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s dA \quad (7.35)$$

Sustituyendo ecuaciones (7.33)- (7.35) en (7.27)

$$\begin{aligned} \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} &= -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ &- \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] + \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s \end{aligned} \quad (7.36)$$

donde el último término se justifica como sigue:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA &= \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s \\ &= a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s \end{aligned} \quad (7.37)$$

La densidad de área interfacial se define como

$$a = \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} dA \quad (7.38)$$

Para dar mayor valor a la hipótesis de que la velocidad interfacial es cero, regresemos a la ecuación (7.17) donde la variable local es sustituida por la descomposición espacial de Gray (1975):

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (7.39)$$

Como antes, el promedio es constante respecto a la integral, i.e.:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA = \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \quad (7.40)$$

Se puede demostrar que aplicando el teorema de Reynolds para $\psi_s = 1$, se obtiene:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA = \frac{\partial \varepsilon_s}{\partial t} \quad (7.41)$$

Un análisis riguroso muestra que la ecuación (7.41) es cero si ε_s es constante o si $\mathbf{w}_{sg} = 0$, por lo tanto, nuestra hipótesis inicial consiste en la ecuación escalada dada por la ecuación (7.36). Una gran contribución es considerar que la ε_s no es constante, dando lugar a gradientes ε_s de y razones de cambio respecto al tiempo de ε_s .

8. Solución formal para $\tilde{\mathbf{u}}_s$

Comparando el modelo escalado, dado por ecuación (7.36) y la ecuación local e instantánea (ecuación 7.1) se puede observar un incremento en el número de variables desconocidas o incógnitas. El modelo escalado en términos de las variables dependientes $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$ y $\tilde{\mathbf{u}}_s$, y la ecuación local en términos de \mathbf{u}_s . No obstante, la ecuación local no es capaz de describir el sistema heterogéneo de la microestructura porque está diseñada para materiales isotrópicos y homogéneos.

La derivación de la variable $\tilde{\mathbf{u}}_s$ necesita ser definida para obtener un conjunto cerrado de ecuaciones. Determinar las funciones de desviación especial en términos de las cantidades promedio es conocido como *cerradura* y el problema a resolver se le denomina *problema de cerradura*. Los *problemas cerradura*, completan los grados de libertad en la aplicación del método de promediado volumétrico, los cuales surgen de la sustitución de la descomposición espacial Ec. (7.28) en la ecuación local (7.15), obteniendo:

$$\rho_s \frac{\partial^2 (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s)}{\partial t^2} = -\nabla \cdot \left(E_1 \nabla (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s) + E_2 \mathbf{IV} \cdot (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s) \right) + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s + \tilde{\mathbf{m}}_s(\mathbf{r}, t) \quad (8.1)$$

Restando la (7.36) se obtiene una expresión para $\tilde{\mathbf{u}}_s$:

$$\begin{aligned} \rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} = & -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ -\nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] & - \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s dA \end{aligned} \quad (8.2)$$

donde $\tilde{\mathbf{m}}(\mathbf{r}, t)$ fue considerada despreciable. La ecuación anterior es abrumadora y contiene muchos términos en comparación con su predecesora. Con el propósito de obtener una ecuación manejable y aplicable, se procede a estimar el orden de magnitud de los términos y compararlos unos con otros. De esta manera, es posible identificar el término más predominante que gobierna el campo de desviaciones espaciales. Así, la ecuación (8.2) puede ser simplificada proporcionando las siguientes desigualdades:

$$\nabla \cdot (E_1 \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s) \gg \nabla \cdot \left(E_1 \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \quad (8.3)$$

$$\nabla \cdot (E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s) \gg \nabla \cdot \left(E_s \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \quad (8.4)$$

$$\varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \gg \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s dA \quad (8.5)$$

Las desigualdades dadas por (8.3)-(8.4) están justificadas en la siguiente estimación de órdenes de magnitud

$$\nabla \cdot (E_1 \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s) = \mathbf{O} \left(E_1 \frac{\tilde{\mathbf{u}}_s}{\ell_s^2} \right) \quad (8.6)$$

$$\nabla \cdot \left(E_s \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) = \mathbf{O} \left(E_s \varepsilon_s^{-1} \frac{\tilde{\mathbf{u}}_s}{\ell_s L_a} \right) \quad (8.7)$$

Se puede observar que los cambios de las desviaciones espaciales del desplazamiento son del orden de la escala de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ (del orden de μm), es decir

$$\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s = \mathbf{O} \left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}_s}{\ell_s} \right) \quad (8.8)$$

Por lo tanto, se justifica el orden de magnitud de la desigualdad (8.6). Recordemos que la integral sobre el área interfacial constituye toda el área interfacial dentro del volumen promediante y representa la densidad de área interfacial cuya escala es mayor que la microestructura. De acuerdo con la escala de la microestructura y la del volumen promedio se sabe que:

$$\ell_s \ll L_a \quad (8.9)$$

Entonces, se sigue que la cantidad expresada en (8.6) es mucho más grande que la cantidad dada por (8.7). En forma similar, usando el correspondiente análisis de órdenes de magnitud se puede probar que las desigualdades dadas por las ecuaciones (8.4) y (8.5) son satisfechas. Con estas discusiones sobre los órdenes de magnitud, la Ec. (8.2) se puede simplificar a:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} = -\nabla \cdot [E_1 (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s)] - \nabla \cdot [E_2 (\mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s)] - \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (8.10)$$

Es deseable resolver el problema en estado estacionario, pero es necesario establecer que la aproximación sea lo más adecuada posible y relativamente sencilla de resolver. Necesitamos justificar que la segunda derivada respecto al tiempo es despreciable. Aplicamos un análisis de orden de magnitudes al término temporal:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} = \mathbf{O} \left(\rho \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^{*2}} \right) \quad (8.11)$$

donde t^* representa el tiempo característico del proceso y necesitamos que justificar que:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} \ll \nabla \cdot [E_1 (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s)] \quad (8.12)$$

$$\rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} \ll \nabla \cdot [E_2 (\mathbf{IV} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s)] \quad (8.13)$$

Podemos inferir que estas desigualdades se cumplen siempre y cuando

$$\frac{\ell_s^2}{E_s} \ll \frac{t^{*2}}{\rho} \quad (8.14)$$

Si demostramos que la desigualdad (8.12) se cumple, evidentemente que (8.13) se cumple también. Entonces reescribiendo (8.12):

$$\rho \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^{*2}} \ll E_1 \frac{\tilde{\mathbf{u}}_s}{\ell_s^2} \quad (8.15)$$

El lado izquierdo corresponde al orden de magnitud dada por (8.6) y el derecho a (8.11).

Entonces de aquí se sigue que:

$$\left(\frac{\rho}{t^{*2}} \tilde{\mathbf{u}}_s \right) \ll \left(E_1 \frac{\tilde{\mathbf{u}}_s}{\ell_s^2} \right) \quad (8.16)$$

Lo cual implica que se cumple con la desigualdad (8.14), y por lo tanto se demuestra (8.12) y (8.13). Entonces con estos argumentos se demuestra que la ecuación de las desviaciones finalmente queda como:

$$\nabla \cdot [E_1 (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s) + E_2 (\mathbf{IV} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s)] = -\varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (8.17)$$

Las condiciones de frontera interfaciales, ecuaciones. (7.4) y (7.5), ahora son reescritas sustituyendo la descomposición espacial para a completar el problema frontera – valor para $\tilde{\mathbf{u}}_s$:

Condición Frontera 1:

$$\begin{aligned} & -\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s) + a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s \\ & = \mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) + a P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \end{aligned} \quad \text{en } A_{sg} \quad (8.18)$$

Condición Frontera 2:

$$\mathbf{n}_{sg} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s = \frac{P_g}{E_s} r - \mathbf{n}_{sg} \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad \text{en } A_{sg} \quad (8.19)$$

El problema de valores a la frontera dado por las ecuaciones (8.17)-(8.19) son lineales por naturaleza matemática y contienen fuentes macroscópicas asociadas con cantidades promedio $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$, i.e., los términos promedio actúan como constantes debido a que las restricciones de escala de longitud dentro del dominio validad para $\tilde{\mathbf{u}}_s$ y que es definido en (6.7).

Como consecuencia del análisis previo, la *solución formal* para $\tilde{\mathbf{u}}_s$ puede establecerse de la siguiente forma:

$$\tilde{\mathbf{u}}_s = \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (8.20)$$

donde

$$\mathbf{b}_{1s}, \mathbf{b}_{2s}, \text{ y } S$$

Son conocidas como *variables de cerradura*.

Las variables de cerradura son numéricamente calculadas en un dominio geométrico predefinido. En este trabajo de tesis doctoral establecemos geometrías representativas denominadas *celdas unitarias*, para dos tipos de microestructuras de las pastillas (de combustible. Como ejemplo de microestructura se puede ver la **Figura 6.1**.

El modelo virtual de la *celda unitaria* se diseña considerando la masa y distribución espacial de los elementos que componen la pastilla de combustible, de acuerdo con la

microestructura de los granos y poros entre granos del UO_2 . A escala de la microestructura, la distribución de componentes no es uniforme y el modelo virtual es una aproximación de las condiciones reales. En este trabajo se consideran dos aproximaciones:

- *Celda unitaria simétrica*
- *Celda unitaria asimétrica*

como se ilustra en forma tridimensional en la **Figura 8.1**.

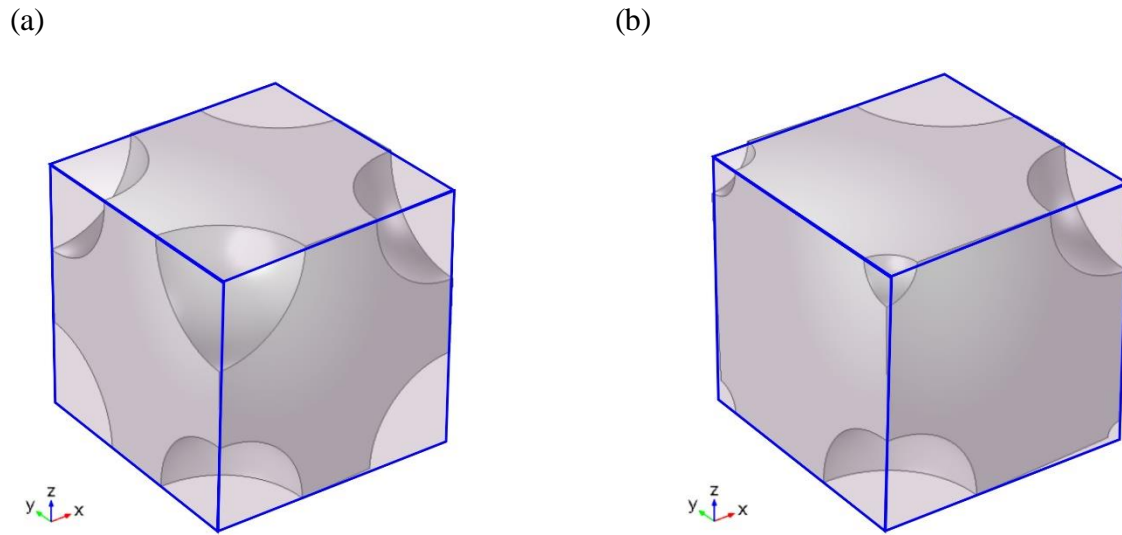


Figura 8.1. Celda Unitaria 3D. (a) Simétrica y (b) Asimétrica.

Con las celdas unitarias se considera que toda la pastilla de combustible puede ser reproducida, reemplazando las celdas apropiadamente en direcciones ortogonales. De esta forma, es conveniente imponer condiciones periódicas en las fronteras externas de las celdas unitarias, con esta consideración se evita conocer las condiciones de frontera en la macroescala de la pastilla de combustible. La condición de periodicidad está dada por:

$$\tilde{\mathbf{u}}_s(t, \mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{u}}_s(t, \mathbf{x} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.21)$$

con

$$\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \rangle^s = 0 \quad (8.22)$$

donde \mathbf{l}_i representa el vector para replica la celda unitaria en dirección- i . De acuerdo con nuestros experimentos numéricos y experiencias previas (Perez-Valseca et al., 2021) la restricción dada por (8.22) proporciona estabilidad en la solución numérica.

El procediendo para obtener los problemas de cerradura es sustituir la *solución formal* dada por (8.20) en las ecuaciones (8.17)-(8.19), y las ecuaciones (8.21)-(8.22), lo cual conduce al siguiente problema de valores a la frontera para las variables de cerradura:

- *Problema de valores a la frontera para \mathbf{b}_{1s}*

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{1s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \cdot \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{b}_{1s}) = 0 \quad \text{en la fase-}s \quad (8.23)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{1s} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{1s} - \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en la interfaz -}sg \quad (8.24)$$

- *Problema de valores a la frontera para \mathbf{b}_{2s}*

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \cdot \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{b}_{2s}) = 0 \quad \text{en la fase-}s \quad (8.25)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{2s} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en la interfaz -}sg \quad (8.26)$$

- *Problema de valores a la frontera para S*

$$-\nabla^2 S \mathbf{I} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \nabla \cdot S \mathbf{I} = 2(1+\nu) \mathbf{I} \frac{P a^2}{E} \quad \text{en la fase-}s \quad (8.27)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla S \mathbf{I} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot S \mathbf{I} \right] = \mathbf{I} \frac{2(1+\nu) a P_g (1+S)}{E_s} \quad \text{en la interfaz -}sg \quad (8.28)$$

Para cada problema de valores a la frontera, las condiciones de periodicidad

$$\mathbf{b}_{1s}(r + \ell_i) = \mathbf{b}_{1s}(r), \quad (8.28)$$

$$\mathbf{b}_{2s}(r + \ell_i) = \mathbf{b}_{2s}(r), \quad (8.29)$$

$$S(r + \ell_i) = S(r), \quad i = 1, 2, 3 \quad (8.30)$$

y restricciones del promedio $\langle \mathbf{b}_{1s} \rangle^s = 0$,

$$\langle \mathbf{b}_{2s} \rangle^s = 0, \quad (8.31)$$

$$\langle S \rangle^s = 0 \quad (8.32)$$

son consideradas.

9. Estimación numérica de las variables de cerradura

La estimación numérica de las variables de cierre \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} se realiza resolviendo los problemas de cerradura definidos por las ecuaciones (8.17) - (8.19). Los problemas de cerradura se resolvieron numéricamente mediante el *Software Comsol Multiphysics*. Este software funciona dentro del marco del método de elementos finitos y contiene rutinas numéricas avanzadas para mejorar las peculiaridades del problema, como condiciones de contorno periódicas, restricciones de valor promedio y procedimientos de refinamiento de malla de cuadrícula adaptativa. Para todos los cálculos numéricos utilizamos elementos triangulares que aseguran la independencia de la malla. La malla de cuadrícula para cada celda unitaria se muestra en la **Figura 9.1** correspondiente a 40 000 elementos de dominio. La fase sólida está representada por el área gris en ambas celdas, las burbujas de gas se distribuyen uniformemente en cada esquina de la celda. Para la celda simétrica (lado izquierdo) cada burbuja tiene el mismo tamaño, mientras que en el caso de la celda asimétrica (lado derecho) las burbujas presentan diferentes tamaños.

Aquí tomamos como valores de propiedades para UO_2 : 334 a 1380 MPa, ([Todreas y Kazimi, 1990](#)) y 0.85.

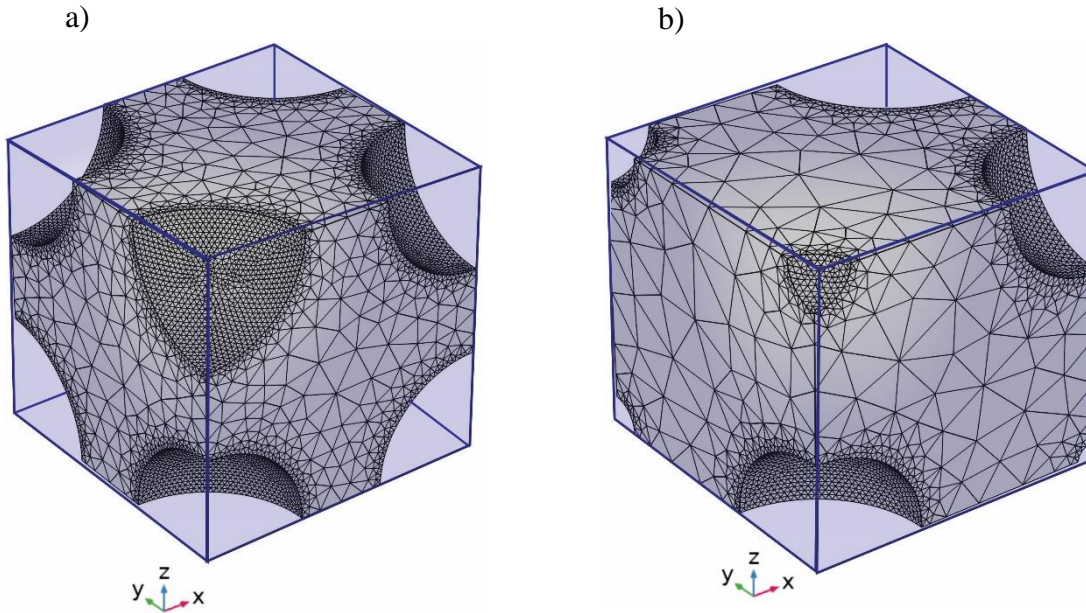


Figura 9.1. Celda unitaria computacional con 40 000 elementos de dominio. (a) Simétrica y (b) Asimétrica

Las variables de cerradura resueltas se presentan en forma de campos de proyección. Los campos de cada componente de la variable de cierre \mathbf{b}_{1s} se presentan en la **Figura 9.2**. La fila superior corresponde a la celda simétrica, mientras que la fila inferior corresponde a la celda asimétrica. En la celda simétrica los campos de la solución son simétricos, el valor numérico de la variable es el mismo en la parte superior e inferior de la celda, lo que indica la uniformidad de los resultados. Estos resultados producirán posteriormente una contribución uniforme a los coeficientes efectivos asociados. Para la celda asimétrica la solución de campo despliega diferencias entre ellas debido a la distribución y microestructura porosa; en este caso, la solución de variables de cierre realiza diferentes contribuciones en el espacio a los coeficientes efectivos, dependiendo de la posición.

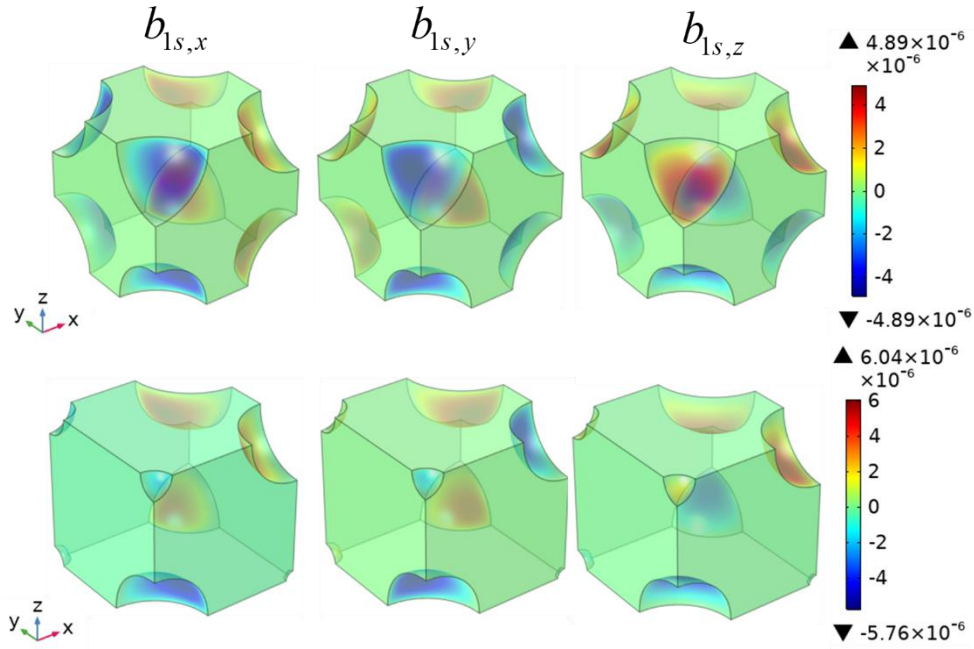


Figura 9.2. Campos de la variable de cerradura \mathbf{b}_{1s} .

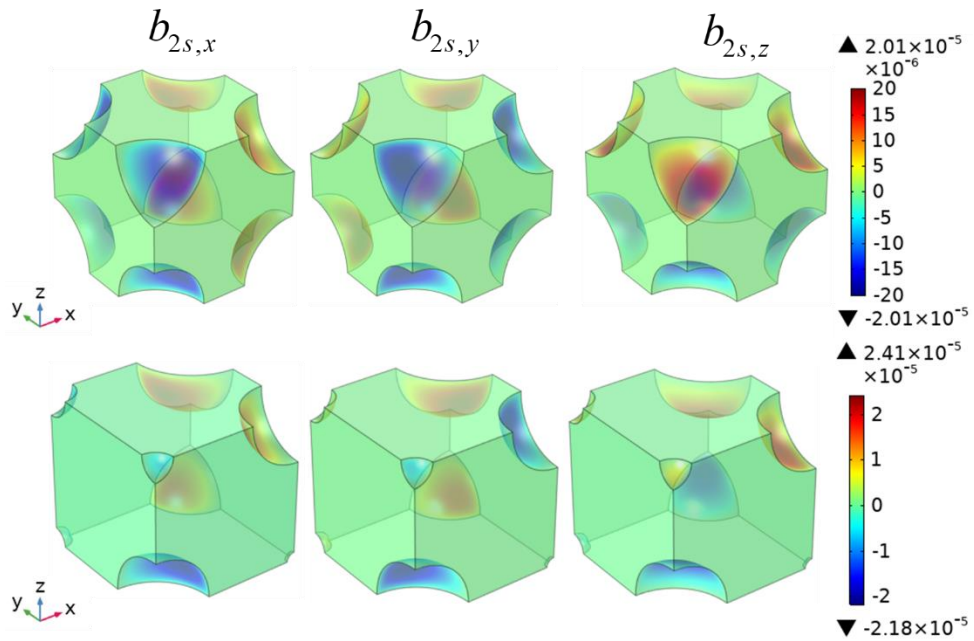


Figura 9.3. Campos de la variable de cerradura \mathbf{b}_{2s} .

Para la variable de cierre \mathbf{b}_{2s} , las soluciones de campo para cada componente espacial se presentan en la **Figura 9.3**. La tendencia general de estas variables de cierre es similar a la

de \mathbf{b}_{1s} , pero el primero es un orden de magnitud menor. La proyección de estas variables sobre la celda simétrica es simétrica y uniforme. En el caso de la celda asimétrica, los valores de las variables son diferentes en cada esquina y para cada dirección.

El campo de la variable escalar S se presenta en la **Figura 9.4**. A diferencia de las variables de cerradura anteriores, presenta un campo no uniforme en el límite entre las burbujas y la fase sólida, este resultado es el mismo para ambas celdas. También muestra un fuerte valor en los límites. Estas características se capturarán más adelante mediante los coeficientes efectivos asociados.

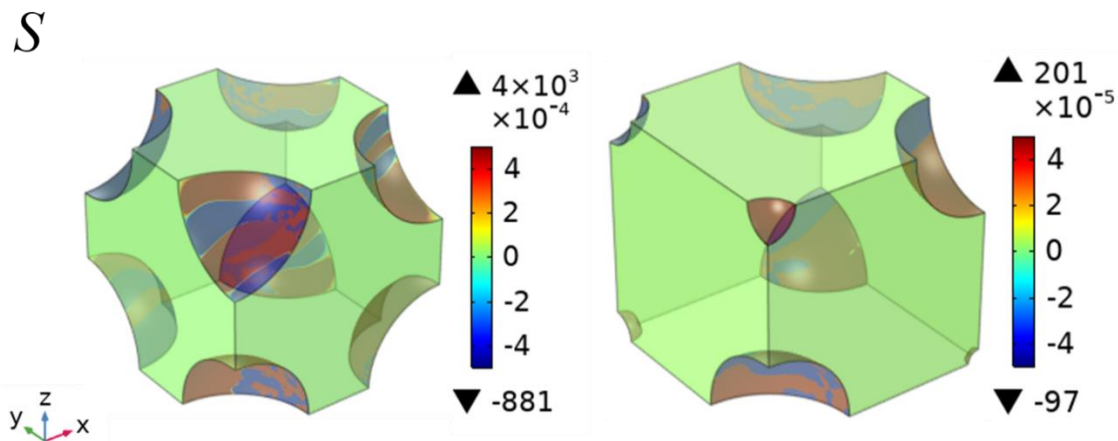


Figura 9.4. Campo de la variable de cerradura S .

10. Ecuación de desplazamiento escalada

En este capítulo se deriva una ecuación escalada de desplazamiento para pastillas de combustible nuclear, la cual considera efectos de sinterizado a través de la fracción volumen de la fase sólido o granos desde la microescala.

El primer paso para la deducción de dicha ecuación escalada es sustituir la *solución formal*, dada por la ecuación (8.20) en la ecuación escalada dada por la ecuación (7.36):

$$\begin{aligned}
 & \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} \\
 &= -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} (\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\
 & -\nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{IV} \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I}(\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\
 & + \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s
 \end{aligned} \tag{10.1}$$

Los coeficientes E_1 y E_2 se pueden expresar como:

$$E_1 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \tag{10.2}$$

$$E_2 = \frac{E_s}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \tag{10.3}$$

Entonces la ecuación (10.1) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \varepsilon_s \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} = & -\varepsilon_s \nabla \cdot \left[\mathbf{E}_1 \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{E}_2 \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{s} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right] \\ & + a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s \end{aligned} \quad (10.4)$$

Los tensores del *módulo elasticidad escalado* (coeficientes efectivos son tensores de segundo orden) \mathbf{E}_1 y \mathbf{E}_2 , y el vector \mathbf{s} están dados por:

$$\mathbf{E}_1 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(\varepsilon_s \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} dA \right) \quad (10.5)$$

$$\mathbf{E}_2 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(\frac{\varepsilon_s \mathbf{I}}{(1-2\nu)} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} dA \right) \quad (10.6)$$

$$\mathbf{s} = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} S \mathbf{n}_{sg} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} S \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \quad (10.7)$$

Las ecuación escalada con coeficientes escalados, dados por las expresiones (10.4)-(10.7), constituyen una ecuación escalada cerrada. Cuya interpretación es una ecuación homogénea de un sistema heterogéneo desde un punto de la microescala del orden de micrómetros. Esta ecuación incorpora los efectos de sinterización a través de ε_s y que $1-\varepsilon_s$, se puede interpretar perfectamente como sinterizado.

Las ecuaciones efectivas pueden ser numéricamente calculadas si las variables de cerradura están disponibles, objeto del **Capítulo 11** de esta tesis doctoral. En el **Capítulo 9** se llevaron a cabo la solución de tres problemas de cerradura para determinar las variables de cerradura \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y S , las cuales permiten \mathbf{E}_1 , \mathbf{E}_2 and \mathbf{s} seleccionando una geometría apropiada de las pastillas del combustible nuclear de un reactor nuclear con sus correspondientes propiedades del material.

Comparando la ecuación local y escalada, se puede observar que se observa que la ecuación escalada contiene un término adicional s , el cual representa un *coeficiente de elasticidad interfacial* y solamente tiene sentido para $\varepsilon_s < 1$, es decir para un material sinterizado.

11. Estimación de los módulos escalados

En esta sección se presenta la estimación numérica de los coeficientes efectivos dados por las Ecs. (10.5) - (10.7). Dada la naturaleza tensorial de los coeficientes efectivos, los componentes xx, yy, zz se analizan en función de la presión de poro y la fracción de volumen de la fase sólida. Como se demuestra en esta sección, estas variables son cruciales en el comportamiento mecánico del combustible nuclear. La presión de poro sufre cambios drásticos con la temperatura del combustible, la quema de combustible y la acumulación de concentración de fragmentos de fisión gaseosos dentro del poro (Rest et al., 2019), por lo que la presión de poro puede cambiar la estructura topológica del combustible y la fracción de volumen de poro. Los resultados obtenidos se presentan en las **Tablas 11.1 – 11.5**. Se realizaron cálculos a dos presiones 1MPa y 2MPa, y la fracción volumen del sólido fue variada desde 0.825 a 0.975.

Los componentes xx, yy, zz de los coeficientes escalados del módulo de elasticidad \mathbf{E}_1 / E_s and \mathbf{E}_2 / E_s para la aproximación simétrica, son presentados en las **Tablas 11.1 y 11.2**. Así mismo, en las **Tablas 11.3 y 11.4** se presentan para la aproximación asimétrica. Los componentes x, y, z del *coeficiente interfacial de elasticidad* $\mathbf{s} / E_s a P_g$ son presentados en la **Tabla 11.5** para las aproximaciones simétrica y asimétrica.

Cuando la microestructura es aproximada con celda simétrica, los componentes del coeficiente efectivo escalado \mathbf{E}_1 / E_s and \mathbf{E}_2 / E_s (**Tablas 11.1-11.2**) tienen el mismo valor para una fracción volumen ε_s dada, debido a la simetría de los campos de cerradura de las

variables \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 (Figuras. 9.2 y 9.3). A medida que aumenta la fracción de volumen, los valores de los componentes aumentan, en general estos tienden a μ/E_s y $(\mu+\lambda)/E_s$, respectivamente. Los resultados de los coeficientes efectivos son consistentes con los valores de referencia donde el valor de \mathbf{E}_2/E_s es mayor que \mathbf{E}_1/E_s .

Tabla 11.1. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo \mathbf{E}_1/E_s y \mathbf{E}_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda simétrica y a 1 MPa.

| ε_s | \mathbf{E}_1/E_s | | | \mathbf{E}_2/E_s | | |
|-----------------|--------------------|---------|---------|--------------------|---------|---------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.800 | 0.30727 | 0.30727 | 0.30727 | 0.97055 | 0.97057 | 0.97056 |
| 0.825 | 0.31408 | 0.31408 | 0.31408 | 0.99031 | 0.99031 | 0.99031 |
| 0.850 | 0.32424 | 0.32424 | 0.32424 | 1.0199 | 1.0199 | 1.0199 |
| 0.875 | 0.33232 | 0.33232 | 0.33232 | 1.0437 | 1.0437 | 1.0437 |
| 0.900 | 0.34079 | 0.34079 | 0.34079 | 1.0688 | 1.0688 | 1.0688 |
| 0.925 | 0.34898 | 0.34898 | 0.34898 | 1.0932 | 1.0932 | 1.0932 |
| 0.950 | 0.35708 | 0.35708 | 0.35708 | 1.1175 | 1.1175 | 1.1175 |
| 0.975 | 0.36510 | 0.36510 | 0.36510 | 1.1417 | 1.1417 | 1.1417 |

Tabla 11.2. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo \mathbf{E}_1/E_s y \mathbf{E}_2/E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda simétrica y a 2 MPa.

| ε_s | \mathbf{E}_1/E_s | | | \mathbf{E}_2/E_s | | |
|-----------------|--------------------|---------|---------|--------------------|---------|---------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.800 | 0.30728 | 0.30728 | 0.30728 | 0.97067 | 0.97067 | 0.97067 |
| 0.825 | 0.31409 | 0.31409 | 0.31409 | 0.99041 | 0.99039 | 0.99040 |
| 0.850 | 0.32425 | 0.32425 | 0.32425 | 1.0200 | 1.0200 | 1.0200 |
| 0.875 | 0.33232 | 0.33232 | 0.33232 | 1.0437 | 1.0437 | 1.0437 |
| 0.900 | 0.34080 | 0.34080 | 0.34080 | 1.0688 | 1.0688 | 1.0688 |
| 0.925 | 0.34898 | 0.34898 | 0.34898 | 1.0932 | 1.0932 | 1.0932 |

| | | | | | | |
|-------|---------|---------|---------|--------|--------|--------|
| 0.950 | 0.35708 | 0.35708 | 0.35708 | 1.1175 | 1.1175 | 1.1175 |
| 0.975 | 0.36510 | 0.36510 | 0.36510 | 1.1417 | 1.1417 | 1.1417 |

En el caso de la celda asimétrica, los coeficientes escalados toman un valor diferente para cada componente debido a la distribución del medio poroso y al campo de las variables de cerradura, la principal diferencia de valores comienza en el tercer decimal (**Tabla 11.3**). El mayor valor está en la coordenada $-zz$. Como celda simétrica, el valor del componente efectivo aumenta a medida que aumenta la fracción de volumen, y el valor tiende a ser un valor de referencia en el caso simétrico. Es importante notar que \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s son prácticamente constantes en el rango de presión de 1 a 2 MPa, como es posible verificar en los resultados. Desde el punto de vista del significado físico, el mecanismo interfacial debido a la presión es insignificante para estos coeficientes efectivos escalados.

Tabla 11.3. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda asimétrica y a 1 MPa.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|---------|---------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.800 | 0.30543 | 0.30537 | 0.30567 | 0.96219 | 0.96204 | 0.96321 |
| 0.825 | 0.31235 | 0.31230 | 0.31259 | 0.98276 | 0.98264 | 0.98367 |
| 0.850 | 0.32273 | 0.32269 | 0.32293 | 1.0137 | 1.0136 | 1.0144 |
| 0.875 | 0.33101 | 0.33099 | 0.33120 | 1.0384 | 1.0384 | 1.0391 |
| 0.900 | 0.33972 | 0.33971 | 0.33988 | 1.0646 | 1.0646 | 1.0651 |
| 0.925 | 0.34817 | 0.3416 | 0.34829 | 1.0901 | 1.0900 | 1.0905 |
| 0.950 | 0.35653 | 0.35653 | 0.35662 | 1.1154 | 1.1154 | 1.1157 |
| 0.975 | 0.36483 | 0.36483 | 0.36488 | 1.1407 | 1.1407 | 1.1408 |

Tabla 11.4. Componentes del coeficiente de módulo de elasticidad efectivo \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s a diferentes fracciones de volumen en una celda asimétrica y a 2 MPa.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|---------|---------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.800 | 0.30544 | 0.30538 | 0.30568 | 0.96228 | 0.96213 | 0.96330 |
| 0.825 | 0.31237 | 0.31232 | 0.31260 | 0.98283 | 0.98272 | 0.98375 |
| 0.850 | 0.32274 | 0.32270 | 0.32294 | 1.0137 | 1.0136 | 1.0145 |
| 0.875 | 0.33102 | 0.33100 | 0.33120 | 1.0385 | 1.0384 | 1.0391 |
| 0.900 | 0.33973 | 0.33972 | 0.33989 | 1.0646 | 1.0646 | 1.0651 |
| 0.925 | 0.34817 | 0.34816 | 0.34830 | 1.0901 | 1.0901 | 1.0905 |
| 0.950 | 0.35653 | 0.35653 | 0.35662 | 1.1154 | 1.1154 | 1.1157 |
| 0.975 | 0.36483 | 0.36483 | 0.36488 | 1.1407 | 1.1407 | 1.1408 |

Los componentes, x , y y z del *coeficiente de elasticidad interfacial* se presentan en las Tabla 5 para 1 MPa, este coeficiente tiene un valor diferente para cada componente debido al comportamiento de la variable de cerradura. Esta variable está presente en ambos términos integrales de la ecuación (10.7) que representan los efectos interfaciales entre las fases gaseosa y sólida. En la **Figura 9.4**, es posible observar el comportamiento de S , en los límites de los medios porosos, el campo presenta una irregularidad en los valores provocando diferentes valores del vector normal y como consecuencia la variación en las componentes del coeficiente efectivo.

Tabla 11.5. Componentes del *coeficiente de elasticidad interfacial* a diferente fracción de volumen para $P_g = 1.0 \text{ MPa}$.

| $s / (aP_g)$ | | | | | | |
|-----------------|-----------------|----------|----------|------------------|----------|-----------|
| ε_s | Celda simétrica | | | Celda asimétrica | | |
| | x | y | z | x | y | z |
| 0.800 | 0.57485 | 0.17136 | 0.46542 | 0.4167 | 0.3628 | 0.3356 |
| 0.825 | 0.055566 | 0.028811 | 0.021412 | 2.7707 | 2.2078 | 1.9027 |
| 0.850 | 0.29980 | 0.18305 | 0.12661 | 1.4173 | 0.91107 | 0.73158 |
| 0.875 | 1.9404 | 2.0821 | 2.0347 | 0.060338 | 0.037699 | 0.056537 |
| 0.900 | 0.10192 | 0.086961 | 0.089370 | 0.11057 | 0.096495 | 0.081863 |
| 0.925 | 0.033942 | 0.015421 | 0.004928 | 0.000245 | 0.013442 | 0.0075211 |
| 0.950 | 0.10147 | 0.098300 | 0.10661 | 0.12086 | 0.21198 | 0.18110 |
| 0.975 | 0.18762 | 0.17874 | 0.17106 | 0.056656 | 0.043579 | 0.035958 |

Los resultados numéricos presentados en la **Tabla 11.5** se pueden interpretar como los efectos de curvatura, es decir, por ejemplo, para $\varepsilon_s = 0.875$ en el caso simétrico, el componente y presenta la curvatura más alta y la celda asimétrica para el componente x , y para cada valor de la interpretación es la forma análoga. Tal fenómeno se puede dilucidar a partir de la definición de ecuación (10.7), donde los términos integrales contienen los vectores normales unitarios, y estos vectores obtienen valores máximos según la coordenada del eje. Además, de la *solución formal* para las desviaciones espaciales, ecuación (8.20), observamos que la variable de cierre s está asociada con el desplazamiento promedio (término fuente) $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$. Es importante, ya que indica que el coeficiente efectivo cobra relevancia en sistemas altamente deformados, mientras que desaparece para materiales frágiles.

El *coeficiente de elasticidad interfacial* presenta variaciones apreciables con la presión de la fase gaseosa como se puede observar en la **Tabla 11.6**, cuyos valores de cada componente se obtuvieron para $P_g = 2.0$ MPa.

Tabla 11.6. Componentes del *coeficiente de elasticidad interfacial* a diferente fracción de volumen para $P_g = 2.0$ MPa.

| $s / (aP_g)$ | | | | | | |
|-----------------|-----------------|----------|-----------|------------------|----------|-----------|
| ε_s | Celda simétrica | | | Celda asimétrica | | |
| | x | y | z | x | y | z |
| 0.800 | 0.57485 | 0.17137 | 0.46542 | 0.3914 | 0.3394 | 0.3143 |
| 0.825 | 0.056084 | 0.029042 | 0.021656 | 2.4523 | 1.9525 | 1.6846 |
| 0.850 | 0.29677 | 0.17946 | 0.12501 | 1.5116 | 0.97137 | 0.78001 |
| 0.875 | 1.9508 | 2.0919 | 2.0438 | 0.059114 | 0.036581 | 0.055471 |
| 0.900 | 0.10208 | 0.087110 | 0.089519 | 0.11086 | 0.096809 | 0.082085 |
| 0.925 | 0.036603 | 0.019942 | 0.0092260 | 6.2016E-6 | 0.013646 | 0.0077056 |
| 0.950 | 0.10158 | 0.098409 | 0.10672 | 0.11948 | 0.20961 | 0.17903 |
| 0.975 | 0.18397 | 0.17522 | 0.16771 | 0.056563 | 0.043500 | 0.035883 |

12. Comparación del modelo directo y el modelo escalado

En este capítulo se presenta la aplicación de los coeficientes efectivos $\mathbf{E}_1, \mathbf{E}_2, \mathbf{s}$ del modelo escalado (ecuación 10.4). Los valores de los coeficientes efectivos para cada uno de los componentes son obtenidos de las **Tablas 11.1** y **11.2** para una celda simétrica y de las **Tablas 11.3** y **11.4** para una celda asimétrica. En estas tablas los valores de dichos coeficientes son función del sinterizado ε_s y de la presión del gas P_g .

Se presentan diferentes experimentos numéricos para el análisis del desplazamiento en una pastilla típica de combustible nuclear de óxido de uranio (**Figure 12.1**). Los casos analizados son:

- Caso 1. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$
- Caso 2. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$
- Caso 3. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$
- Caso 4. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$
- Caso 5. Problema directo, Presión de frontera $P_f = 2\text{MPa}$
- Caso 6. Problema directo, Presión de frontera $P_f = 2.5\text{MPa}$

Con el modelo escalado y los coeficientes efectivos previamente calculados, el cálculo tridimensional del desplazamiento en una pastilla de combustible presenta el mismo nivel de dificultad que el problema directo. Esto es importante enfatizarlo porque el modelo obtenido escalado es atractivo para su aplicación.

Las pruebas realizadas se ejecutan en régimen permanente y sin fuente externas como pueden ser fenómenos térmicos, i.e., $\langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s = 0$. Entonces, la ecuación escalada (ecuación 10.4) toma la siguiente forma

$$\varepsilon_s \nabla \cdot \left[\mathbf{E}_1 \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{E}_2 \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{s} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right] = a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (12.1)$$

Sujeta a las siguientes condiciones de frontera

$$P_f = P_{fo} \quad \text{en} \quad r = R \quad (12.2)$$

$$-\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0 \quad \text{en} \quad z = 0 \text{ y } z = L \quad (12.3)$$

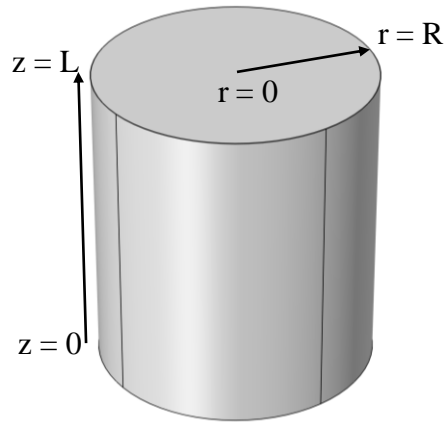


Figura 12.1. Diagrama esquemático de una pastilla de combustible nuclear.

El modelo matemático se resolvió en tres dimensiones y se implementó en el Software Comsol Multiphysics. Los pasos esenciales de estas simulaciones incluyen generar una malla que garantice la invariabilidad de los resultados. Con esta malla se ejecutan las pruebas, en donde el modelo matemático está dado por la ecuación (12.1) y las condiciones de frontera dadas por la ecuación (12.2), los parámetros escalados para cada caso son cargados en Comsol para generar los experimentos numéricos.

Para el modelo directo, la ecuación (12.1) se reduce a

$$\nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \nabla \cdot \mathbf{u}_s) = 0 \quad (12.4)$$

donde

$$E_1 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \quad (12.5)$$

$$E_2 = \frac{E_s}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (12.6)$$

El problema directo también está sujeto a las condiciones de frontera dadas por la ecuación (12.2-3).

12.1 Análisis de malla

El análisis de malla se realizó considerando dos escenarios, el primero consistió en una malla gruesa de 79124 elementos, como se ilustra en la **Figura 12.2a**. El segundo escenario consistió en una malla fina de 313624 elementos, como se presenta en la **Figura 12.2b**. Con la idea de presentar con mayor fidelidad el campo de desplazamientos en el cilindro, se utilizó la malla fina.

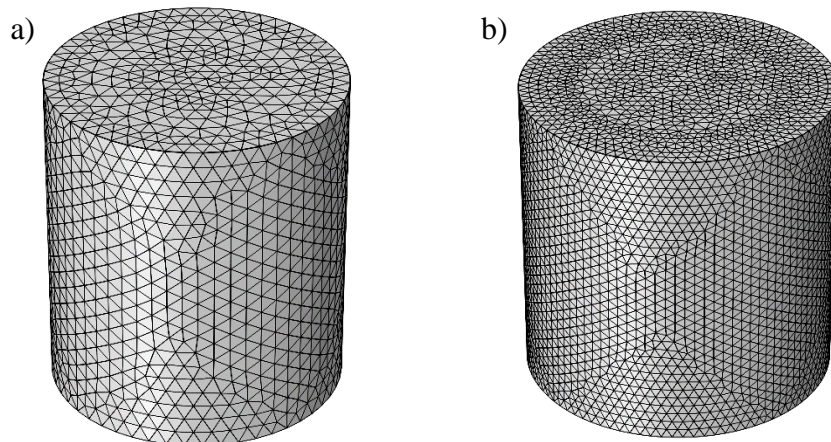


Figura 12.2. Mallado en la pastilla de combustible. a) malla gruesa con 79124 elementos y b) malla fina con 313624 elementos.

12.2. Experimentos numéricos sin efectos térmicos

- *Caso 1. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$*

Los datos utilizados para esta prueba se presentan en la siguiente tabla, que son los valores para cada uno de los tensores y del vector. La presión externa a la pastilla es de $P_f = 2\text{MPa}$

Tabla 12.1. Valores de \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$ en una celda simétrica.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|--------|--------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.850 | 0.32424 | 0.32424 | 0.32424 | 1.0199 | 1.0199 | 1.0199 |
| 0.975 | 0.36510 | 0.36510 | 0.36510 | 1.1417 | 1.1417 | 1.1417 |

Tabla 12.2. Valores de $\mathbf{s}/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$.

| ε_s | $\mathbf{s}/(aP_g)$ | | |
|-----------------|---------------------|---------|---------|
| | x | y | z |
| 0.850 | 0.29677 | 0.17946 | 0.12501 |
| 0.975 | 0.18397 | 0.17522 | 0.16771 |

Los resultados obtenidos del desplazamiento para el caso simétrico y cada componente x , y , z se presenta en la **Figura 12.3**, para los sinterizados establecidos. En estas figuras, además de presentar los componentes del tensor, se presenta la norma del tensor u_T , definida como

$$u_T = \sqrt{\langle \mathbf{u}_s \rangle^s \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s} \quad (12.7)$$

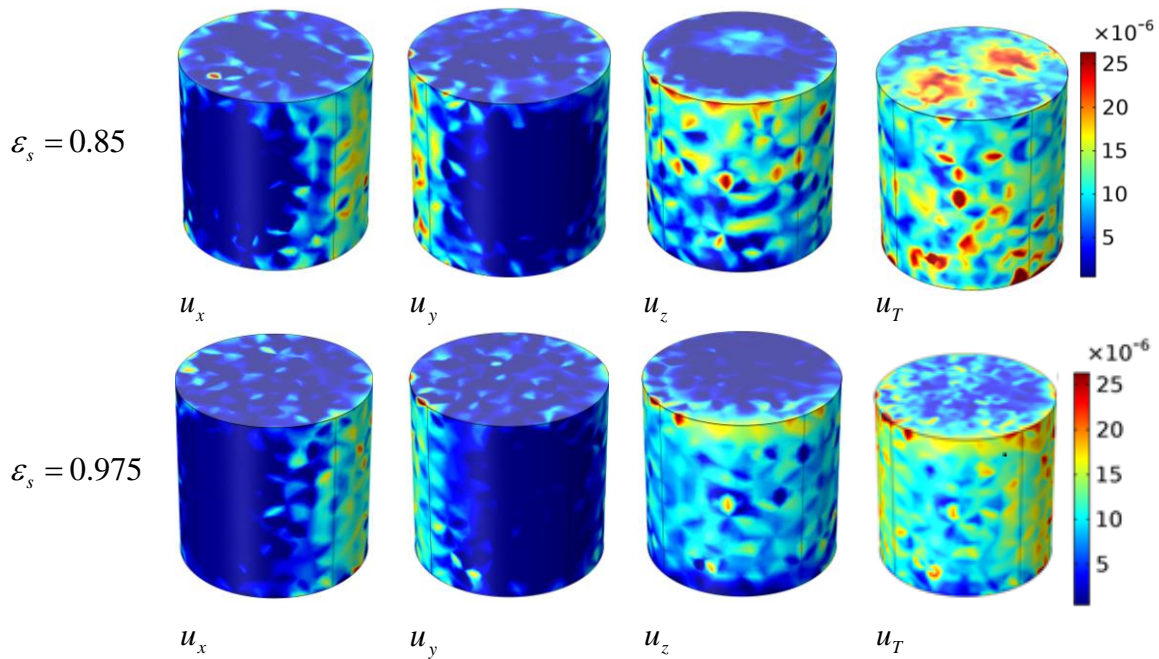


Figura 12.3. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 1\text{MPa}$.

En esta figura se puede observar cambios en las tres componentes para cada uno de los sinterizados, especialmente se observa una gran diferencia en la componente z . Esto

significa que es en donde se generan mayores desplazamientos, especialmente para un sinterizado de 0.850.

- *Caso 2. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$*

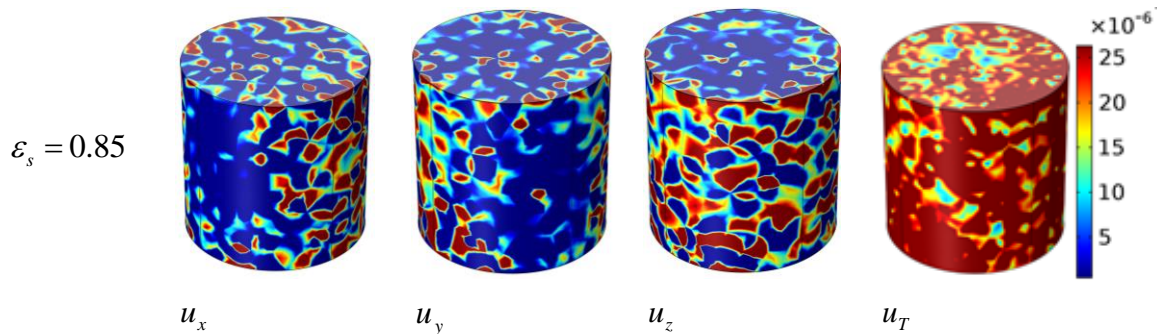
Para este caso, la presión externa a la pastilla es de $P_f = 2.5\text{MPa}$, en las Tablas 12.3 y 12.4 se presentan los coeficientes escalados utilizados para esta simulación.

Tabla 12.3. Valores de \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda simétrica.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|--------|--------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.850 | 0.32274 | 0.32270 | 0.32294 | 1.0137 | 1.0136 | 1.0145 |
| 0.975 | 0.36483 | 0.36483 | 0.36488 | 1.1407 | 1.1407 | 1.1408 |

Tabla 12.4. Valores de $\mathbf{s} / (aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda simétrica.

| ε_s | $\mathbf{s} / (aP_g)$ | | |
|-----------------|-----------------------|---------|---------|
| | x | y | z |
| 0.850 | 0.29677 | 0.17946 | 0.12501 |
| 0.975 | 0.18397 | 0.17522 | 0.16771 |



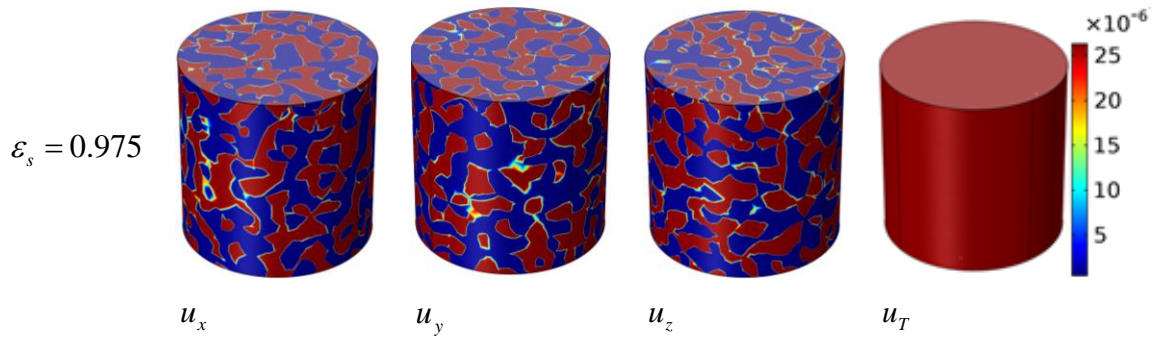


Figura 12.4. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 2\text{MPa}$

Como se observa en la **Figura 12.4**, los campos de desplazamiento, al aumentar la presión, se mantienen dentro del orden de magnitud que el caso a 1MPa. De la misma forma, en la coordenada z es en donde más se aprecia el desplazamiento, contribuyendo al aumento del desplazamiento total.

Como en el caso anterior, cambio en el desplazamiento es más notorio en la coordenada z del sinterizado de 0.850

- *Caso 3. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$*

El cálculo de los coeficientes en la celda asimétrica presenta mayor diferencia en cada uno de los componentes (**Tablas 12.5 y 12.6**), generando una mayor diferencia en los campos de desplazamiento, para este caso de estudio, la presión externa a la pastilla es de $P_f = 2\text{MPa}$.

Tabla 12.5. Valores de \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$ en una celda asimétrica.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|--------|--------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.850 | 0.32273 | 0.32269 | 0.32293 | 1.0137 | 1.0136 | 1.0144 |
| 0.975 | 0.36483 | 0.36483 | 0.36488 | 1.1407 | 1.1407 | 1.1408 |

Tabla 12.6. Valores de $\mathbf{s}/(aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$ en una celda asimétrica.

| ε_s | $\mathbf{s}/(aP_g)$ | | |
|-----------------|---------------------|----------|----------|
| | x | y | z |
| 0.850 | 1.4173 | 0.91107 | 0.73158 |
| 0.975 | 0.056656 | 0.043579 | 0.035958 |

Los experimentos numéricos se muestran en la **Figura 12.5**, en donde se observa que el desplazamiento es mayor para la pastilla con sinterizado de 0.850, sin embargo, en el caso de 0.975 el desplazamiento total es más uniforme.

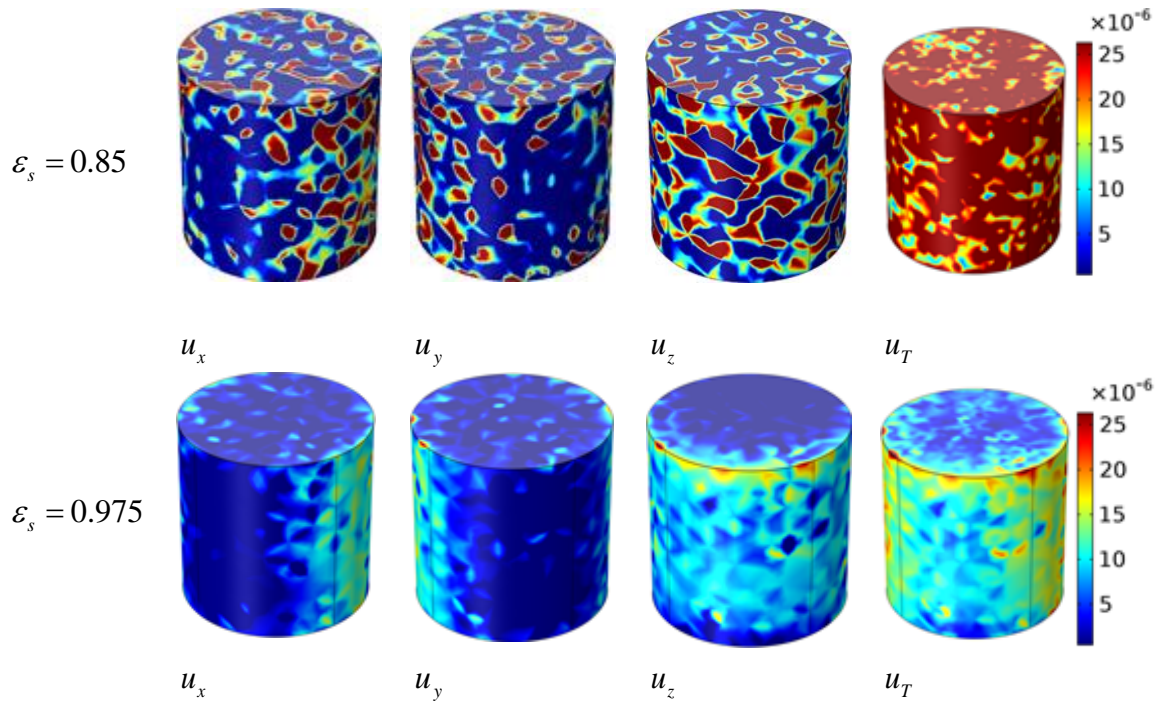


Figura 12.5. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 1\text{MPa}$.

- *Caso 4. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$*

Para este caso, en donde la presión del gas es de 2MPa, se considera una presión externa a la pastilla de $P_f = 2.5\text{MPa}$. Como se observa en las **Tablas 12.7** y **12.8**, los valores de cada componente cambian, siendo mayor el de la coordenada en z .

Tabla 12.7. Valores de \mathbf{E}_1 / E_s y \mathbf{E}_2 / E_s para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda asimétrica.

| ε_s | \mathbf{E}_1 / E_s | | | \mathbf{E}_2 / E_s | | |
|-----------------|----------------------|---------|---------|----------------------|--------|--------|
| | xx | yy | zz | xx | yy | zz |
| 0.850 | 0.32274 | 0.32270 | 0.32294 | 1.0137 | 1.0136 | 1.0145 |
| 0.975 | 0.36483 | 0.36483 | 0.36488 | 1.1407 | 1.1407 | 1.1408 |

Tabla 12.8. Valores de $\mathbf{s} / (aP_g)$ para valores de sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$ en una celda asimétrica.

| ε_s | $s / (aP_g)$ | | |
|-----------------|--------------|----------|----------|
| | x | y | z |
| 0.850 | 1.5116 | 0.97137 | 0.78001 |
| 0.975 | 0.056563 | 0.043500 | 0.035883 |

Los resultados de los campos de desplazamiento se presentan en la **Figura 12.6**, en dónde se observa que a pesar del aumento del gas y de la presión externa de la pastilla, el desplazamiento se mantiene en el orden de magnitud de 10^{-6} , sin embargo, ya se encuentra en el borde superior del rango de color, lo que indica que es el mayor desplazamiento de los cuatro casos del modelo escalado.

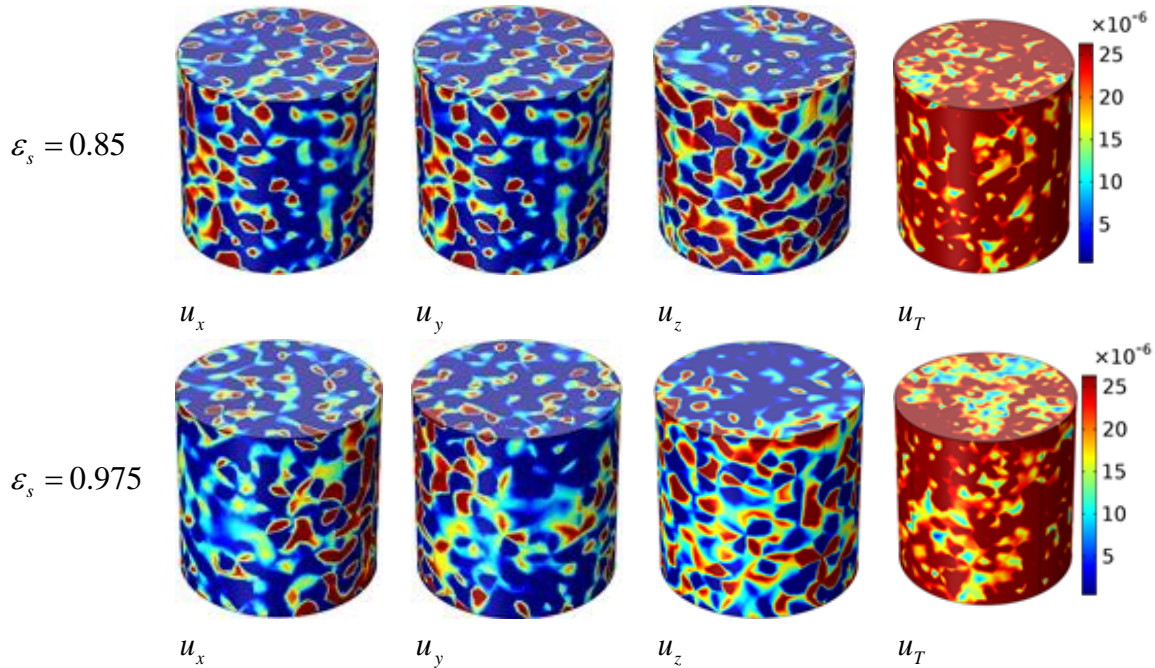


Figura 12.6. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 2\text{MPa}$.

- *Caso 5. Problema directo*

Como se comentó anteriormente, el problema directo está dado por la ecuación (12.4) y por las condiciones de frontera (12.2 y 12.3).

En el caso en que la presión de frontera es de 2 MPa y 2.5MPa, los campos de desplazamiento se presentan en la **Figura 12.7**. Como se observa, el desplazamiento se mantiene en el orden de magnitud de los resultados obtenidos con el modelo escalado.

Al aumentar la presión externa de la pastilla a 2.5MPa, el modelo escalado prácticamente presenta un fuerte desplazamientos en todas las direcciones, culminando en un desplazamiento prácticamente uniforme.

(a)

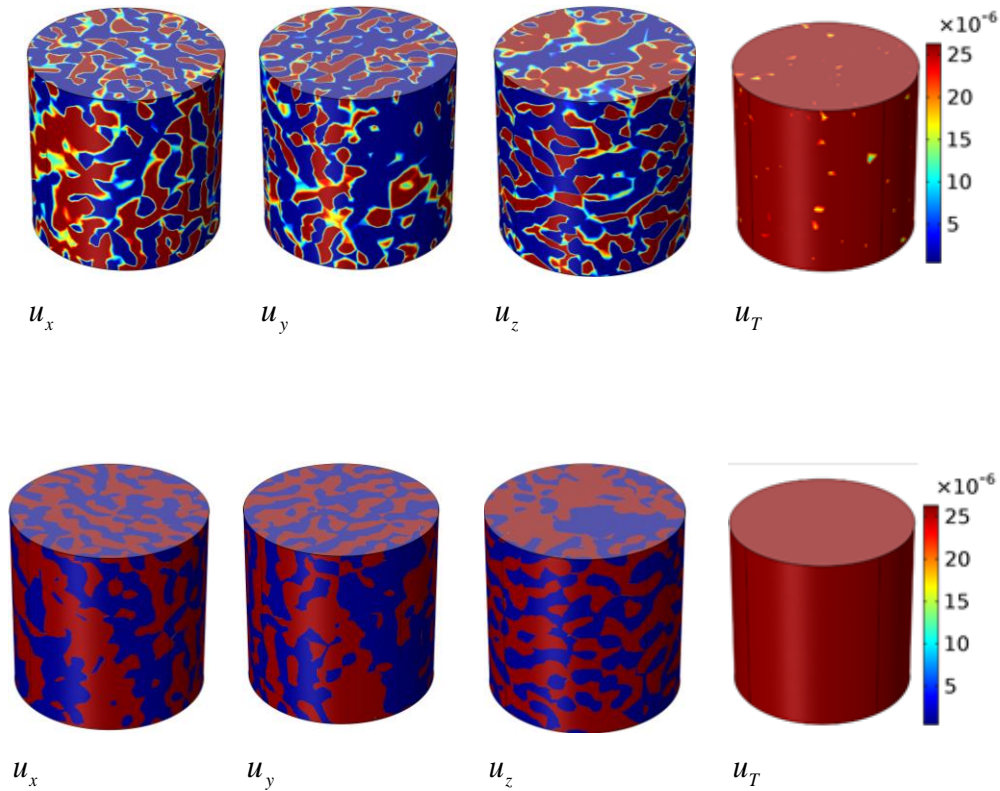


Figura 12.7. Problema directo: (a) $P_f = 2 \text{ MPa}$ y (b) $P_f = 2.5 \text{ MPa}$

12.3. Análisis termomecánico

Para considerar los efectos térmicos el modelo escalado dado por la Ec. (10.4), toma la siguiente forma

$$\varepsilon_s \nabla \cdot \left[\mathbf{E}_1 \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{E}_2 \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{s} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right] = a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \underbrace{\varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}) \rangle^s}_{\langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}) \rangle} \quad (12.7)$$

En este trabajo los efectos térmicos $\mathbf{m}_s(\mathbf{r})$ se calculan con la siguiente ecuación:

$$\mathbf{m}_s(\mathbf{r}) = \alpha_s \left(\lambda_s + \frac{2\mu_s}{3} \right) \nabla T_s \quad (12.8)$$

Esta ecuación se puede escribir en términos del módulo de Young E_s , y del módulo de corte o Poisson ν , se combinan las ecuaciones (7.8), (7.9) y (12.8):

$$\mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) = \alpha_s \left(\frac{E_s(5-4\nu)}{6(1+\nu)(1-2\nu)} \right) \nabla T_s \quad (12.9)$$

donde α_s coeficiente de expansión térmico. El promedio intrínseco de esta ecuación está dado por

$$\langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle = \alpha_s \left(\frac{E_s(5-4\nu)}{6(1+\nu)(1-2\nu)} \right) \langle \nabla T_s \rangle \quad (12.30)$$

Es importante tomar en cuenta que no contamos con un modelo térmico escalado, por lo que se supone que el promedio de fase es apropiado para este análisis. Entonces, se puede considerar que el gradiente de temperatura del sólido, pastilla combustible es aproximadamente igual a la diferencia de temperatura que existe entre la pared externa de la barra combustible y el centro de la barra.

$$\langle \nabla T_s \rangle \approx \frac{\Delta T}{\Delta r} = \frac{T_f - T_0}{r_f - r_0} \quad (12.31)$$

Los valores para E_s y ν se encuentran en la Sección 9. El valor para el coeficiente de expansión térmica es: $\alpha_s = 1.01 \times 10^{-5} K^{-1}$.

La temperatura de la pastilla combustible en la pared externa es de $T_f = 1116K$ y en el centro de pastilla es $T_0 = 866K$. El radio externo es $r_f = 4.5 \times 10^{-3} m$ (Todreas y Kazimi, 1990) y $r_0 = 0m$. En las **Tablas 12.3** y **12.4**, se presentan los coeficientes escalados utilizados para los experimentos numéricos.

Los experimentos numéricos corresponden con los casos analizados en Sección 12.2:

- *Caso 1. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1MPa$*

Los datos utilizados para esta prueba se presentan en la **Tablas 12.1** y en la **Tabla 12.2**. La presión externa a la pastilla es de $P_f = 2MPa$. Los resultados obtenidos del desplazamiento para el caso simétrico y cada componente x , y , z se presenta en la **Figura 12.8**. En estas figuras, además de presentar los componentes del tensor, se presenta la norma del tensor u_T , definida por ecuación (12.7).

En esta figura se puede observar que para un sinterizado mayor, es decir, una fracción volumétrica sólida menor ($\varepsilon_s = 0.85$), la magnitud del desplazamiento en la pastilla combustible varia más con $\varepsilon_s = 0.975$. Para un sinterizado pequeño no hay variación perceptible en la magnitud de desplazamiento, presentando un valor constante de desplazamiento de $2.5 \times 10^{-5} m$, a excepción de la componente y u_z donde se puede

apreciar una zona circular en la parte superior del cilindro de la geometría de la pastilla de combustible donde hay una ligera variación en el desplazamiento, pero ésta no repercute en la magnitud total normalizada, u_T .

El efecto térmico se puede apreciar para los dos valores de ε_s mostrados en este caso, en comparación con el mismo caso sin efectos térmico, **Figura 12.3** de la Sección 12.2. Esta comparación indica que el efecto de la temperatura en la pastilla combustible aumenta la magnitud de desplazamiento.

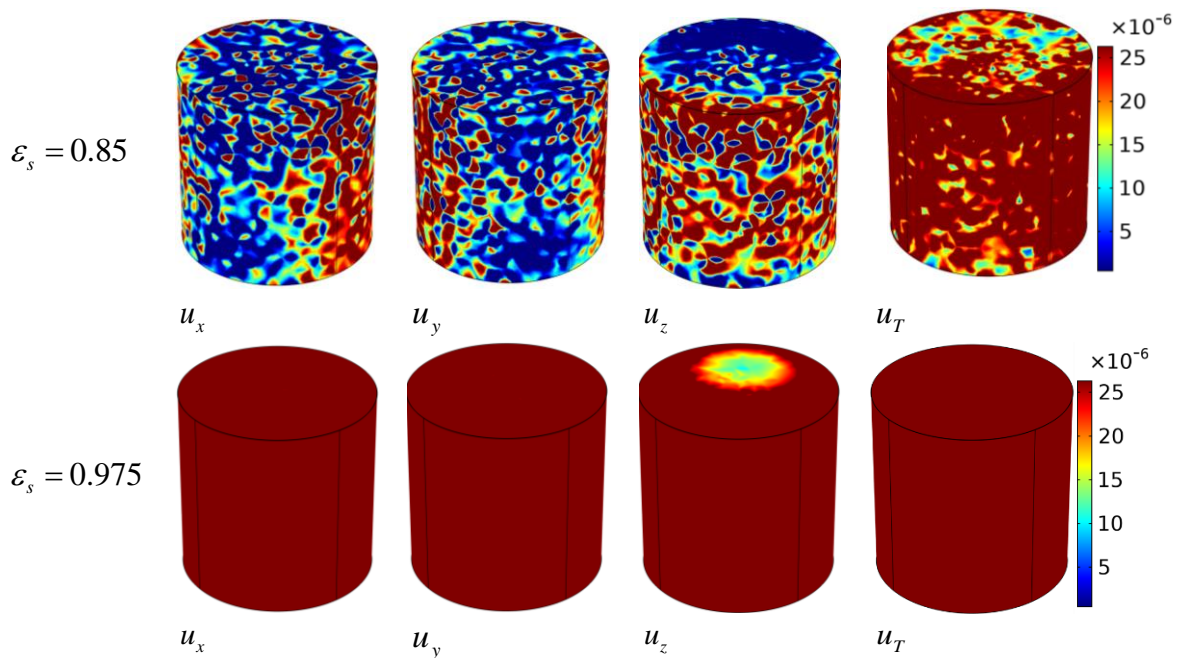


Figura 12.8. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 1\text{MPa}$.

- *Caso 2. Celda simétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$*

Para este caso, la presión externa a la pastilla es de $P_f = 2.5\text{MPa}$.

El objetivo de estas pruebas es analizar el incremento de la presión del sinterizado, de 1 MPa a 2 MPa del gas en el poro. Los resultados se presentan en la **Figura 12.9**. Se puede

observar para $\varepsilon_s = 0.85$, el desplazamiento es mayor, respecto a una presión de 1MPa, en las tres componentes. No obstante, para $\varepsilon_s = 0.975$ este incremento de presión no tiene un efecto relevante en la magnitud del desplazamiento. Esto se debe a que para el valor de $\varepsilon_s = 0.85$ hay mayor cantidad de presencia de poros distribuidos de forma simétrica. De igual forma, en comparación con el caso 2 de la sección 12.2 (**Figura 12.4**), el efecto térmico incrementa el desplazamiento.

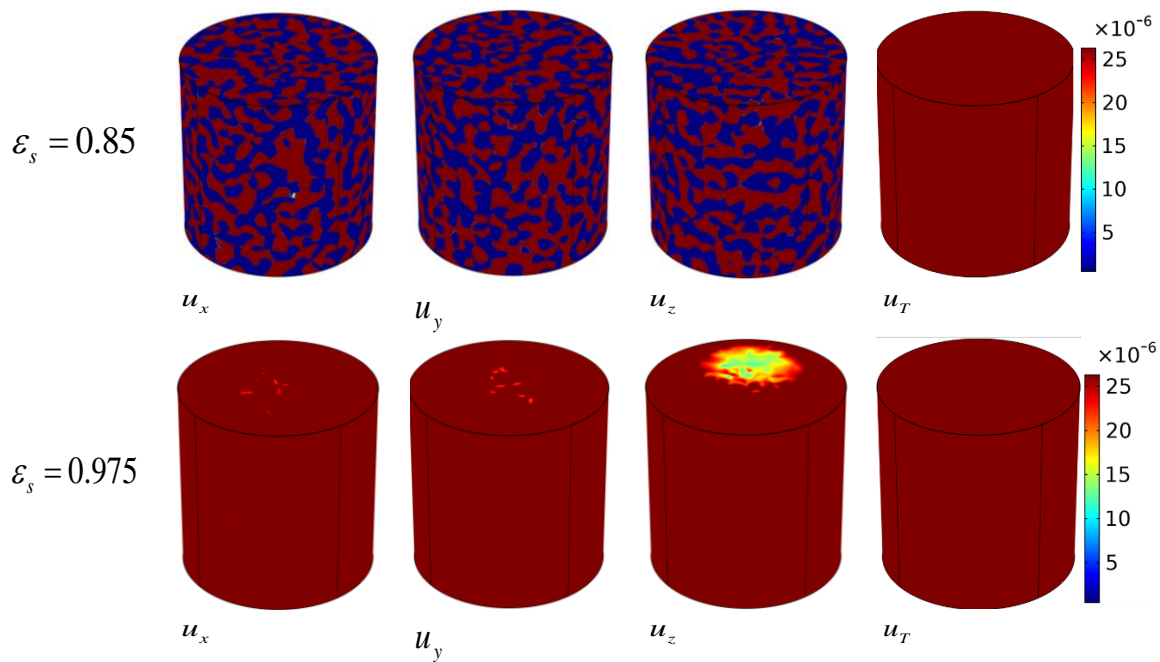


Figura 12.9. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado simétrico a $P_g = 2\text{MPa}$

- *Caso 3. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 1\text{MPa}$*

Para este caso de estudio, la presión externa a la pastilla es de $P_f = 2\text{MPa}$.

Los resultados se presentan en la **Figura 12.10**. El modelo escalado asimétrico a $P_g = 1\text{MPa}$ presenta una distribución del desplazamiento no uniforme, en las tres componentes presenta, siendo más notorio para $\varepsilon_s = 0.85$. Para $\varepsilon_s = 0.975$ se observa menor

uniformidad en las paredes laterales y superior del cilindro, en las componentes u_x y u_y sólo en la parte superior y ligeramente en la parte inferior en la componente u_z . Comparando sin efectos térmicos (Sección 12.2: **Figura 12.5**), se puede apreciar que el efecto térmico incrementa la magnitud del desplazamiento para ambos valores de sinterizado. Es importante señalar que la diferencia entre el caso simétrico y asimétrico es la no uniformidad en el desplazamiento.

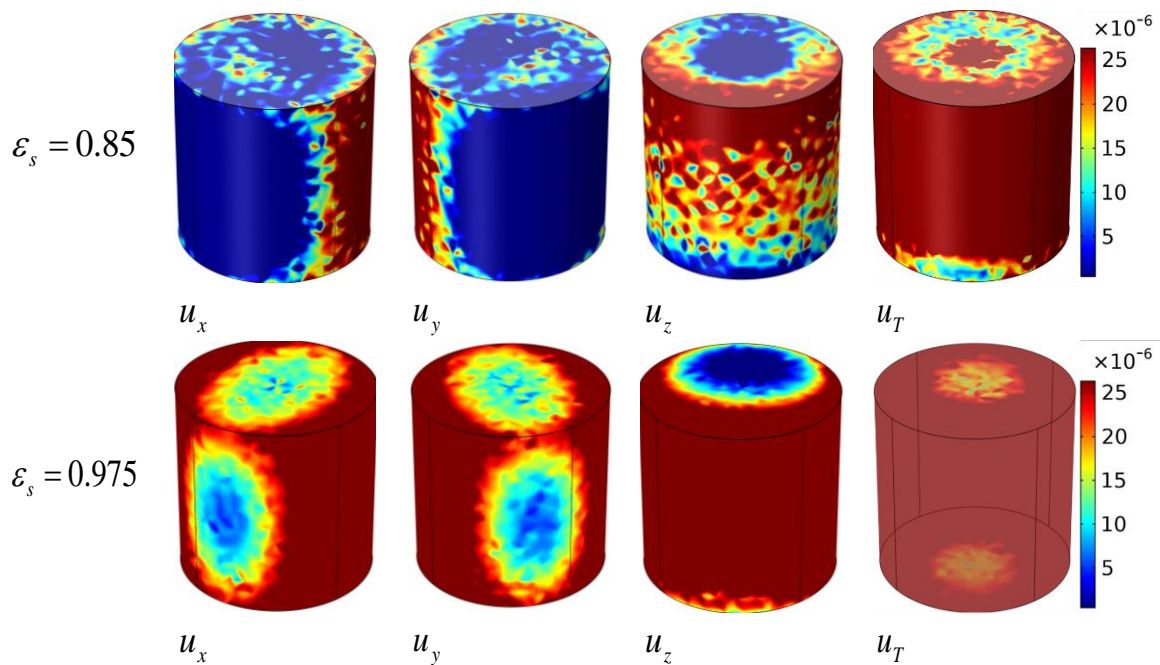


Figura 12.10. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 1\text{MPa}$.

- *Caso 4. Celda asimétrica, sinterizado de $\varepsilon_s = 0.850$ y $\varepsilon_s = 0.975$ y $P_g = 2\text{MPa}$*

Para este caso, en donde la presión del gas es de 2 MPa, se considera una presión externa a la pastilla de $P_f = 2.5\text{MPa}$.

Los resultados de los campos de desplazamiento se presentan en la **Figura 12.11**. Se puede observar que la simetría con un incremento de presión en el poro de $P_g = 2\text{MPa}$, el

desplazamiento es mayor para un sinterizado de $\varepsilon_s = 0.85$ y no hay cambios perceptibles para el sinterizado de $\varepsilon_s = 0.975$, comportamiento similar del Caso 3 con $P_g = 1MPa$. Como en los casos previos, el efecto térmico genera un incremento mayor en el desplazamiento (ver Caso 4 de la Sección 12.2, **Figura 12.6**).

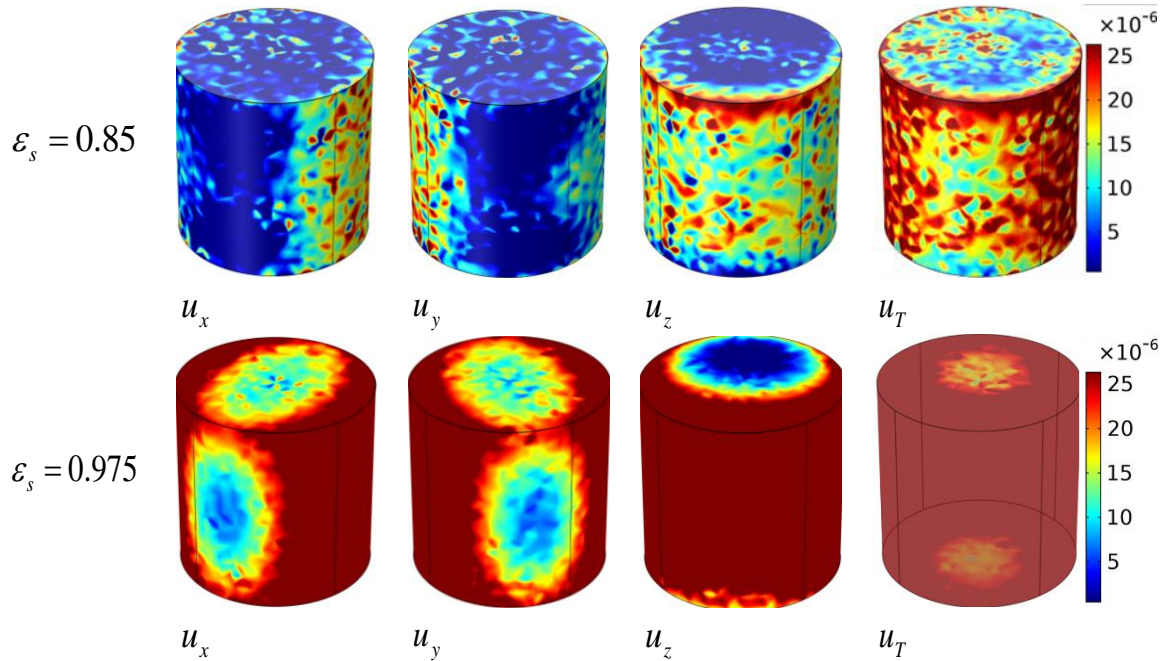


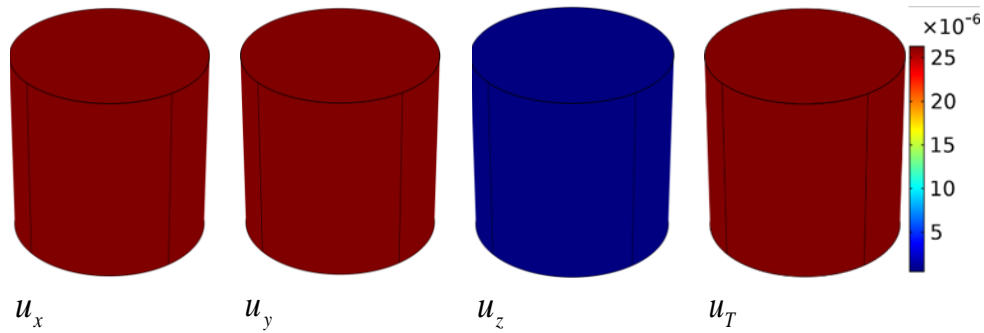
Figura 12.11. Resultado de los experimentos numéricos del modelo escalado asimétrico a $P_g = 2MPa$.

- *Caso 5. Problema directo*

El problema directo está dado por la Ec. (12.4) al que se le agrega la Ec. (12.7) para incluir efectos térmicos. Las condiciones de frontera están dadas por las Ecs. (12.2) y (12.3). Estos escenarios incluyen dos experimentos numéricos para condiciones de frontera con presiones. Los resultados se presentan en la **Figura 2.12**, para presiones de $P_f = 2$ y $2.5 MPa$. En esta figura se puede observar en forma apreciable que el desplazamiento de la componente-z es mayor al incrementar la presión. En todos los

componentes se puede observar un comportamiento uniforme, debido a que los efectos del sinterizado no aparecen en el problema directo. Esto se debe a que el efecto de la presión impacta primero de manera normal sobre las paredes de la combustible y se propaga al interior de la misma dependiendo de las propiedades elásticas de la pastilla. Un aumento en la presión de 0.5 MPa es lo suficientemente significativa para modificar las relaciones de esfuerzo – deformación de la pastilla, la cual presenta un equilibrio mecánico según sus propiedades elásticas e impacta en las componentes del desplazamiento, así como en la magnitud total del mismo.

(a)



(b)

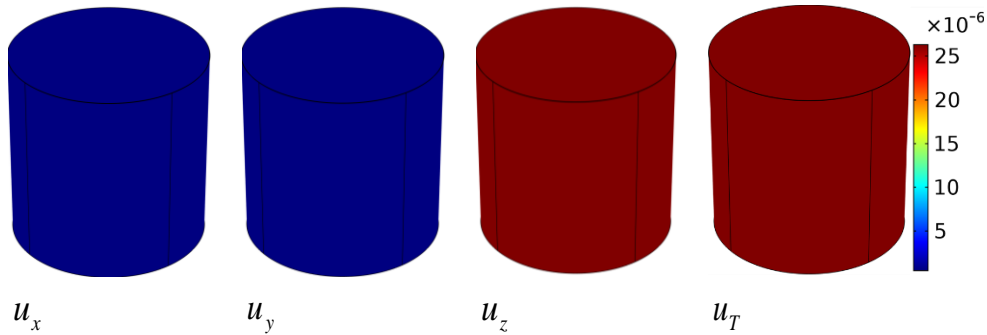


Figura 12.12. Problema directo con efectos térmicos: (a) $P_f = 2\text{MPa}$ y (b) $P_f = 2.5\text{MPa}$.

El efecto del sinterizado tiene un impacto mayor en el desplazamiento que la presión de los poros, la cual es apenas perceptible. Para los casos del modelo directo la distribución de desplazamiento es totalmente uniforme. Considerar el efecto térmico en el modelo escalado predice un comportamiento parecido al que presenta la barra combustible a condiciones de operación, ya que el cambio de temperatura tiene impacto en la expansión térmica de la pastilla combustible.

13. Análisis termomecánico de un Reactor Rápido Enfriado con Plomo con un modelo de corridas rápidas.

Con los resultados de las simulaciones numéricas anteriores, generadas con la aplicación del VAM, se obtienen el valor numérico aproximado de los Módulos de Young de la pastilla combustible para diferentes valores de porosidad, es decir, la fracción volumétrica del gas en la pastilla combustible. Posteriormente, con estos valores se pueden hacer simulaciones numéricas para análisis termomecánicos que consideren toda la barra combustible en su conjunto: pastilla y encamisado o *cladding*, para diferentes tipos de reactores, ya sean Reactores enfriados por Agua Ligera (LWR, por sus siglas en inglés) o Reactores Rápidos enfriados por Plomo (LFR, por sus siglas en inglés).

Una de las motivaciones de este trabajo doctoral es el desarrollo de un modelo de corridas rápidas para el análisis termomecánico de un LFR. Para este trabajo, un modelo mecánico de corrida rápida ha sido acoplado con un modelo de transferencia de calor previamente desarrollado. En un reactor nuclear, una transferencia de calor optima en el combustible es necesaria para evitar fenómenos no deseados relacionados a un incremento repentino de temperatura. Uno de los principales mecanismos de deterioro de la transferencia de calor en el combustible es la expansión térmica de la pastilla combustible y del encamisado, ya que conduce a que éste último se deforme y en algunos casos a que exista pleno contacto entre ellos, causando cargas térmicas y mecánicas que pueden producir falla en la barra combustible. En esta sección se presentan los esfuerzos, deformaciones y desplazamientos

radiales en el encamisado de una barra combustible de un LFR, los cuales son presentados como función de la temperatura. El modelo simplificado fue validado con un modelo de Método de Elemento Finito (FEM, por sus siglas en inglés) peridinámico.

13.1 Breve descripción de códigos basados en modelos termomecánicos.

Hay diferentes tipos de códigos para el análisis del comportamiento termomecánico de la barra de combustible nuclear. La primera aproximación es el uso de códigos simplificados, en los cuales las ecuaciones de transferencia de calor se resuelven y las deformaciones en la barra de combustible nuclear son calculadas basadas en las propiedades del material dadas por un archivo de entrada. Los códigos simplificados están integrados dentro de un sistema de código de análisis (sistemas neutrónicos y/o termohidráulicos) para predecir con más precisión las temperaturas de la pastilla y del encamisado y la transferencia de calor del encamisado hacia el refrigerante. Algunos códigos termohidráulicos de subcanal como COBRA TF (CTF) ([Salko, et al., 2019](#)) and SUBCHANFLOW ([Imke, et al., 2010](#)), han desarrollado modelos termohidráulicos para analizar el comportamiento de la barra combustible obteniendo perfiles de temperatura precisos sobre la malla de la barra combustible. El módulo CTEFuel ([Toptan, et al., 2017](#)) ha sido desarrollado por COBRA TF para simular las respuestas termomecánicas en estado estacionario y transitorio de barras combustible en LWR. Los modelos de desempeño de barra de combustible para la conductividad en la pastilla y en el encamisado, la conductancia en el huelgo (gap), el espesor del gap, y la distribución de la potencia en el interior de la pastilla han sido desarrollados para mejorar la precisión del CTEFFuel para las predicciones de la temperatura de la barra combustible ([Raja, et al., 2017](#)).

Una mayor aproximación es el uso de códigos mecánicos, los cuales pueden calcular de manera directa las propiedades del combustible como una función de las condiciones de operación y los datos previos de la barra combustible (quemado, espectro neutrónico, la posición en el núcleo, etc.) Algunos de esos códigos, especialmente desarrollados para reactores enfriados con agua, incluyen: FRAPCON (Geelhood, et al., 2015), FRAPTRAN (Cunningham, et al., 2001), DRACCAR (Papin, et al., 2006), SCANAIR (Fédérici, et al., 2001), and TRANSURANUS (Lassmann, et al., 1992). Los códigos mecánicos también pueden estar integrados por algunas aplicaciones específicas. La alta fidelidad del completo acoplamiento de los códigos mecánicos, de los códigos de subcanal y de los códigos neutrónicos es posible gracias a la implementación de cómputo de alto rendimiento. Es el caso del código TRANSURANUS que ha sido acoplado con SUBCHANFLOW y con el código Monte Carlo SERPENT (Leppänen, et al., 2013). El método de cálculo está basado en la aproximación estándar neutrónica termohidráulica al remplazar el resolvidor simplificado de la barra combustible en SUBCHANFLOW con el modelo termomecánico más complejo de TRANSURANUS (García, et al., 2020).

La mayoría de los códigos ya mencionados han sido validados para reactores enfriados con agua y son el resultado de enormes proyectos de investigación. En el caso del modelo desarrollado a continuación, el propósito es seguir una estrategia de simplificación para mejorar un modelo propio de transferencia de calor desarrollado previamente, representando los efectos de algunos modelos mecánicos principalmente el fenómeno de expansión térmica, pero como una aproximación y prueba previa se enfoca a reactores de neutrones rápidos en los cuales las cargas térmicas son más altas debido a las altas temperaturas de operación.

De esta manera, un modelo simplificado y de corridas rápidas es desarrollado para el análisis termomecánico de un Reactor Rápido Enfriado con Plomo (LFR, por sus siglas en inglés), cuyos datos están disponibles en la referencia (Grasso, et al., 2014). Este modelo simplificado es parte del proyecto denominado como plataforma AZTLAN para el análisis de reactores nucleares (Gómez-Torres, et al., 2015). Con el propósito de predecir los esfuerzos, las deformaciones y el desplazamiento radial en una barra combustible nuclear de un LFR, el modelo mecánico ha sido acoplado con un modelo de transferencia de calor. El modelo mecánico, aquí presentado, es una simplificación del modelo implementado en el código FRACAS-I (Bohn, et al., 1977) que es usado en FRAPCON, así como también en FRAPTRAN, y también un modelo simplificado similar fue implementado más recientemente en el código FINIX (Ikonen, et al., 2015). El modelo de transferencia de calor del LFR considera tres regiones principales que comprende a la pastilla, al huelgo y al encamisado, tal como el modelo previamente desarrollado (Pérez-Valseca, et al., 2017, 2019). El presente modelo de corridas rápidas es validado con una configuración de Método de Elemento Finido 2D para una sección transversal de una pastilla de combustible (Chen, et al., 2017), y la comparación de resultados muestran que el modelo termo mecánico tiene potenciales aplicaciones para cualquier barra combustible de diferentes tipos de reactores. El objetivo final del conjunto de herramientas aquí aplicadas es tener la capacidad de extender el modelado en la transferencia de calor por conducción en la pastilla combustible para mejorar, en la siguiente etapa, la predicción de la transferencia de calor hacia el refrigerante.

13.2 Caso de referencia: reactor ALFRED.

El reactor ALFRED (*Advanced Lead-cooled Fast Reactor European Demonstrator*) es usado como referencia para este caso de estudio. ALFRED es un LFR de piscina pequeña de 300 MWt, que surgió como un esfuerzo internacional para materializar el diseño de un LFR y para demostrar sus capacidades (Belhocine, et al., 2016, 2019). Los principales parámetros térmicos de ALFRED son presentados en la **Tabla 13.1**.

Una sección transversal del plano del núcleo de ALFRED, así como también las dimensiones de la barra combustible están presentadas en la **Figura 13.1**, donde R_a es el radio del orificio interior (llenado con helio), R_f es el radio de la pastilla, y R_g y R_c son los radios del huelgo y del encamisado, respectivamente. En la **Tabla 13.2** se muestran las principales dimensiones geométricas y las características del núcleo.

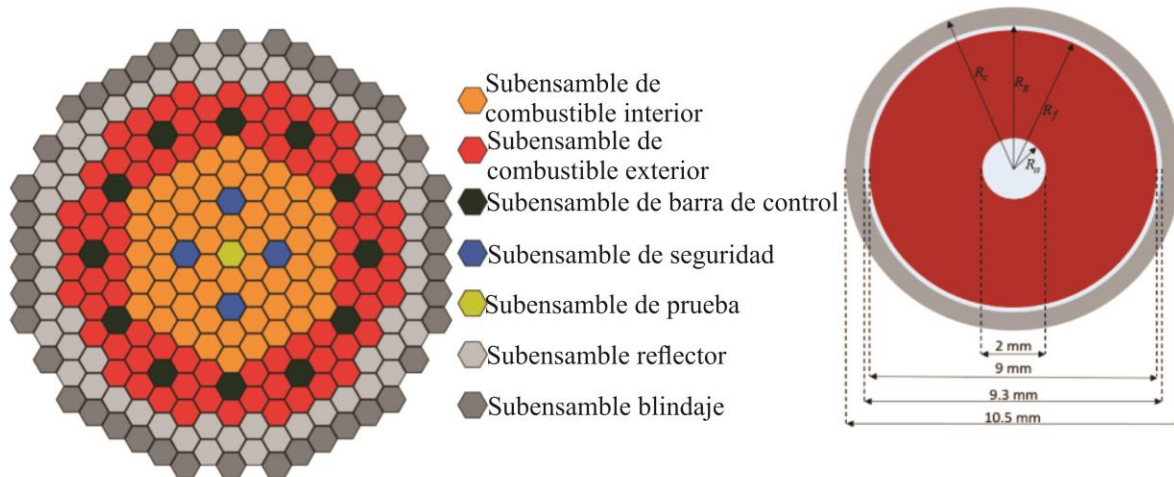


Figura 13.1 A la izquierda plano del núcleo de ALFRED, corte anular. Dimensiones de barra combustible, (Grasso, et al., 2014).

Tabla 13.1 Principales parámetros de ALFRED, (Grasso, et al., 2014).

| Principales parámetros del diseño de ALFRED | |
|---|-------------------|
| Parámetro | Valor |
| Potencia Térmica | 300 MW |
| Concepto del ensamble combustible | Hexagonal cerrado |
| Tipo de combustible | MOX |
| Máxima temperatura del combustible | ≈ 2000 °C |
| Material del clad | SS T91 |
| Máxima temperatura del clad a condiciones nominales | 550 °C |
| Temperatura de entrada del refrigerante | 400 °C |
| Temperatura de salida del refrigerante | 480 °C |
| Máxima velocidad del refrigerante | 2.0 m/s |
| Máxima temperatura del clad durante ULOF | 750 °C |

Tabla 13.2 Dimensiones geométricas y características de la barra de combustible del reactor ALFRED (Grasso, et al., 2014).

| <i>Barra combustible</i> | |
|-------------------------------|----------|
| Radio del orificio interior | 1.0 mm |
| Radio de pastilla combustible | 4.5 mm |
| Radio interno del cladding | 4.65 mm |
| Radio externo del cladding | 5.25 mm |
| Pitch del pin combustible | 13.6 mm |
| <i>Ensamble combustible</i> | |
| Número de pines por ensamble | 127 |
| Pared interior del canal | 156.0 mm |
| Pared externa del canal | 163.0 mm |
| Pitch del subensamble | 167.0 mm |

13.3 Modelo matemático

A continuación, se hace la descripción de las ecuaciones del modelo y las consideraciones que se toman en cuenta para desarrollar el modelo termomecánico que permite la predicción y análisis de los esfuerzos, la deformación y los desplazamientos en el encamisado de la barra combustible. Para obtener los perfiles de temperaturas en el encamisado se usa un modelo de transferencia de calor previamente desarrollado, (Espinosa-Paredes, et al., 2017).

Modelo termomecánico

Las ecuaciones gobernantes de la elasticidad mecánica en el comportamiento de sólidos son de tipo lineal, esto tiene las siguientes implicaciones: las ecuaciones relacionadas a la deformación y al desplazamiento es lineal y la ecuación de esfuerzo es también lineal. Sin embargo, muchos fenómenos de carácter no lineal ocurren en la mecánica estructural. De acuerdo con la aproximación de estos fenómenos, es necesario extender el método de cálculo numérico para hacerlos consistentes con la no linealidad. De esta forma, fenómenos tales como la plasticidad y el deslizamiento u otras complejas ecuaciones constitutivas (la ecuación que expresa la relación entre el esfuerzo y la deformación); la cual cubre el rango completo de la mecánica de sólidos, puede ser remplazada por relaciones de elasticidad lineales. Esta aproximación se explica a continuación.

Las ecuaciones constitutivas están basadas en la teoría de deformación infinitesimal (Bower, et al., 2011). La expresión que relaciona la deformación con el desplazamiento es lineal, pero el problema no lineal ocurre en la expresión que relaciona el esfuerzo y la deformación. Para analizar este problema, un método general que reemplaza las relaciones no lineales entre el esfuerzo y la deformación por una relación lineal es propuesta.

Así, para el modelo mecánico en la barra combustible, se hacen las siguientes consideraciones:

- Se asume que la pastilla combustible tiene un módulo de elasticidad infinito (pastilla mecánicamente rígida).
- La deformación térmica y la recolocación radial del combustible se consideran a través del uso de correlaciones.
- El desplazamiento radial de la superficie externa de la pastilla combustible es calculado por la integración de las deformaciones a lo largo del radio de la pastilla.
- El esfuerzo axial es calculado usando la temperatura en la superficie externa de la pastilla combustible por los esfuerzos térmicos.
- La deformación por densificación y por el hinchamiento también son incluidos en la deformación axial, pero la deformación generada por la recolocación de la pastilla es despreciada.

En el caso del modelo mecánico del encamisado se hacen las siguientes consideraciones (Geelhood, et al., 2015, Cummingham, et al., 2001, Bohn, et al., 1977, Ikonen, et al. 2015):

- Se asume que el encamisado tiene un comportamiento elástico; por lo tanto, por ahora las deformaciones plásticas no se consideran en este modelo.
- Hay limitaciones en situaciones donde los esfuerzos no exceden el punto de rendimiento del encamisado, y son relativamente transitorios cortos.

- La deformación es asumida como perpendicularmente isotrópica en la dirección axial y, por lo tanto, la deformación diametral es utilizada para la deformación térmica radial y circunferencial: $\varepsilon_r^{th} = \varepsilon_\theta^{th}$
- Se consideran dos sub-modelos (simplificados):
 - 1) El huelgo permanece abierto y el equilibrio mecánico es determinado simultáneamente con el cálculo de la presión interna.
 - 2) El huelgo está cerrado y el balance es determinado por una consideración de no deslizamiento de arrastre entre la pastilla y el encamisado.

Las relaciones entre la deformación, el desplazamiento y el esfuerzo son (Youho, et al., 2017):

$$\varepsilon_r = \frac{du}{dr} = \frac{1}{E} [\sigma_r - \nu(\sigma_\theta + \sigma_z)] + \alpha_T \Delta T \quad (13.1)$$

$$\varepsilon_\theta = \frac{u}{r} = \frac{1}{E} [\sigma_\theta - \nu(\sigma_r + \sigma_z)] + \alpha_T \Delta T \quad (13.2)$$

$$\varepsilon_z = \varepsilon_0 = \frac{1}{E} [\sigma_z - \nu(\sigma_r + \sigma_\theta)] + \alpha_T \Delta T \quad (13.3)$$

donde ε es la deformación, σ es el esfuerzo, u es el desplazamiento, E es el módulo de elasticidad de Young, ν es la relación de Poisson, α_T es el coeficiente de expansión térmica lineal, y T es la temperatura del encamisado. Los subíndices r, θ, z son los relacionados a las coordenadas cilíndricas.

El desplazamiento como función del radio es (Youho, et al., 2017):

$$u = C_1 r + \frac{C_2}{r} + \left(\frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \frac{\alpha_T}{r} \int \Delta T r dr \quad (13.4)$$

donde C_1 y C_2 son constantes para ser determinadas por las condiciones de frontera.

Sustituyendo la ecuación. (13.4) en las ecuaciones (13.1) – (13.3), los esfuerzos en los tres ejes pueden ser obtenidas:

$$\sigma_r = \frac{E}{1+\nu} \left(\frac{C_1}{1-2\nu} + \frac{C_2}{r^2} + \frac{\nu \varepsilon_0}{1-2\nu} \right) - \frac{\alpha_T E}{(1-\nu)r^2} \int \Delta T r dr \quad (13.5)$$

$$\sigma_\theta = \frac{E}{1+\nu} \left(\frac{C_1}{1-2\nu} + \frac{C_2}{r^2} + \frac{\nu \varepsilon_0}{1-2\nu} \right) + \frac{\alpha_T E}{(1-\nu)r^2} \int \Delta T r dr - \frac{\alpha_T E \Delta T}{1-\nu} \quad (13.6)$$

$$\sigma_z = E \varepsilon_0 + \frac{2\nu E C_1}{(1+\nu)(1-2\nu)} + \frac{2\nu^2 E \varepsilon_0}{(1+\nu)(1-2\nu)} - \frac{\alpha_T E \Delta T}{1-\nu} \quad (13.7)$$

El equilibrio mecánico está dado por la siguiente relación, (Youho, et al., 2017):

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} = 0 \quad (13.8)$$

Esta suposición implica que no hay rotación en el encamisado sobre el eje longitudinal, y cuando hay contacto entre la pastilla y el encamisado, la sección transversal del encamisado permanece intacta, es decir, no hay deslizamiento en el encamisado.

$$\sigma_r = cte \therefore \frac{\partial \sigma_r}{\partial r} = 0 \quad \text{y} \quad \Delta T = cte \quad (13.9)$$

Así

$$\sigma_r = \sigma_\theta \quad \text{y} \quad C_2 = 0 \quad (13.10)$$

El valor del esfuerzo, cuando la barra combustible está fría, está dado por:

$$\sigma_r = \frac{P + P_0}{2} \quad (13.11)$$

$$\sigma_\theta = \frac{R_{ci}P - R_{co}P_0}{R_{co} - R_{ci}} \quad (13.12)$$

$$\sigma_z = \frac{R_{ci}^2P - R_{co}^2P_0}{R_{co}^2 - R_{ci}^2} \quad (13.13)$$

con las siguientes condiciones de frontera

$$\sigma_r|_{R_{ci}} = -P \quad \text{C.F.1}$$

$$\sigma_r|_{R_{co}} = -P_0 \quad \text{C.F.2}$$

donde R_{ci} es el radio interior del encamisado frío, R_{co} es el radio exterior del encamisado frío, P es la presión del gas en el hueco (presión en la cara interna del encamisado), y P_0 es la presión del refrigerante (presión en la cara externa del encamisado). El coeficiente de expansión térmica lineal para el T91 está dado por ([Matmatch, 2020](#)):

$$\alpha_{Tclad} = -1 \times 10^{-18} T^4 + 6 \times 10^{-15} T^3 - 1 \times 10^{-11} T^2 + 1 \times 10^{-8} T + 8.10 \times 10^{-6} \quad (13.14)$$

y el valor de la relación de Poisson para este caso es $\nu_{clad} = 0.3$.

Si no hay contacto entre la pastilla y el encamisado, la presión es calculada por:

$$P = (4.8T^{-0.999}) \frac{R_v T}{P.M} \quad (13.15)$$

y el valor de las constantes para el esfuerzo son $C_1 = -6.727 \times 10^{-5}$ y $\varepsilon_0 = -7.077 \times 10^{-5}$

Cuando hay contacto entre la pastilla y el encamisado, la presión está dada por la ecuación (13.16):

$$P = E_{pellet} \frac{R_{pellet} - R_{gap}}{R_{pellet}} \quad (13.16)$$

Las constantes de esfuerzo, en este caso, son $C_1 = -1.052 \times 10^{-4}$ y $\varepsilon_0 = 1.831 \times 10^{-4}$.

Modelo de transferencia de calor

El modelo termomecánico requiere la temperatura del encamisado para calcular la deformación y el esfuerzo, esta temperatura es obtenida del cálculo de la transferencia de calor anular en la barra combustible. En el modelo térmico desarrollado los perfiles de temperatura axial y radial de pastilla, huelgo y encamisado y del refrigerante de plomo fueron obtenidos (Espinosa-Paredes, et al., 2017). El modelo está basado en la transferencia de calor por conducción en la pastilla, huelgo y encamisado, ecuaciones (13.17)-(13.23), incluyendo la interacción en la temperatura del plomo en la condición de frontera, ecuación. (13.23). En este caso, la fuente de calor es considerada como una potencia volumétrica nominal, ecuación (13.24). En el modelo, la temperatura del orificio interno no fue considerada porque es lo suficientemente pequeña.

La distribución de temperatura en el plano anular de la barra combustible está dada por:

$$\left(\rho C_p\right)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \frac{k_f}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) + q'''(t, z) \quad \text{Pastilla} \quad R_a \leq r \leq R_f \quad (13.17)$$

$$\left(\rho C_p\right)_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{k_g}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) \quad \text{Huelgo} \quad R_f \leq r \leq R_g \quad (13.18)$$

$$(\rho C_p)_c \frac{\partial T_c}{\partial t} = \frac{k_c}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_c}{\partial r} \right) \quad \text{Encamisado} \quad R_g \leq r \leq R_c \quad (13.19)$$

La condición inicial está dada por $T(r, 0) = f(r)$, y las condiciones de frontera son:

$$\frac{\partial T_f}{\partial t} = 0 \quad \text{en} \quad r = R_a \quad (13.20)$$

$$-k_g \frac{\partial T_g}{\partial r} = h_g (T_f - T_g) \quad \text{en} \quad r = R_f \quad (13.21)$$

$$-k_c \frac{\partial T_c}{\partial r} = h_g (T_g - T_c) \quad \text{en} \quad r = R_g \quad (13.22)$$

$$-k_c \frac{\partial T_c}{\partial r} = h_l (T_c - T_l) \quad \text{en} \quad r = R_c \quad (13.23)$$

En estas ecuaciones ρ es la densidad, C_p es el calor específico, k es la conductividad térmica, h_l es el coeficiente de transferencia de calor del plomo, h_g es la conductancia del huelgo, y $q'''(t, z)$ es la fuente de calor dada por:

$$q'''(t, z) = \frac{P(t, z)}{V_f} \quad (13.24)$$

donde $P(t, z)$ es la potencia del canal y V_f es el volumen del combustible. La densidad, calor específico, conductividad térmica del combustible están en función de la temperatura y están presentadas en la **Tabla 13.3**. En la **Tabla 13.4** las propiedades térmicas del huelgo (helio) y encamisado (SS T91) son presentadas.

Tabla 13.3 Propiedades térmicas de la pastilla combustible, (Carbajo, et al., 2001).

| |
|--|
| $\rho_f [kg \cdot m^{-3}] = (11043.5)(9.9672 \times 10^{-1} + 1.179 \times 10^{-5} T - 2.429 \times 10^{-9} T^2 - 1.219 \times 10^{-12} T^3)^{-3}$ |
| $Cp_f [J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}] = (0.85) \left[(90.998 \times 10^6 A)(A-1)^1 T^{-2} + 1.6926 \times 10^{-2} T + 1.620 \times 10^{12} T^{-2} \right] + (0.15) \left[(111.275 \times 10^6 B)(B-1)^1 T^{-2} + 2.9558 \times 10^{-2} T \right]$ |
| $k_f [W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}] = (1.158) \left[(0.1205 + 2.6455 \times 10^{-4} T)^{-1} + (6400 \times e^{-16.35/\tau}) \tau^{-5/2} \right]$ |

Tabla 13.4 Propiedades térmicas del huelgo y del encamisado, (Glasstone, et al., 1981).

| Propiedad | Huelgo | Encamisado |
|-------------------------------------|-------------------------------|------------|
| $\rho [kg \cdot m^{-3}]$ | 2.425 | 7700 |
| $Cp [J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}]$ | 5191 | 622 |
| $k [W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}]$ | $15.8 \times 10^{-4} T^{0.7}$ | 26 |
| $h [W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}]$ | 6000 | - |

El coeficiente de transferencia de calor de la ecuación (13.23) está dado por $h_l = k_l Nu / D_h$, donde k_l es la conductividad térmica del plomo, D_h es el diámetro equivalente y Nu es el número de Nusselt.

Una distribución de temperatura típica es ilustrada en la **Figura 13.2** (Pérez-Valseca, et al., 2017, Espinosa-Paredes, et al., 2017). Para este trabajo, el perfil de interés es el de la temperatura del encamisado. En la **Figura 13.2a**, es presentado el perfil de temperatura axial del encamisado, el cual es usado para obtener los perfiles axiales de parámetros termo mecánicos. Por otro lado, en la **Figura 13.2b** es presentado el perfil radial a diferentes niveles de altura axial para observar la influencia de la distribución axial. El perfil de

temperaturas en el encamisado es necesario para calcular el desplazamiento y esfuerzos en el modelo termomecánico.

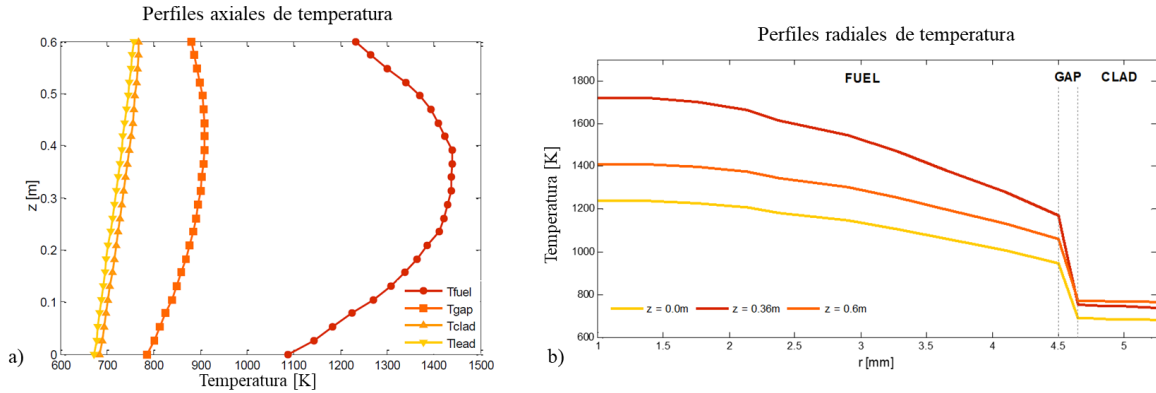


Figura 13.2 Perfiles de temperatura de la pastilla, el huelgo, el encamisado y el plomo, a) perfil axial y b) perfil radial en $z = 0$ m, $z = 0.36$ m y $z = 0.6$ m.

El cálculo de la transferencia de calor en la barra combustible requiere del conocimiento de la fuente de calor nuclear y de las propiedades térmicas del refrigerante, el modelo de transferencia de calor en la barra combustible se ha presentado en un trabajo previo (Pérez-Valseca, et al., 2017). En este trabajo de investigación se aplicó un análisis de subcanal para obtener la predicción del comportamiento del refrigerante en el núcleo para el análisis de la barra combustible y su refrigerante. De esta manera, la temperatura del refrigerante puede ser calculada y es posible tener retroalimentación entre el encamisado y el refrigerante.

Retroalimentación entre modelos.

El modelo termomecánico requiere información del encamisado para poder calcularse los esfuerzos, la deformación y los desplazamientos. Las ecuaciones. (13.1)-(13.2), la deformación es calculada en función de la temperatura para conocer la contribución de la expansión térmica. Al mismo tiempo, aquellas ecuaciones están en función del esfuerzo, las

cuales, a su vez, son función de la temperatura, de esta forma hay ecuaciones explícitas que se muestra en las ecuaciones. (13.11) – (13.13). Además, el desplazamiento es una función de la temperatura, impactando directamente por el coeficiente de expansión térmico. Con base en esta discusión, se debe plantear un algoritmo para resolver el acoplamiento. Los pasos de implementación propuestos para obtener el comportamiento termo mecánico son los siguientes:

- Calcular la fuente de calor en el combustible nuclear, obteniendo la fuente de potencia para el modelo de procesos neutrónicos, usando ecuaciones de cinética neutrónica (Pérez-Valseca, et al., 2017).
- Con el término de fuente de calor, se calcula la temperatura en el encamisado usando un modelo de transferencia de calor iterativo, donde se hace iteraciones con la temperatura del refrigerante.
- Una vez que se conoce la temperatura del encamisado, y las propiedades mecánicas del encamisado son calculadas, la estimación de los parámetros termomecánicos comienza.

El modelo desarrollado contiene dos subrutinas, una para cada uno de los dos casos: con contacto entre la pastilla y el encamisado (c-c) y otro en el que no hay contacto entre ambos (s-c). Se considera a la pastilla combustible como un elemento totalmente elástico.

Cuando hay contacto entre la pastilla combustible y el encamisado, se considera que tanto la pastilla como el encamisado conforman un cilindro completo, de esta manera, los esfuerzos $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$ y las deformaciones mecánicas $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta, \varepsilon_z$ dependen principalmente de la longitud del radio externo del encamisado R_{co} . La presión antes del contacto $P_{\text{before contact}}$ es

calculada con la información de las variables térmicas del gas del huelgo. Se hace el cálculo directo de los esfuerzos y del desplazamiento con las ecuaciones previamente presentadas y finalmente, la presión del contacto entre la pastilla y el encamisado P_{contact} es obtenida.

Para el caso en el cual no hay (s-c), los radios internos y externos del encamisado R_{co} y R_{ci} se usan para conocer la distribución de esfuerzos mecánicos $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$ y las deformaciones $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta, \varepsilon_z$. Ya que, desde el principio, se conocen las magnitudes de R_{ci} y R_{co} , se usa una suposición del valor inicial para cada término: $R_{ci,n}$ y $R_{co,n}$, usualmente, los valores que se suponen son muy cercanos a los radios en frío del encamisado ($R_{ci,cold}$ y $R_{co,cold}$). Se implementa una iteración numérica Newton-Rhapson para calcular los nuevos valores del radio interno y externo del encamisado $R_{ci,n+1}$ y $R_{co,n+1}$ hasta que la convergencia es alcanzada.

Ejercicio de verificación para el modelo de desplazamiento del combustible.

Para verificar el modelo propuesto, se compara con una referencia de Método de Elemento Finito (FEM, por sus siglas en inglés) 2D para una configuración de una sección transversal de una pastilla combustible (Chen, et al., 2017). La comparación fue hecha con respecto a un modelo de desplazamiento de la pastilla de combustible, que también es comparada contra modelos peridinámicos basados en modelos de vínculo regular e irregular (rBPD e irBPD, respectivamente) con mallas de dominio regular e irregular (Chen, et al., 2017). Este modelo de referencia es parte del sistema de trabajos del *Idaho National Laboratory's Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment* (Gaston, et al., 2009). El modelo consiste en un disco 2D el cual es la sección transversal de una pastilla combustible de 4.1

mm de radio y 10 mm de alto. Las propiedades del material usadas se muestran en la **Tabla 13.5**.

Tabla 13.5 Propiedades del material del disco 2D para la verificación del modelo, (Chen, et al., 2017).

| Propiedades físicas | Valor |
|--|----------------------------|
| Módulo de Young | 2.0 E-05 N/mm ² |
| Constante de Poisson | 0.345 |
| Conductividad térmica | 5.0 mW/mmK |
| Coefficiente de expansión térmica lineal | 1 E-05 K ⁻¹ |
| Temperatura de referencia. | 300 K |

Para probar el modelo de desplazamiento, el modelo de transferencia de calor que se usó previamente ha sido reemplazado por una distribución de temperatura radial obtenida con el modelo irBPD que considera una fuente de calor térmica de 473.39 mW/mm³ aplicada al dominio entero. La distribución de temperatura 2D se muestra en la **Figura 13.3**. Una comparación detallada del desplazamiento a lo largo de la dirección radial se muestra en la **Figura 13.4**. Se encontró una buena coincidencia del modelo propuesto (Modelo en la gráfica) con los resultados presentados en la referencia mencionada (Chen, et al., 2017, 2019).

De acuerdo con la comparación de resultados con FEM, rBPD, y irBPD, el modelo propuesto en este trabajo de investigación muestra una potencial aplicación para trabajos a futuros más a fondo.

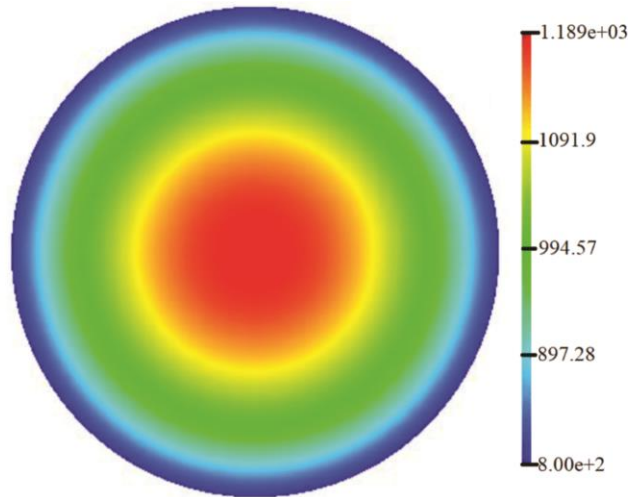


Figura 13.3 Distribución 2D de la temperatura en Kelvin del modelo de referencia, (Chen, et al., 2017).

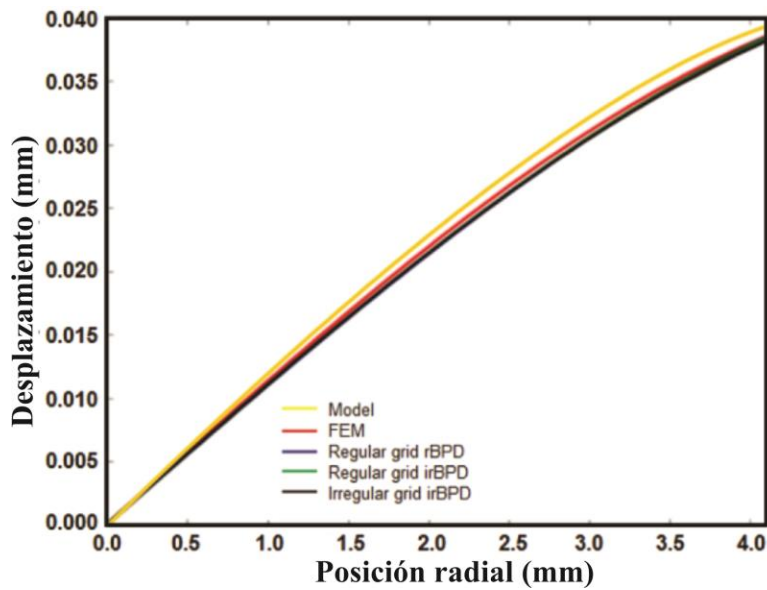


Figura 13.4 Comparación detallada de la distribución del desplazamiento a lo largo de la dirección radial, (Chen, et al., 2017).

13. 4 Resultados numéricos

Los resultados de las simulaciones numéricas para el esfuerzo, la deformación y el desplazamiento radial en la barra combustible de un LFR son presentados como una función de la temperatura. Se presentan dos casos: 1) Con contacto entre la pastilla

combustible y el encamisado (c-c) y 2) sin contacto entre la pastilla combustible y el encamisado (s-c). También, se presenta al esfuerzo radial, a la deformación radial y a al desplazamiento radial como una función de la posición axial, debido a que la distribución de potencia en el reactor nuclear varía enormemente como una función de la altura de la barra combustible. En la **Figura 13.5** se presentan los esfuerzos transversales y axiales en la barra combustible para los casos c-c y s-c. Los esfuerzos en la dirección radial y en la dirección angular son iguales en la sección transversal para la misma posición del eje axial. Esto representa bien el hecho de que, cuando no hay contacto entre la pastilla combustible y el encamisado, no hay rotación sobre el eje axial.

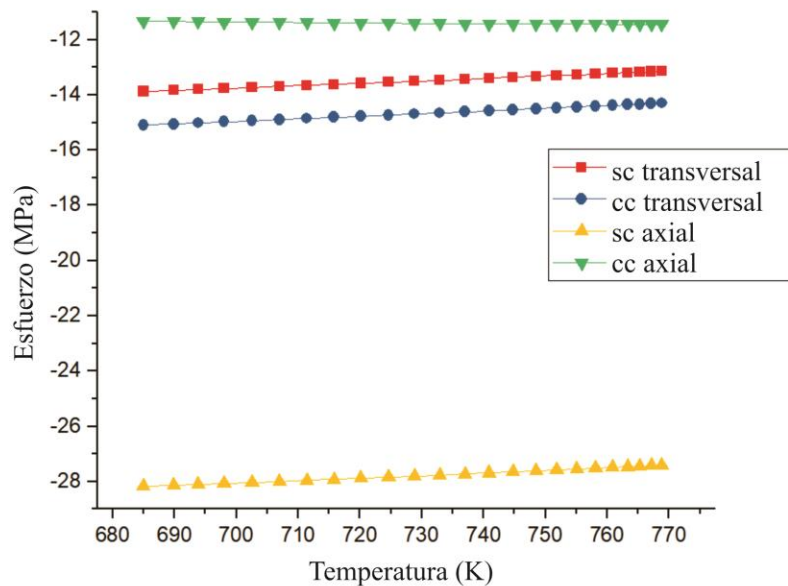


Figura 13.5 Esfuerzos transversal y axial en la barra combustible, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c).

Una vez que hay contacto entre la pastilla combustible y el encamisado, la pared interna del encamisado no se adhiere y resbala sobre la pared externa de la pastilla combustible, ni de manera paralela ni lateralmente.

Un incremento en la temperatura tiene su impacto en el término que incluye al coeficiente de expansión térmico lineal, mientras que, en la parte mecánica de la ecuación de distribución de esfuerzos, la presión del refrigerante y del gas del huelgo, así como también las propiedades elásticas son las que más impactan en tal término. Como se esperaba de manera física, un incremento en la temperatura del refrigerante aumenta la magnitud de la distribución de esfuerzos en el encamisado. Esto se observa en la dirección radial y angular, mientras que en la dirección axial cuando hay contacto entre la pastilla combustible y el encamisado, hay un ligero decremento en la magnitud de los esfuerzos cuando la temperatura del refrigerante aumenta.

El comportamiento de la deformación, mostrado en la **Figura 13.6**, es similar al del esfuerzo sobre el área de la sección transversal, radial, y angular deformación. Hay un incremento en la deformación del encamisado cuando la temperatura del refrigerante aumenta, independientemente para los dos casos en estudio (c-c y s-c). En la dirección radial, hay una ligera disminución en la deformación, esto es debido a la consideración del equilibrio mecánico, los esfuerzos radiales y angulares son iguales, y hay un balance en las magnitudes los términos de la ecuación (13.3).

De las **Figura 13.5** y **Figura 13.6**, se pueden confirmar dos aseveraciones con respecto al comportamiento del esfuerzo y de la deformación. Primero, cuando hay contacto entre la pastilla combustible y el encamisado, ambos, la deformación y el esfuerzo aumentan. Segundo, el incremento (debido al contacto entre pastilla y encamisado) en la dirección axial es mucho más alta que en la dirección transversal. El contacto entre pastilla y encamisado es una de las principales razones que pueden causar la falla de la barra de combustible debido a fracturas en el encamisado, por lo tanto, el modelo termo mecánico

debe simularlo correctamente. Los resultados obtenidos corroboran el hecho de que el modelo no considera la rotación sobre el eje z, y cuando hay contacto entre la pastilla y el encamisado, la sección transversal del encamisado permanece intacta, es decir, no hay deformación y el esfuerzo aumenta, el mismo comportamiento puede observarse para la deformación ya que, como se puede apreciar en la ecuación (13.3), es una función del esfuerzo.

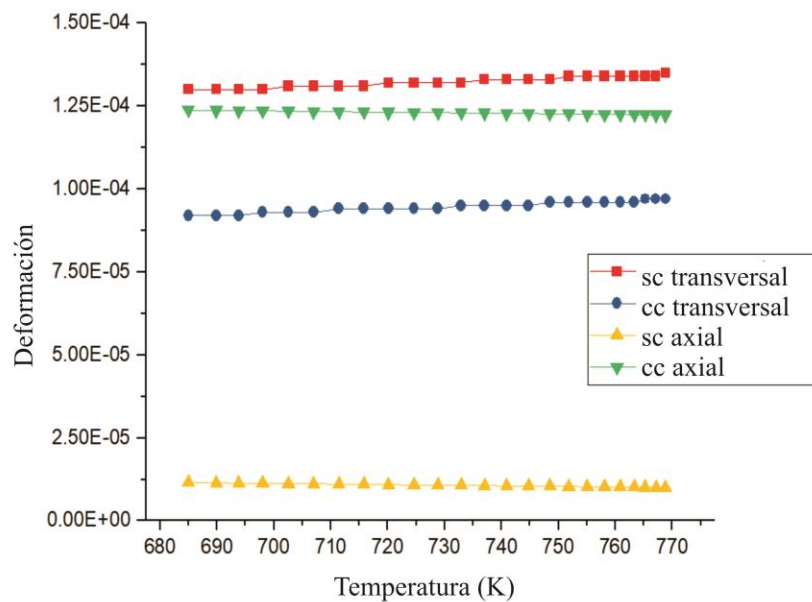


Figura 13.6 Deformación transversal y axial en la barra combustible, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c).

Con respecto al desplazamiento radial en la **Figura 13.7** un incremento se observa un incremento en el valor absoluto cuando hay contacto entre la pastilla y el encamisado, tal como se esperaba como en los casos del esfuerzo y de la deformación ya que la deformación es una función del desplazamiento, ecuación (13.1). En esta figura, se muestra el desplazamiento para diferentes nodos radiales del encamisado. Se corrobora que, para un incremento de temperatura, hay de igual manera un incremento para el desplazamiento,

nuevamente esto se explica ya que de la ecuación (13.4) se establece que el desplazamiento está en función del cambio de temperatura.

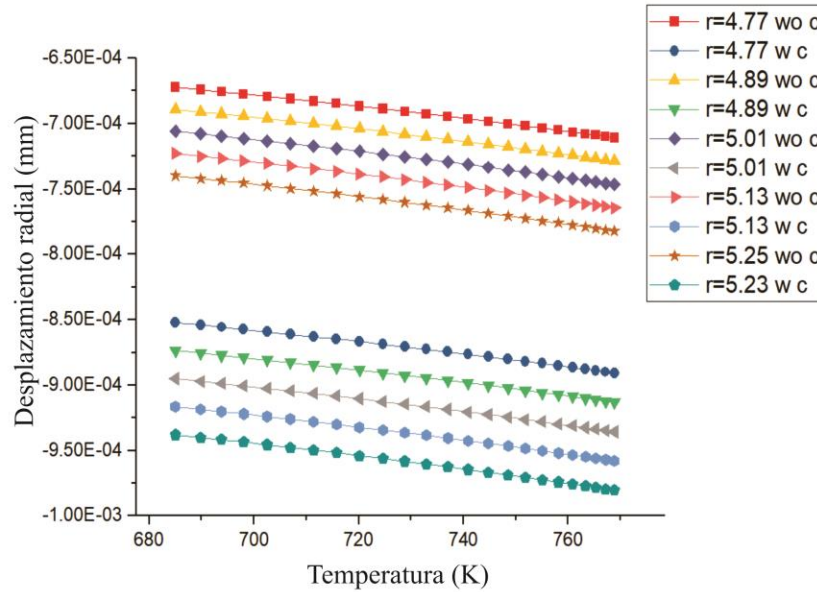


Figura 13.7 Desplazamiento radial en el encamisado, con contacto entre la pastilla y el encamisado y sin contacto (c-c) y sin contacto (s-c).

El punto de referencia para el cual se mide la longitud del radio es el centro de la pastilla de combustible, así que el grosor del encamisado es la diferencia entre el radio de la cara externa y el radio de la cara interna del encamisado. Los valores del desplazamiento radial se miden con respecto a la cara externa del encamisado, un valor negativo significa un desplazamiento hacia el punto central de la pastilla combustible desde la cara externa del encamisado. Se alcanza un valor más negativo cuando únicamente se considera la presión externa del refrigerante y no hay contacto entre pastilla y encamisado, para el otro caso, cuando hay contacto entre ambos, existe presión por parte de la cara externa de la pastilla lo cual disminuye el desplazamiento negativo.

En la **Figura 13.8**, se presentan tres gráficas que son: esfuerzo, deformación y desplazamientos radiales en el encamisado para dos diferentes velocidades del flujo del refrigerante (1.5 y 2.0 m/s), y para diferentes posiciones axiales (0.0, 36.0 y 60.0 cm). Es importante evaluar los efectos de la temperatura como una función del flujo del refrigerante ya que los flujos del refrigerante impactan directamente en la capacidad del refrigerante para extraer el calor de la barra de combustible. Además, otras características que varían a lo largo del eje x incluyen a la potencia axial (la cual varía fuertemente en esa dirección), la corrosión y la erosión causadas por el refrigerante de plomo. Por estas razones, los resultados se presentan para diferentes alturas.

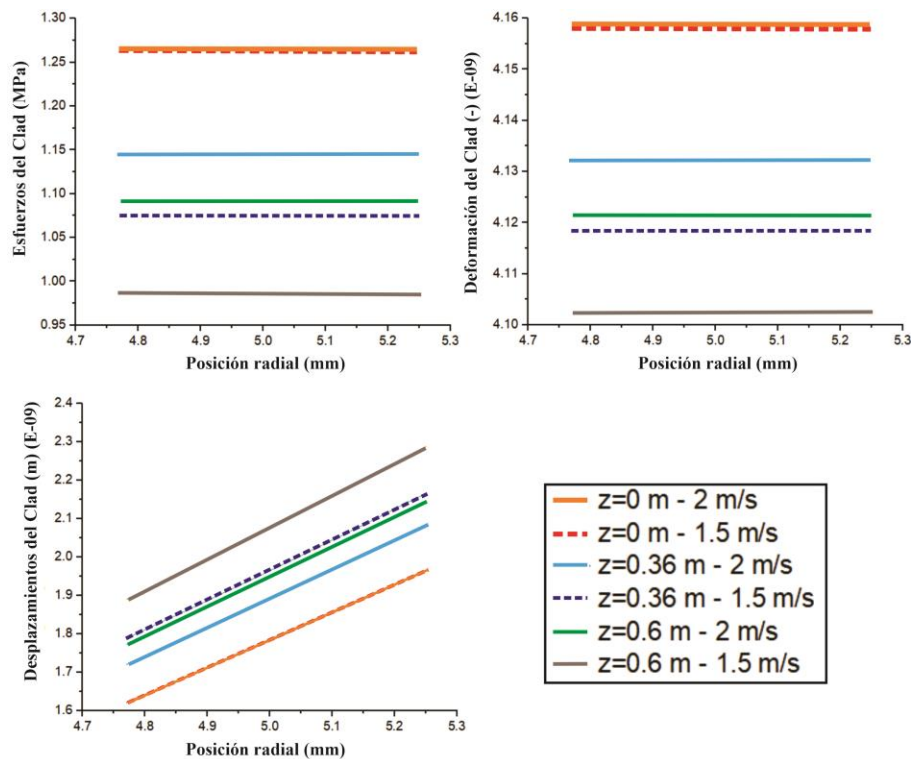


Figura 13.8 Esfuerzo, deformación y desplazamiento para la posición radial del encamisado en las posiciones axiales $z = 0$ m, $z = 0.36$ m y $z = 0.6$ m.

El primer aspecto que notar es que el desplazamiento del encamisado en todos los casos tiene un comportamiento cercanamente lineal, lo cual conduce a que la tendencia de la curva del esfuerzo sea constante ya que está definida como su derivada con respecto a la distancia, y como la deformación está en función del esfuerzo, se espera que se tenga un comportamiento similar, lo cual se cumple. Con este simple análisis se observa que el modelo se comporta cualitativamente como se esperaba.

Considerando el cambio de velocidad, los esfuerzos radiales en el huelgo están gobernados por la presión interna y externa (la interna es la del huelgo y la externa es la del refrigerante), como se describe en la ecuación (13.11), un incremento en la velocidad del flujo del refrigerante conduce a un incremento en la presión externa a la pastilla, lo cual produce el incremento en el esfuerzo observado (y el mismo comportamiento en la deformación). Uno de los retos en el diseño de reactores rápidos enfriados por plomo es el de encontrar las velocidades de flujo óptimas para evitar excesivas cargas que, junto con los fenómenos de corrosión y erosión, puedan llevar a la ruptura del encamisado de la barra combustible. De la **Figura 13.8**, se demuestra que el modelo desarrollado puede representar la física de los fenómenos correctamente. En el caso del desplazamiento un incremento en la presión externa puede ocasionar la compresión de la barra combustible, si excede a las fuerzas que originan su expansión, esto se observa en la **Figura 13.8** ya que un incremento en la velocidad del refrigerante lleva a un decremento en el desplazamiento.

En la **Figura 13.9** se muestra la distribución del esfuerzo, la deformación y el desplazamiento en la dirección axial en los lados interno y externo del encamisado. De la ecuación (13.13) se confirma que el esfuerzo axial está en función del cuadrado de la distancia radial interna y externa y que la presión en ambos lados del encamisado, así como

ambas distancias radiales son virtualmente iguales para el enfoque del análisis de la presión.

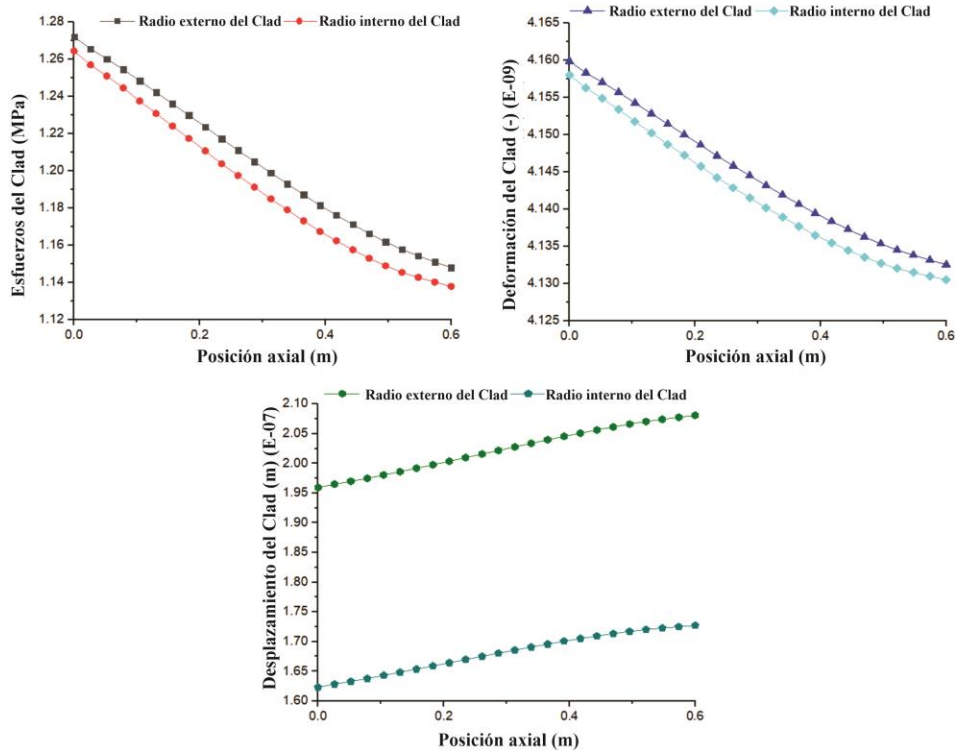


Figura 13.9 Esfuerzo, deformación y desplazamiento del encamisado variando la posición axial para el estado estacionario.

Dadas las velocidades de flujo del refrigerante y el peso de la columna de plomo, se espera que la presión al exterior de la barra sea, en general, más alta que en el huelgo, y que la presión deba ser más alta en la parte más baja del núcleo que en regiones superiores donde la columna de plomo se acorta. Todos estos factores conducen a asumir que el esfuerzo es más alto en la parte más baja del núcleo y que decrece con la altura; este comportamiento se observa en la **Figura 13.9** para el esfuerzo y la deformación. Para el caso del desplazamiento se observa que su comportamiento es muy cercano a ser constante, con una ligera variación en las magnitudes de distancia de desplazamiento, que a la escala de

micrómetros son apenas a penas apreciables a escala mayor, es decir, la cara interna y externa del encamisado apenas son desplazadas con respecto a su posición original con referencia al centro de la pastilla por las presiones que ejercen tanto el gas del huelgo así como el refrigerante, esto indica que a estas condiciones de velocidad de flujo del refrigerante el impacto en el encamisado es apenas perceptible.

En la **Figura 13.10** se presenta el comportamiento del esfuerzo, deformación y desplazamiento para diferentes niveles de potencia (25%, 50%, 75% y 100%). Se observa un interesante comportamiento, por ejemplo, para el esfuerzo, cuando hay un decremento en la potencia esto provoca un incremento en la magnitud del esfuerzo, el cual puede parecer contradictorio dada la explicación previa con la potencial nominal, pero, la razón es que un decremento en la potencia no conduce únicamente a un decremento en la presión externa de la barra (una menor potencia necesita menos velocidad del refrigerante) pero también en la presión interna de la barra combustible.

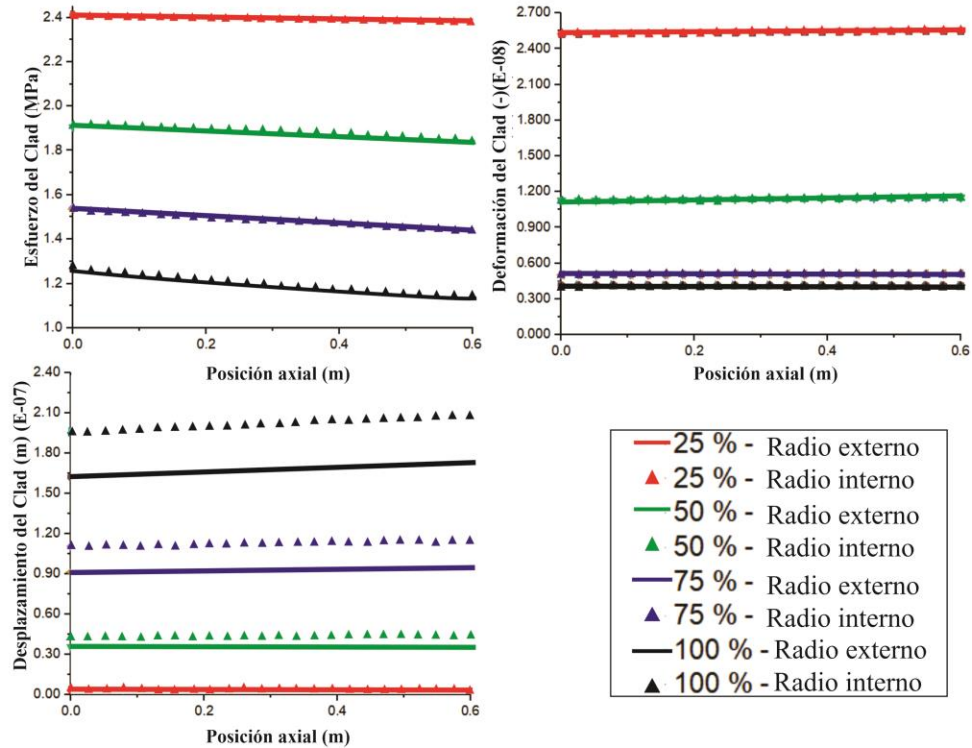


Figura 13.10 Esfuerzo, deformación y desplazamiento del encamisado variando la posición axial para 100%, 75%, 50% y 25% de potencia nuclear.

En la **Figura 13.2** se muestra un típico perfil de temperatura axial en el huelgo, la presión interna en el huelgo es función de la temperatura la cual es no lineal, esto significa que la tasa de incremento de presión en el interior de la barra combustible es más alta que en el lado externo (pero aún la presión en el lado externo es más alta), es decir, que la diferencia de presiones es más baja a potencia más altas lo cual conduce a magnitudes de esfuerzos menores. La misma explicación puede ser usada para la deformación y el desplazamiento.

Conclusiones

En esta tesis doctoral se analizó el módulo de elasticidad de una pastilla de combustible nuclear con efectos sinterizados. La microestructura del pellet de combustible nuclear es un material sinterizado con características heterogéneas, constituido por la fase sólida (partícula de combustible) y la fase gaseosa (espacio entre la fase sólida).

Se aplicó el método de promediado volumétrico (VAM) para calcular el módulo de elasticidad escalado, que es una función de la fracción de volumen de la fase sólida. La aplicación sistemática de VAM para las ecuaciones gobernantes de los fenómenos de transporte a escala de microestructura condujo a una ecuación válida a escala de la pastilla.

El análisis presentado en este trabajo considera una microestructura simétrica y asimétrica, en donde se calculó el módulo de elasticidad escalado. De acuerdo con las pruebas realizadas, se encontró que el módulo escalado es prácticamente constante con la presión del gas, sin embargo, presenta cambios importantes con la fracción de volumen de la fase sólida.

Al establecer una ecuación escalada que conteniente la información de ambas fases del sinterizado en los módulos de elasticidad escalados, se realizaron simulaciones numéricas, para obtener campos del desplazamiento del material en cada dirección y de manera total, para describir el comportamiento mecánico en la pastilla, esto se presentó en cuatro casos (Sección 12.2), en donde se tomaron dos valores de la presión del gas

($P_g = 1\text{MPa}$ y 2MPa), así como dos valores para la presión externa de la pastilla ($P_f = 2\text{MPa}$ y 2.5MPa). También se consideraron dos valores de sinterizado de la pastilla ($\varepsilon_s = 0.850$ y 0.975). Con estos datos, se obtuvieron los campos de desplazamiento, en donde se observa que, para todos los casos, el orden de magnitud del desplazamiento es de 10^{-6} .

Para validar los resultados y la viabilidad del modelo escalado, se modeló el problema directo, el cual representa el modelo local. Se calcularon dos casos, tomando diferentes presiones externas ($P_f = 2\text{MPa}$ y 2.5MPa). Con estos resultados fue posible verificar que los campos generados por el modelo escalado son representativos del fenómeno de desplazamiento en la pastilla de combustible.

Un modelo termomecánico simplificado de corridas rápidas ha sido desarrollado, probado y aplicado para analizar un LFR. Los resultados numéricos fueron obtenidos y usados para verificar y entender cualitativamente los fenómenos más relevantes en el análisis termo mecánico del LFR y planteando la posibilidad para extender el respectivo análisis a diferentes configuraciones de combustible nuclear de diferentes tipos de reactores nuclear.

Empleando este modelo simplificado que requiere de pocos recursos computacionales, es posible estudiar los efectos termomecánicos del flujo del refrigerante en la barra combustible (ampliamente estudiado con sistemas más complejos), siendo uno de los retos en el diseño de reactores rápidos enfriados por plomo su relación totalmente estrecha a otros fenómenos como la corrosión y la erosión que contribuye al incremento de la posibilidad de falla en la barra combustible. También se mostró que el modelo puede ser

usada para el análisis del impacto del nivel de potencia en los parámetros mecánicos de la barra combustible, los cuales son muy importantes en el análisis de transitorios de potencia. Así, esta implementación permite tener un modelo más realista integrado dentro de un modelo de transferencia de calor, y ser capaz de predecir la transferencia de calor en condiciones de contacto de pastilla encamisado que tiene un importante impacto en los procesos de transferencia de calor en el núcleo de un LFR. La habilidad para predecir tales puntos calientes debido al contacto entre la pastilla y el encamisado y sus efectos en la transferencia de calor es esencial en el análisis de parámetros locales de seguridad y predecir una posible falla en la barra combustible.

Con el propósito de verificar el modelo de desplazamiento, se realizó una prueba comparando el modelo de desplazamiento de la pastilla combustible contra modelos más complejos de FEM peridinámicos, los cuales son parte de un proyecto de investigación del *Idaho National Laboratory*. Se encontró una buena aproximación del modelo desarrollado con la solución de referencia.

Con lo anteriormente expuesto, se cumplió el objetivo del trabajo de investigación, el cual consistió, principalmente, en realizar el análisis termomecánico de la barra de combustible nuclear y de proponer metodologías de acoplamiento multi-escala y multi-físico.

El VAM fue utilizado para el acoplamiento multi-escala, ya que se analizó y realizó el estudio de los parámetros termomecánicos en la barra combustible a diferentes escalas, obteniendo valores de propiedades mecánicas, en especial del módulo de elasticidad, módulo de Young, logrando que dicho parámetro sea válido en el modelo escalado para diferentes porosidades, datos validados y que se pueden usar para posteriores desarrollos.

El acoplamiento multi-físico del modelo termomecánico que se desarrolló se realizó con modelos neutrónicos, tales como el de cinética neutrónica puntual y el de transferencia de calor usados en el programa AZTHECA, desarrollo con un grado alto de confiabilidad, validado y verificado, que se ha usado para el análisis de diferentes tipos de reactores.

De esta manera, el desarrollo del modelo de termomecánico de barra combustible nuclear puede migrar y desarrollarse en plataformas, tales como SALOME, para integrar las herramientas previamente implementadas y usar los desarrollos de multi-física e interfase gráfica disponibles para obtener, finalmente, un módulo termomecánico en la plataforma AZTLAN, factible de mejora con recursos computacionales de alto rendimiento y aportaciones futuras por parte de otros trabajos de investigación.

Referencias

- A. Gif, Technology roadmap for generation IV nuclear energy systems, in: Nuclear Energy Res. Advis. Comm. Gener. IV Int. Forum, Issued by the, U.S. DOE, 2014. GIF-002/00.
- Acosta, F., Cadiou, T., Blanc, V., Rubiolo, P., (2019). A new thermal-hydraulics/thermomechanics coupling methodology for the modeling of the behavior of sodium-cooled fast reactors fuel subassemblies under irradiation, Nuclear Engineering and Design 348, 90-106.
- Aguilar-Madera, C. G., Espinosa-Paredes, G., Molina-Espinosa, L. (2019). Time-dependent neutron diffusion coefficient for the effective diffusion equation. Progress in Nuclear Energy 112, 20-33.
- Aguilar-Madera, C. G., Herrera-Hernández, E. C., Espinosa-Paredes, G. (2019). Solute transport in heterogeneous reservoirs: Upscaling from the Darcy to the reservoir scale. Advances in Water Resources 124, 9-28
- Aguilar-Madera, C. G., Herrera-Hernández, E. C., & Espinosa-Paredes, G. (2020a). Neutron diffusion coefficient for disordered arrays of TRISO particles in spherical nuclear fuel. Annals of Nuclear Energy 146, Article 107635
- Aguilar-Madera, C. G., Herrera-Hernández, E. C., & Espinosa-Paredes, G. (2020b). Effective equation to assess solute transport in two-lithology reservoirs. Journal of Hydrology, 584, Article 124648.

- Aguilar-Madera, C. G. & Espinosa-Paredes, G. (2020c). Neutron diffusion analysis of a fuel pebble with volume averaging method. *Journal of Porous Media* 23, 363-381.
- Ajantiwalay T., Smith C., Keiser D. and Aitkaliyeva A., (2020). A critical review of the microstructure of UeMo fuels. *Journal of Nuclear Materials* 540, Article 152386.
- Alemberti, A., Tucek, K., Takahashi, M., Obara, T., Kondo, T., Moiseev, A., Tocheny, L., Smith, C., Hwang, I.S., Wu, Y., Jin, M., (2020), Lead-cooled fast reactor (LFR), system safety assessment. Gen IV international Forum, June 3th, 2020. Issued by, https://www.gen-4.org/gif/upload/docs/application/pdf/2020-06/gif_lfr_ssa_june_2020_2020-06-09_17-26-41_202.pdf, 2020.
- Belhocine, A., (2016), Numerical study of heat transfer in fully developed laminar flow inside a circular tube, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* 85 (9), 2681–2692.
- Belhocine, A., Abdullah, O.I., (2019), Numerical simulation of thermally developing turbulent flow through a cylindrical tube, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* 102, 2001–2012.
- Bohn, M.P., (1977) FRACAS: a Subcode for the Analysis of Fuel Pellet-Cladding Mechanical Interaction (TREE-NUREG–1028), United States.
- Bower, A.F., (2011), *Applied Mechanics of Solids*, vol. 2011, CRC Press.
- Cappia F., Pizzocri D., Marchetti M., Schubert A., Van Uffelen P., Luzzi L., Papaioannou D., Macian-Juan R., Rondinella V.V., (2016). Microhardness and Young's modulus of high burn-up UO₂ fuel, *J. Nucl. Mater.* 479, p. 447.
- Carbajo, J., Yoder, G., Popov, S., Ivanov, V., (2001), A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels, *J. Nucl. Mater.*, 181–198.

- Chen, H., Hu, Y., Spencer, B.W., (2017), Peridynamics Using Irregular Domain Discretization with MOOSE-Based Implementation (INL/CON-17-41364), Idaho National Laboratory.
- Chen, H., (2019), A comparison study on peridynamic models using irregular non-uniform spatial discretization, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 345, 539–554, <https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.11.001>.
- Cheng, A. H. D. (2016). *Poroelasticity* (Vol. 877). Switzerland: Springer International Publishing.
- Cummingham, M.E., et al., (2001), FRAPTRAN: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods (Report NUREG/CR-6739, vol. 1. PNNL-13576.
- Espinosa-Paredes, G., François, J.-L., Sánchez-Mora, H., Pérez-Valseca, A.D., Martín-del-Campo, C., (2017), Study on the temperature distributions in fuel assemblies of lead-cooled fast reactors, *Int. J. Nucl. Energy Sci. Technol.* 11 (2), 183–203.
- Espinosa-Paredes, G., & Aguilar-Madera, C. G. (2018). Scaled neutron point kinetics (SUNPK) equations for nuclear reactor dynamics: 2D approximation. *Annals of Nuclear Energy* 115, 377-386.
- Espinosa-Paredes, G., Aguilar-Madera, C., & Suescún-Díaz, D. (2020). Time-dependent diffusion coefficient for up-scaled neutron point kinetics equations. *Journal of Engineering and Applied Sciences* 15 (19), 2147-2152.
- Fédérici, E., Lamare, F., Bessiron, V., Papin, J., (2001), The SCANAIR Code for Description of Fuel Behaviour under Reactivity Initiated Accident, IAEA Technical Committee meeting on fuel behaviour under transient and LOCA conditions, Halden, Norway, 2001.

- Fidelma G. Di Lemma, Karen E. Wright, Luca Capriotti, Adam X. Zabriskie, Alexander J. Winston, Colby B. Jensen, Daniel M. Wachs, (2021). Investigation of fuel microstructure at the top of a metallic fuel pin after a reactor overpower transient, *Journal of Nuclear Materials* 544, Article 15271.
- García, M., Tuominen, R., Gommlich, A., Ferraro, D., Valtavirta, V., Uwe, I., Van Uffelen, P., Mercatali, L., Sanchez-Espinoza, V., Leppänen, J., Sören, K., (2020), A Serpent2-SUBCHANFLOW-TRANSURANUS coupling for pin-by-pin depletion calculations in Light Water Reactors, *Ann. Nucl. Energy* 139 (2020).
- Gaston, D., Newman, C., Hansen, G., Lebrun-Grandi'e, D., (2009) MOOSE: a parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations, *Nucl. Eng. Des.* 239, 1768–1778.
- Geelhood, K., Luscher, W., Beyer, C., (2011a). FRAPCON-3.4: A Computer Code for the Calculation of Steady-state Thermal–Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup. Technical Report NUREG-CR-7022, vol. 1, Pacific Northwest National Laboratory.
- Geelhood, K., Luscher, W., Beyer, C., Cuta, J., (2011b). FRAPTRAN 1.4: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods, Technical Report NUREG-CR-7023, vol. 1, Pacific Northwest National Laboratory.
- Geelhood, K., Luscher, W., Raynaud, P., Porter, I., (2015), FRAPCON-4.0: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup.
- Gif, Generation IV systems, official portal of GIV. https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_59461/generation-iv-systems, 2021.

- Glasstone, S., Sesonske, A., (1981), Nuclear reactor engineering, Van Nostrand Reinhold Company, United States.
- Gómez-Torres, A.-M., Puente-Espel, F., del Valle Gallegos E., François, J.L., Martin-del-Campo, C., Espinosa-Paredes, G., (2015), AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors. Paper 15493, in: Proceedings of ICAPP 2015, 2015. May 03-06, 2015 - Nice (France).
- Grasso, G., Petrovich, C., Mattioli, D., Artioli, C., Sciora, P., Gugiu, D., Bandini, G., Bubelis, E., Mikityuk, K., (2014) The core design of ALFRED, a demonstrator for the European lead-cooled reactors, Nucl. Eng. Des. 278, 287–301.
- Idaho National Engineering Laboratory (1979). "MATPRO-Version 11, a Handbook of Material Properties for Use in the Analysis of LWR Fuel Rod Behaviour", NUREG/CR-0497, TREE-1280, , 1979, p. 543.
- Ikonen, T., Loukusa, H., Syrjälähti, E., Valtavirta, V., Leppänen, J., Tulkki, V., (2015). Module for thermomechanical modeling of LWR fuel in multiphysics simulations, Annals of Nuclear Energy, Volume 84, Pages 111-121.
- Imke, U., Sanchez, V., Gomez, R., (2010) Subchanflow: A New Empirical Knowledge Based Subchannel Code, Annual Meeting on Nuclear Technology.
- Lassmann, K., (1992), TRANSURANUS: a fuel rod analysis code ready to use, J. Nucl. Mater. 188, 295–302.
- Lee, Heung Soo; Kim, Dong-Joo; Kim, Dong-Seok; Kim, Dong Rip. (2020). Evaluation of thermomechanical behaviors of UO₂-5 vol% Mo nuclear fuel pellets with sandwiched configuration, Journal of Nuclear Materials, Volume 539, 152295.

- Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T., (2015), The Serpent Monte Carlo code: status, development and applications in 2013, *Ann. Nucl. Energy* 82, 142–150.
- Luscher, W., Geelhood, K., 2011. Material Property Correlations: Comparisons Between FRAPCON-3.4, FRAPTRAN 1.4, and MATPRO. Technical Report NUREGCR-7024, Pacific Northwest National Laboratory.
- Matzke H., Spino, J. (1997). Formation of the rim structure in high burnup fuel, *J. Nucl. Mater.* 248, p. 170.
- Newman, C., Hansen, G., Gaston, D., (2009). Three dimensional coupled simulation of thermomechanics, heat, and oxygen diffusion in UO₂ nuclear fuel rods, *Journal of Nuclear Materials*, Volume 392, Issue 1, Pages 6-15.
- Olander, D.R. (1976). Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TID-26711-P1, Technical Information Center - Energy Research and Development Administration, University of California, Berkeley.
- Pérez-Valseca, A.D, Espinosa-Paredes, G., Francois, J.L., Vazquez-Rodríguez, A., Martín-del-Campo, C., (2017), Stand-alone core sensitivity and uncertainty analysis of ALFRED from Monte Carlo simulations, *Ann. Nucl. Energy* 108, 113–125.
- Pérez-Valseca, A.D, Quezada-García, S., Gómez-Torres, A.M., Vazquez-Rodríguez, A., Espinosa-Paredes, G., (2019), Reactor behavior comparisons for two liquid metal-cooled fast reactors during an event of loss of coolant, *Case Stud. Therm. Eng.* 16, 100556.
- Pérez-Valseca, A.D., Aguilar-Madera, C.G., Herrera-Hernández, E.C., & Espinosa-Paredes, G. (2021). Upscaled heat transfer coefficients for a liquid metal-cooled fast nuclear reactor. *International Journal Heat and Mass Transfer* 165, Article 120622.

- Papin, J., Petit, M., Grandjean, C., Georgenthum, V., (2006), IRSN R&D Studies on High Burn-Up Fuel Behaviour under RIA and LOCA Conditions, International Meeting on LWR fuel performance, Salamanca Spain, 2006, pp. 22–26.
- Raja, F., Avramova, M., (2017) Evaluation of modeling options for in-pellet power distribution and gap gas conductance for accurate fuel temperature predictions, Prog. Nucl. Energy 100, 135–145.
- Richards, J. P. G., & Williams, R. P. (1972). Waves. Penguin, Great Britain.
- Salko, R. Jr., Avramova, M., Wysocki, A., Toptan, A., Hu, J., Porter, N., Taylor, S. Blyth, C., Dances, A, Gomez, A., Jernigan, C., Kelly, J., (2019) CTF 4.0 Theory Manual, Web, United States: N, p. 2019, <https://doi.org/10.2172/1550750>.
- Spino, K. Vennix, M. Coquerelle, (1996). Detailed characterisation of the rim microstructure in PWR fuels in the burn-up range 40×10^6 GWd/tM, J. Nucl. Mater. 231, p. 179.
- Spino J., Cobos-Sabate J., Rousseau F., (2003). Room-temperature microindentation behaviour of LWR-fuels, part 1: fuel microhardness, J. Nucl. Mater. 322, p. 204.
- Terrani K.A., Balooch M., Burns J.R., Smith Q.B., (2018). Young's modulus evaluation of high burnup structure in UO₂ with nanometer resolution, J. Nucl. Mater. 508, p. 33
- Toptan, A., Salko, R.K., Avramova, M.N., Kropaczek, D.J., Clarno, K., (2017). Development and Assessment of CTFFuel, Technical Report CASL-U-2017-1418-000, vol. 2017, CASL.
- Van Uffelen, P., Li, W., Rossiter, G. and Williamson, R., (2019). A review of fuel performance modelling. Journal of Nuclear Materials (516) 373-412.

Whitaker S., (1999). *The Method of Volume Averaging*. Kluwer Academic Publishers.
London.

Youho, L., Lee Ik., N.O. J., Cheon, H., (2017) Mechanical analysis of surface-coated zircaloy cladding, *Nucl. Eng. Technol.* 49 (5) , 1031–1043, 2017.

Ziegler, H. (2012). *An introduction to thermomechanics*, North Holand Publishing Company, 1983.

A. Coeficientes efectivos

El primer paso para la deducción de dicha ecuación escalada es sustituir la solución formal, dada por la ecuación (8.20) en la ecuación (7.36):

$$\begin{aligned}
 \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} = & -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\varepsilon_s \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA \right) \right] \\
 & -\nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \varepsilon_s \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA \right) \right] \\
 & + Pa^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

Aplicando los operadores:

$$\begin{aligned}
 & -\nabla \cdot \varepsilon_s E_1 \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s - \nabla \cdot E_2 \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA - \nabla \cdot E_2 \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA \\
 & -\nabla \cdot \varepsilon_s E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s - \nabla \cdot E_1 \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA - \nabla \cdot E_2 \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA \\
 & -\nabla \cdot E_1 \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA - \nabla \cdot E_2 \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s dA + Pa^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s
 \end{aligned}$$

(A.2)

Agrupando términos:

$$\begin{aligned}
& -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\varepsilon_s \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} dA \right) \right] \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \\
& -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\frac{\varepsilon_s \mathbf{I}}{(1-2\nu)} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} dA \right) \right] \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (\text{A.3}) \\
& -\nabla \cdot \left[E_1 \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} S dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot S \mathbf{I} dA \right) \right] \langle \mathbf{u}_s \rangle^s = -Pa^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s
\end{aligned}$$

Finalmente se obtiene

$$\mathbf{E}_1 = E_1 \left(\varepsilon_s \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} dA \right) \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbf{E}_2 = E_1 \left(\frac{\varepsilon_s \mathbf{I}}{(1-2\nu)} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} dA \right) \quad (\text{A.5})$$

$$\mathbf{S} = E_1 \left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} S \mathbf{I} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{\mathbf{I}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot S \mathbf{I} dA \right) \quad (\text{A.6})$$

B. Problemas de valor a la frontera para las variables de cerradura.

Sustituyendo la solución formal dada por la ecuación (8.20) en la ecuación (8.17)

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot \left[E_1 \nabla (\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) \right] \\ & -\nabla \cdot \left[E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot (\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) \right] = \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Aplicando el operador $\nabla \cdot$ a cada término correspondiente, se obtiene:

$$\begin{aligned} & -E_1 \nabla^2 \mathbf{b}_{1s} \cdot (\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) - E_1 \nabla^2 \mathbf{b}_{2s} (\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) - E_1 \nabla^2 S (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s) \\ & -E_2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \cdot (\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) - E_2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} (\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) - E_2 \nabla \nabla \cdot S (\langle \mathbf{u}_s \rangle^s) = \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Para cada variable de cerradura se puede dividir en tres problemas. Entonces, dividiendo entre E_1 , para la variable de cerradura \mathbf{b}_{1s} el problema es:

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{1s} - \frac{E_2}{E_1} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{b}_{1s}) = 0 \quad (\text{B.3})$$

Para la variable de cerradura \mathbf{b}_{2s} el problema es:

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{2s} - \frac{E_2}{E_1} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{b}_{2s}) = 0 \quad (\text{B.4})$$

Para la variable de cerradura S el problema es:

$$-\nabla^2 S \mathbf{I} - \frac{E_2}{E_1} \nabla \nabla \cdot S \mathbf{I} = \varepsilon_s^{-1} \mathbf{I} a^2 P_g \quad (\text{B.5})$$

Es posible realizar lo anterior, porque se puede observar si se cumplen las ecuaciones (B.3)

a (B.5), se cumple (B.1) para la solución diferente de la trivial, i.e., \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y $S \neq 0$.

Como siguiente paso sustituimos la solución formal en la condición de frontera dada por ecuación (8.18)

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \nabla \langle \mathbf{u} \rangle_s + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \nabla \left(\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \\ & + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle_s + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \left(\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \text{ en } A_{sg} \quad (\text{B.6}) \\ & = aP_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + aP_g \left(\mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \end{aligned}$$

Aplicando el operador correspondiente a cada término

$$\begin{aligned} & \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u} \rangle^s \right) + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \nabla \mathbf{b}_{1s} \cdot \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \nabla \mathbf{b}_{2s} \left(\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_1 \nabla S \left(\langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \\ & + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \left(\nabla \cdot \langle \mathbf{u} \rangle^s \right) + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \cdot \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} \left(\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \quad (\text{B.7}) \\ & + \mathbf{n}_{gs} \cdot E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot S \left(\langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) = aP_g \mathbf{b}_{1s} \cdot \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) + aP_g \mathbf{b}_{2s} \left(\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) + (1+S) aP_g \left(\langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right) \end{aligned}$$

En forma similar, para la variable de cerradura \mathbf{b}_{1s} la condición de frontera es:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{1s} + \frac{E_2}{E_1} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \right] = \frac{aP_g}{E_1} \mathbf{b}_{1s} - \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.8})$$

Para la variable de cerradura \mathbf{b}_{2s} la condición de frontera es:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{2s} + \frac{E_2}{E_1} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} \right] = \frac{aP_g}{E_1} \mathbf{b}_{2s} - \frac{E_2}{E_1} \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.9})$$

Y para la variable de cerradura S , la condición de frontera es:

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla S \mathbf{I} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{E_2}{E_1} \mathbf{I} \nabla \cdot S \mathbf{I} \right] = \mathbf{I} \frac{(1+S) aP_g}{E_1} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.10})$$

Sustituyendo las ecuaciones (7.6) y (7.7) (en términos de 7.8 y 7.9) en las en las ecuaciones (B.3)-(B.5) y en las Ecs (B.8)-(B.10), los problemas de las variables de cerradura con su correspondiente condición a la frontera son:

- Problema de valores a la frontera para \mathbf{b}_{1s}

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{1s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{b}_{1s}) = 0 \quad \text{en la fase-s} \quad (\text{B.11})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{1s} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{1s} - \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.12})$$

- Problema de valores a la frontera para \mathbf{b}_{2s}

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{b}_{2s}) = 0 \quad \text{en la fase-s} \quad (\text{B.13})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{2s} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{n}_{gs} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.14})$$

- Problema de valores a la frontera para S

$$-\nabla^2 S \mathbf{I} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \nabla \cdot S \mathbf{I} = 2(1+\nu) \mathbf{I} \frac{P_g a^2}{\varepsilon_s E_s} \quad \text{en la fase-s} \quad (\text{B.15})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla S \mathbf{I} + \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot S \mathbf{I} \right] = \mathbf{I} \frac{2(1+\nu) a P_g (1+S)}{E_s} \quad \text{en } A_{sg} \quad (\text{B.16})$$