

## SIMULACION DE LA MIGRACION DE HIDROGENO EN ALEACIONES DE ZIRCONIO

GUSTAVO C. BUSCAGLIA

y  
ROBERTO O. SALIBA

*División Mecánica Computacional,  
Centro Atómico Bariloche,  
8400 S.C. de Bariloche, Argentina.*

### RESUMEN

En este trabajo se estudia el fenómeno de migración de hidrógeno y formación de blisters de hidruro ante el contacto entre tubos de presión y tubos calandria en reactores tipo CANDU. Este fenómeno es actualmente admitido como uno de los principales factores limitantes de la vida útil de este tipo de reactores, desde que ocasionara el incidente de Pickering en 1983. Se desarrolla un método numérico basado en la regularización de las ecuaciones constitutivas que, con el tratamiento usual de elementos finitos y con un esquema de Newton-Raphson, permite resolver el citado problema sobre redes generales. Se incluyen resultados unidimensionales y bidimensionales, que muestran buen acuerdo con soluciones cuasi-analíticas disponibles (caso 1-D) e ilustran la capacidad del método empleado.

### SUMMARY

In this work, the phenomenon of hydrogen migration and hydride blister formation due to *Pressure Tube/Calandria Tube* contact in CANDU reactors is addressed. This problem is by now considered as one of the factors limiting CANDU reactors lifetime, since Pickering incident (1983). A finite-element method is developed, based on a regularization of the constitutive equations and a Newton-Raphson iterative procedure, which allow the simulation of this phenomenon on arbitrary meshes. One dimensional results, in good agreement with quasi-analytical solutions, are included; together with some two-dimensional solutions which demonstrate the capabilities of our scheme.

Recibido: Noviembre 1991

## INTRODUCCION

El estudio de la migración de hidrógeno asistida por temperatura en aleaciones de circonio comienza en la década del 60<sup>1,2</sup> debido a la utilización de estos materiales en las vainas de los combustibles nucleares. Una vez determinadas las leyes constitutivas del fenómeno, esta línea de trabajo perdió algo de interés porque la altísima temperatura e irradiación de la vaina, sumada a una multitud de fenómenos simultáneos (interacción pastilla-vaina, generación de defectos puntuales, etc.) hacían inviable un análisis con más detalle del que se había alcanzado.

En agosto de 1983 ocurrió un incidente en la Central Nuclear (tipo CANDU) de Pickering. Debido a la rotura de un tubo de presión, se produjo pérdida de refrigerante en el circuito primario del reactor. Las centrales CANDU alojan sus combustibles en tubos horizontales (llamados de presión) que, en gran cantidad, atraviesan un recipiente (denominado calandria) donde hay agua pesada a baja temperatura (60°C). Por razones obvias de eficiencia térmica, los tubos de presión (250°C) no tocan el agua del moderador, sino que otros tubos (los tubos calandria, que los rodean sin contacto) los aíslan de la misma. En exámenes posteriores a la rotura, se determinó que ésta había comenzado en precipitados de hidruros (*blisters* o ampollas) que a su vez se debían a un contacto no previsto *Tubo de Presión/Tubo Calandria*.

Este incidente atrajo nuevamente la atención de la industria nuclear sobre la migración de hidrógeno en circonio y sus aleaciones. En particular, se desarrollaron herramientas numéricas que permitieran la simulación del fenómeno<sup>3,4,5</sup>, en general utilizando técnicas del tipo volúmenes de control.

En este trabajo, presentamos un nuevo método de elementos finitos para el análisis numérico del proceso de formación de blisters de hidruro en aleaciones de circonio, basado en métodos similares utilizados en problemas de solidificación, apelando a una regularización tipo *ley de potencia* de las leyes constitutivas. Incluimos un análisis del problema exacto que arroja luz sobre las dificultades intrínsecas del problema (cambio de tipo parabólico-hiperbólico de la ecuación, formación espontánea de discontinuidades,...) y permite validar nuestro método contra una solución cuasi-analítica (que sólo existe en una región del dominio). Mostramos también algunos resultados bidimensionales de cierto interés tecnológico.

## ECUACIONES DE GOBIERNO

En esta sección presentaremos brevemente las ecuaciones que gobiernan la migración del hidrógeno asistida por temperatura, que con las condiciones de contorno apropiadas formarán un sistema completo de ecuaciones.

Consideraremos la evolución temporal de la concentración total de hidrógeno  $C$  dentro de un dominio  $\Omega$  lleno de una aleación de circonio. Si llamamos  $\vec{J}$  a la corriente total de hidrógeno, por la conservación de la masa deberá cumplirse

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = q \quad (1)$$

donde  $q$  es una fuente o sumidero volumétrico.

Las aleaciones de circonio absorben hasta 20000ppm en peso de hidrógeno en solución sólida a temperaturas mayores de  $770^{\circ}K$  pero la solubilidad decrece rápidamente cuando la temperatura disminuye y el hidrógeno precipita como fase hidruro,  $Zr-H_y$ . Se conocen tres fases de hidruros,  $\gamma$  y  $\delta$  para  $1.5 \leq y \leq 1.67$  y  $\epsilon$  para  $y > 1.69$ . En este trabajo no haremos distinción entre los distintos tipos de hidruro y llamaremos al precipitado fase  $\delta$ , en tanto que al hidrógeno en solución fase  $\alpha$ .

La concentración a la que la fase  $\delta$  comienza a precipitar es llamada solubilidad sólida terminal ( $TSS$ ), ésta es función solamente de la temperatura. Si  $C$  es mayor que  $TSS$  entonces las fases  $\alpha$  y  $\delta$  coexistirán, mientras que si  $C$  es menor que  $TSS$  sólo fase  $\alpha$  estará presente. Asumiremos que si hay coexistencia, ésta se dará en equilibrio termodinámico. Entonces podemos escribir sin dificultad la relación que existe entre  $C_\alpha$  y  $C$

$$C_\alpha = \begin{cases} C & \text{si } C < TSS(T) \text{ (una fase)} \\ TSS & \text{si } C > TSS(T) \text{ (dos fases)} \end{cases} \quad (2)$$

La física de la migración de hidrógeno asistida por temperatura está en la ecuación constitutiva de  $\vec{J}$ . Esta ha sido estudiada y está establecida por lo que solamente la presentaremos aquí remitiendo al lector interesado en su fundamentación a las referencias [1] y [2]. En presencia de un gradiente de temperatura la corriente en la fase  $\alpha$  está dada por

$$\vec{J}_\alpha = -D \left( \nabla C_\alpha + \frac{Q^* C_\alpha}{RT^2} \nabla T \right) \quad (3)$$

donde  $C_\alpha$  es la concentración de hidrógeno en fase  $\alpha$ ,  $Q^*$  el calor de transporte,  $R$  la constante universal de los gases,  $D$  es el coeficiente de difusión de hidrógeno que en particular para materiales anisotrópicos será un tensor, y la temperatura  $T$  debido a que  $\frac{Q^*}{D} \sim 100000$  queda desacoplada del sistema de ecuaciones y se puede calcular en estado estacionario ( $\nu$ : difusividad térmica).

Se puede considerar que la corriente total de hidrógeno  $\vec{J}$  tiene dos componentes, una debida a la corriente de hidrógeno dentro de la solución  $\alpha$  ( $\vec{J}_\alpha$ ), y el resto debido a la corriente dentro del precipitado  $\delta$  ( $\vec{J}_\delta$ ).

Si llamamos  $v_\alpha$  y  $v_\delta$  a los volúmenes relativos de fase  $\alpha$  y  $\delta$  respectivamente postularemos

$$\vec{J} = v_\alpha \vec{J}_\alpha + v_\delta \vec{J}_\delta \quad (4)$$

En la fase  $\delta$  la migración de hidrógeno puede ser despreciada, entonces  $\vec{J}_\delta$  es tomada como cero en la ecuación (4). Asumiendo que ambas fases tienen la misma densidad, y llamando  $C_\delta$  a la concentración de hidrógeno en la fase  $\delta$  se cumplirá

$$v_\alpha = \frac{C - C_\delta}{C_\alpha - C_\delta} \quad (5)$$

La solubilidad sólida terminal y el coeficiente de difusión dependen de la temperatura a través de las siguientes relaciones:

$$TSS = C_T e^{\frac{-H}{RT}} \quad , \quad D = D_0 e^{\frac{-Q}{RT}} \quad (6)$$

donde  $C_T$  es una constante,  $H$  el calor de mezcla,  $D_0$  el frequency factor y  $Q$  la energía de activación.

### METODO NUMERICO

El método numérico que implementamos está inspirado en técnicas utilizadas para tratar problemas de solidificación<sup>6,7,8</sup>. Como veremos más adelante, la concentración total  $C$ , en nuestro problema, es en general discontinua (como ocurre con la entalpía en problemas de cambio de fase). Asimismo la concentración en solución  $C_\alpha$ , correspondiendo a la temperatura en análisis de solidificación, debe ser continua. Por otro lado, la característica que diferencia a este problema es que  $C$ , en lugar de ser una función *discontinua* de  $C_\alpha$ , simplemente deja de depender de  $C_\alpha$  al alcanzarse el límite de solubilidad (ecuación 2). En este sentido, el problema tiene ciertas semejanzas con la plasticidad perfecta, donde la tensión deja de ser función de la deformación al alcanzar el límite de fluencia.

Nuestro método se basa en regularizar la dependencia  $C$  vs.  $C_\alpha$  (ecuación 2) con una ley del tipo Norton-Hoff, utilizada en plasticidad:

$$C(C_\alpha, T) = C_\alpha \left\{ 1 + \left( \frac{C_\alpha}{TSS(T)} \right)^P \right\} \quad (7)$$

El problema original se recupera en el límite  $P \rightarrow \infty$ . Por motivos de espacio, nos resulta imposible incluir aquí resultados que ilustren la dependencia de las soluciones obtenidas con  $P$ . Basta decir, entonces, que, habiendo ensayado el rango  $1 \leq P \leq 1500$ , concluimos que los aspectos relevantes de la solución pueden modelarse apropiadamente siempre que  $P$  sea mayor que  $\sim 80$ . Desde luego, todo  $P$  finito implicará un suavizado de las discontinuidades, pero para  $P$  suficientemente alto esto será sólo un efecto local.

Partiendo de la discretización temporal

$$\frac{\partial C}{\partial t} \simeq \frac{C(x, t_{n+1}) - C(x, t_n)}{\Delta t} \quad (8)$$

donde  $t_n, t_{n+1}$  corresponden a sucesivos instantes de una discretización del tiempo con paso  $\Delta t$ , y reescribiendo  $C$  como función de  $C_\alpha$  y  $T$ , obtenemos

$$\frac{C(C_\alpha(x, t_{n+1}), T(x)) - C(C_\alpha(x, t_n), T(x))}{\Delta t} + \nabla \cdot \vec{J}(x) = Q(x) \quad (9)$$

Aplicando ahora la metodología usual de elementos finitos, (método de Galerkin) llegamos al sistema no-lineal de ecuaciones

$$\underline{G}(C_\alpha^{n+1}) = 0 \quad (10)$$

con

$$\begin{aligned}
 G_j(C_\alpha^{n+1}) = & \int_{\Omega} \frac{C(C_\alpha^{n+1}, T) - C(C_\alpha^n, T)}{\Delta t} N_j d\Omega + \\
 & + \int_{\Omega} \left\{ \frac{C_\alpha^n - C_\delta}{C_\alpha^n - C_\delta} D \left[ \nabla C_\alpha^{n+1} + \frac{Q^* C_\alpha^n}{RT^2} \nabla T \right] \right\} \cdot \nabla N_j d\Omega - \\
 & - \int_{\Omega} Q N_j d\Omega - \int_{\partial\Omega} g N_j d\partial\Omega
 \end{aligned} \quad (11)$$

donde  $g$  es el flujo entrante a través de la frontera  $\partial\Omega$ , que asumimos dato,  $\{N_i\}$  son las funciones de peso, y el supraíndice se refiere al paso de tiempo. Nótese que hemos calculado  $\nabla C_\alpha$  en forma implícita para evitar inestabilidades.

Para hallar el cero de  $\underline{G}$  tomando como *guess* la solución anterior  $C_\alpha^n$  usamos un esquema iterativo de Newton-Raphson, dado por

$$\underline{J} \underline{\Delta X} = -\underline{G} \quad (12)$$

donde  $\underline{J}$  es el Jacobiano del sistema, que para nuestro modelo es

$$J_{jk} = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial C}{\partial C_\alpha} N_j N_k \frac{1}{\Delta t} + \frac{C_\alpha^n - C_\delta}{C_\alpha^n - C_\delta} D \nabla N_j \cdot \nabla N_k \right) d\Omega \quad (13)$$

y evaluamos con tres puntos de Gauss como cuadratura.

$\underline{G}$  es el residuo evaluado en el previo iterando, y la derivada  $\frac{\partial C}{\partial C_\alpha}$  es actualizada en cada iteración.  $\underline{\Delta X}$ , que surge de resolver el sistema lineal de ecuaciones<sup>12</sup>, es la actualización de la solución iterativa. Al poseer el residuo  $\underline{G}$  derivadas casi discontinuas cuando el parámetro de regularización  $P$  es alto, no es de extrañar que el método requiera pasos de tiempo pequeños o muchas iteraciones.

## ANALISIS UNIDIMENSIONAL

Con el objeto de comprender la física de la difusión de hidrógeno asistido por temperatura, realizaremos un estudio del modelo presentado en la sección anterior. Vamos a considerar un caso unidimensional que ilustra el comportamiento del modelo presentado.

Sea un slab plano de metal, limitado por los planos  $x = 0$  y  $x = a$ , con concentración inicial de hidrógeno

$$C(x, y, z, t = 0) = C_0 \quad 0 < x < a$$

con el campo de temperaturas fijo, el que asumimos que es lineal e independiente del tiempo

$$T(x, y, z, t) = T_1 + x \frac{T_2 - T_1}{a} \quad (14)$$

con  $T_1, T_2 \in \mathbb{R}, 0 < T_1 < T_2$ .

Puesto que no hay fuentes ni sumideros dentro del dominio, y al hidrógeno no le es permitido atravesar el borde, la masa total de hidrógeno deberá conservarse.

Este ejemplo ha sido estudiado en la referencia [2]. En esta sección sólo mencionaremos algunos resultados obtenidos desde un punto de vista algo diferente.

De (14) y (16),  $TSS$  es una función monótona creciente de  $x$ . Tomemos  $C_0$  mayor que el mínimo de  $TSS$  en  $[0, a]$ . Entonces inicialmente existirá un intervalo que contendrá las fases  $\alpha$  y  $\delta$  en coexistencia, en adelante llamaremos a esta región  $\alpha + \delta$ , y en esta región la ecuación 4 toma la forma

$$J = -v_\alpha D \left( \frac{\partial TSS}{\partial x} + \frac{Q^* TSS}{RT^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) = -\frac{TSS}{TSS - C_\delta} D \frac{H + Q^*}{RT^2} \frac{\partial T}{\partial x} (C - C_\delta) \quad (15)$$

Llamemos ahora  $f$  a la expresión algebraica que multiplica  $(C - C_\delta)$  en la ecuación anterior, y reemplazando en la ecuación 1 obtenemos

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (f(C - C_\delta)) = 0 \quad (16)$$

Como  $f$  es función solamente de  $x$  y estrictamente positiva, si cambiamos de variables a  $W = f(C - C_\delta)$  llegamos a

$$\frac{\partial W}{\partial t} + f \frac{\partial W}{\partial x} = 0 \quad (17)$$

Que es la muy conocida ecuación hiperbólica de transporte bajo el *campo de velocidades*  $f$ . Por lo tanto  $W$  es constante a lo largo de las características del operador  $\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}$ , que son las trayectorias en el plano  $x - t$ , y la solución está completamente determinada por  $f$ . En la Figura 1 mostramos un diagrama de las curvas características resultantes cuando  $|\nabla T| = 15K/mm$ .

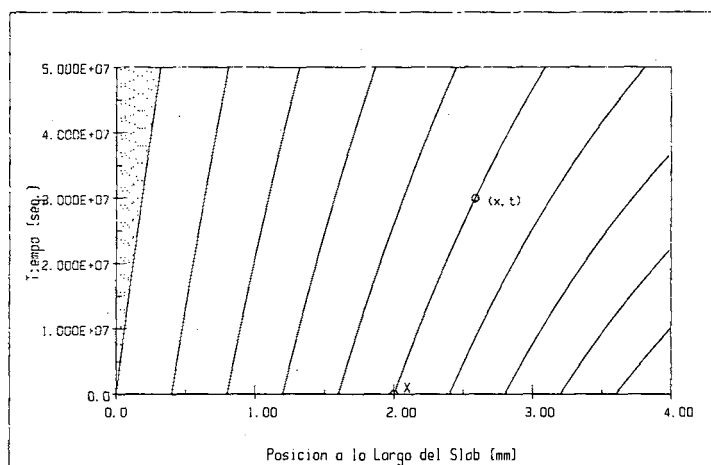


Figura 1. Curvas características asociadas con el operador  $\frac{\partial}{\partial t} + f \frac{\partial}{\partial x}$ .

Los resultados numéricos son obtenidos con valores de constantes típicas del Zr-2.5%Nb, mostradas en la Tabla I, y sobre un slab de 4mm de longitud. Aunque el problema es unidimensional, utilizamos una red bidimensional de triángulos lineales, con una sola capa de elementos a lo ancho y densificada en la zona de blister, totalizando 1602 nodos. A su vez, asignamos a  $P$  el valor 1000.

Símbolo	Nombre	Valor
$Q^*$	Calor de Transporte	25 100 J/mol.
$Q$	Energía de Activación por Difusión	38 400 J/mol.
$D_0$	Frecuency Factor	0.41 mm <sup>2</sup> /seg.
$H$	Calor de la Mezcla	35 900 J/mol.
$C_T$	Constante en TSS	120 0000 ppm.

Tabla I. Datos de aleación Zr-2.5% Nb utilizados en nuestros calculos.

Presentamos tres resultados que se desprenden de [2,9], éstos son comparados con resultados numéricos.

1. La región sombreada en la Figura 1 está ocupada solamente por fase  $\delta$ , esto es, un blister se desarrolla en el lado frío del slab.

Como las características entran al dominio por la izquierda, la solución allí esta determinada por la condición de borde en  $x = 0$ . Como  $J$  debe ser cero en el borde, de la ecuación 15 tenemos  $C = C_\delta$  allí. Pero esto implica  $W = 0$  sobre toda la región sombreada, que es equivalente a  $C = C_\delta$ .

Una forma de verificar esto es observar la evolución del tamaño del blister como función del tiempo que se muestra en la Figura 2. Los puntos mostrados son

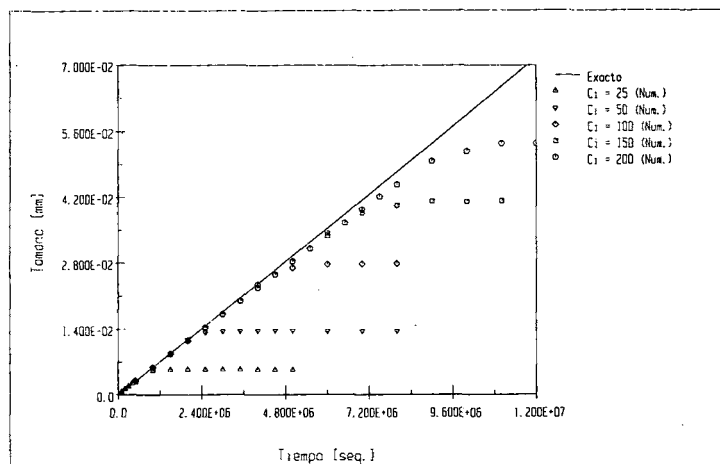


Figura 2. Tamaño del Blister vs. Tiempo y comparación con solución teórica.

numéricos, puede verse el buen acuerdo con la solución teórica. La detención del crecimiento se debe a que deja de existir región  $\alpha + \delta$  en el dominio y por lo tanto la observación 1 deja de tener validez.

2. Para todo  $x$  en la región  $\alpha + \delta$ ,  $C(x, t)$  es una función monótonamente creciente de  $t$ .

Tomemos un  $x$  en la región  $\alpha + \delta$ , y llamemos  $X$  al punto donde la característica que pasa por el punto  $(x, t)$  cruza el eje  $x$  (ver Figura 1). De la ecuación 17 tenemos  $W(X, 0) = W(x, t)$ , que equivale a

$$C(x, t) = C_\delta - \frac{f(X)}{f(x)}(C_\delta - C_o) \quad (18)$$

Como  $\frac{f(X)}{f(x)} < 1$ , claramente  $C(x, t) > C_o$ . Además, si  $t$  es incrementado dejando  $x$  fija,  $X$  se moverá hacia la izquierda y  $f(X)$  será menor. Esto hace que  $C(x, t)$  aumente y queda probada la observación.

3. Para concentraciones iniciales lo suficiente altas se formará una discontinuidad  $(\alpha + \delta, \alpha)$  en la concentración total  $C$ .

Puede mostrarse que, si así no fuera, no se conservaría en general la cantidad total de hidrógeno. Esta formación espontánea de una discontinuidad es ejemplificada en la Figura 3. El frente nace en el punto donde la concentración inicial  $C_o$  corta a  $TSS$ , y se mueve hacia la zona fría estrangulando la región  $\alpha + \delta$ . La continuidad de  $C_\alpha$  impone  $C_\alpha = TSS$  a la derecha del frente, y desde allí hasta  $x = a$  sólo hay fase  $\alpha$  presente. Nótese en la región  $\alpha + \delta$  el cumplimiento de la observación 2.

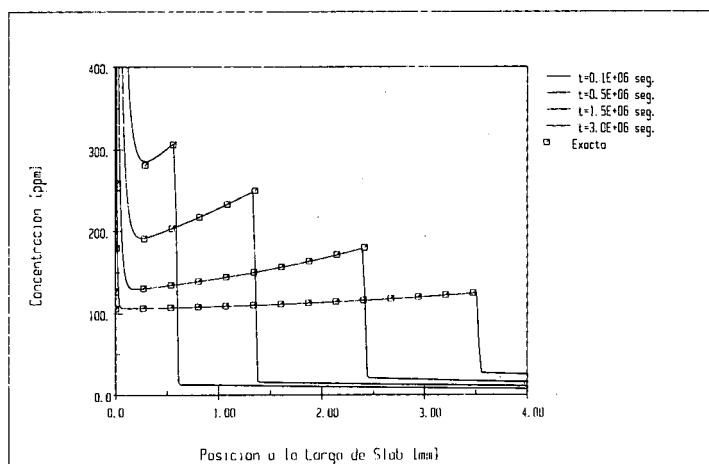


Figura 3. Formación de una discontinuidad  $(\alpha + \delta, \alpha)$ .

Vale la pena notar que si  $C_o$  es mayor que el máximo de  $TSS$  se formará la discontinuidad  $(\alpha + \delta, \alpha)$  en el borde caliente del slab y avanzará hacia el punto frío.



La concentración total  $C$  en la región  $\alpha + \delta$  se puede calcular en forma cuasi-analítica via la ecuación 18, tales resultados se muestran en la Figura 4 en perfecto acuerdo con los resultados numéricos.

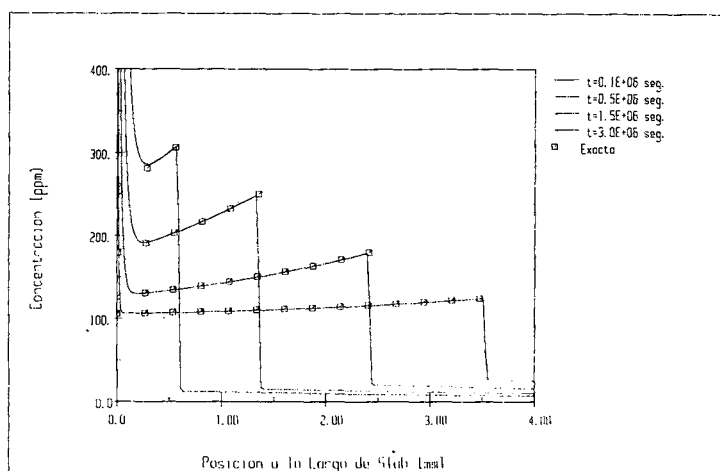


Figura 4. Movimiento de discontinuidad ( $\alpha + \delta, \alpha$ ) y comparación con solución exacta.

## RESULTADOS BIDIMENSIONALES

Pasemos ahora a una aproximación más realista (bidimensional) del problema de contacto *Tubo de Presión/Tubo Calandria* en un reactor tipo CANDU. El tubo de presión, por diferentes motivos, se apoya en el tubo calandria, que está más frío. Esto da lugar a una zona de baja temperatura en el tubo de presión, debida al contacto, que asumiremos tiene ancho 5mm. Despreciando la curvatura del tubo, que tiene diámetro interno 100mm frente a sus 4.06mm de espesor, tomando simetría respecto del centro del contacto, y con condiciones de contorno térmicas apropiadas, se obtiene el campo de temperaturas de la Figura 5. En el eje longitudinal (perpendicular al gráfico) se asume simetría de traslación. En la figura, puede verse la zona fría (izquierda abajo) producida por el contacto, y a la derecha una zona de temperatura esencialmente constante que permite cortar allí el dominio de análisis ( $x = 20$ ) porque no es de esperar migración de hidrógeno en zonas más alejadas. Asimismo, en las cercanías del eje  $y$ , se observa cierto paralelismo de las isoterms. Esto motivó el análisis unidimensional de la sección anterior, y las conclusiones de dicho análisis (evolución del blister, formación de discontinuidades) se trasladan al caso 2-D para la zona de  $x$  pequeño.

A los efectos de la simulación numérica de la difusión de hidrógeno, la temperatura es un dato de entrada, por lo que no entraremos en más detalles (ver [9]). Sea entonces el dominio de la Figura 5 ( $0 \leq x[mm] \leq 20, 0 \leq y[mm] \leq 4.06$ ), con el campo térmico allí mostrado (que lleva al campo  $TSS$  de la Figura 6, donde estudiaremos la evolución

de una concentración inicial de 50ppm de hidrógeno (uniforme), sin flujo a través del contorno ni fuentes volumétricas. Una concentración de 50ppm de hidrógeno es una buena aproximación a la que tienen los tubos de presión de reactores luego de 20 años de operación. El coeficiente de regularización utilizado fue  $P = 100$ , con  $\Delta t = 5000\text{seg.}$  y una red de 4400 nodos densificada en la zona de contacto, (generada con *ENREDO* [10]).

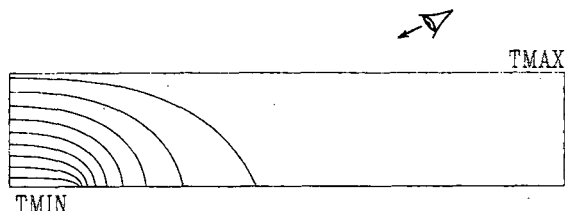


Figura 5. Campo de Temperaturas 2D Estacionario. MIN=454.9K, MAX=528.1K.

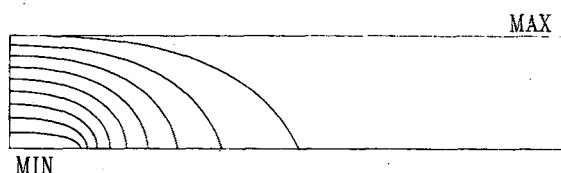


Figura 6. Solubilidad Sólida Terminal 2D. MIN=9.24ppm, MAX=33.75ppm.

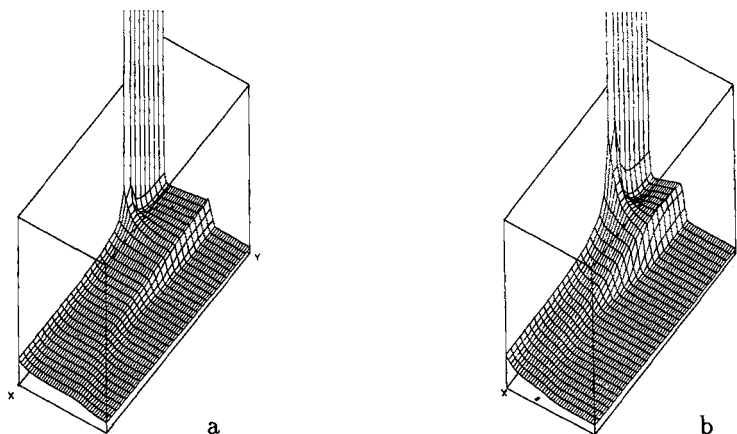


Figura 7. Vista espacial del campo de concentraciones para: (a)  $t = 200000\text{ seg.}$ , (b)  $t = 450000\text{ seg.}$  El cubo de graficación es  $0 \leq x \leq 10, 0 \leq y \leq 4.06, 0 \leq C \leq 500$ .

En la Figura 7a, presentamos una vista espacial del campo de concentración obtenido a  $t \approx 2.3$  días ( $2 \times 10^5 \text{seg.}$ ), luego de establecido el contacto. El punto de vista se muestra en la Figura 5. Observamos el blister en desarrollo en la zona posterior, y la discontinuidad ( $\alpha + \delta, \alpha$ ) avanzando hacia la zona fría.

Veamos por lo tanto la vista espacial de la Figura 7b, obtenida a  $t \simeq 5.2$  días ( $4.5 \times 10^5 \text{ seg.}$ ). La discontinuidad ha avanzado considerablemente y permite estimar un tiempo de  $\simeq 20$  días para que desaparezca la región  $\alpha + \delta$ .

Por efecto de la regularización, la interfase ( $\delta, \alpha$ ) en el estado estacionario no es abrupta. En consecuencia, la forma final del blister no puede obtenerse como una zona de nivel  $C = C_\delta$ . En la Figura 8 mostramos la línea de nivel  $C = 2000 \text{ ppm}$ , que constituye una buena estimación del aspecto geométrico del blister. Esta forma, más gruesa en los bordes, deberá ser tomada en cuenta de analizarse la concentración de tensiones producida por el precipitado de hidruro. Sin embargo, se requieren análisis más exhaustivos para extraer conclusiones firmes, ya que esta forma del blister aparenta ser sensible a las condiciones de contorno utilizadas en el cálculo térmico<sup>11</sup>.

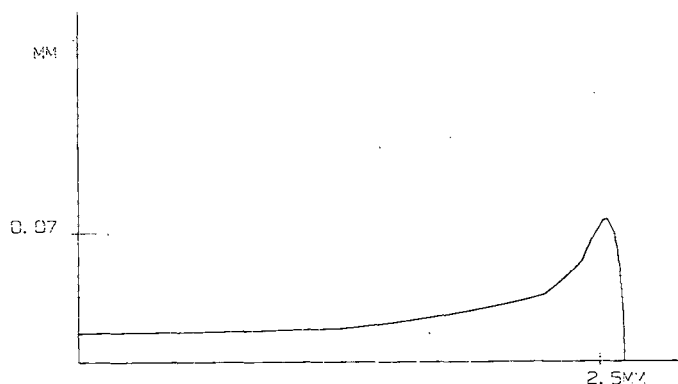


Figura 8. Forma del blister bidimensional realizada con una curva de nivel  $C=2000 \text{ ppm}$ . El contacto se termina en  $x = 2.5$ . Notar que no se respeta la escala.

En lo que respecta a aspectos numéricos y computacionales, reportamos un promedio de 14 iteraciones por paso de tiempo, con un costo aproximado de 20 minutos por paso temporal (MICROVAX II).

## CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un método de elementos finitos para las ecuaciones de migración de hidrógeno asistida por temperatura. Dicho método, apelando a una regularización de las leyes constitutivas, permite resolver el problema en geometrías arbitrarias. Al no depender de la estructura de la red, nuestro método podría asociarse con técnicas adaptivas que sigan el movimiento de las discontinuidades, ahorrándose así tiempo de procesamiento. Aún utilizando redes fijas (muy densas), nos fue posible extraer resultados de interés tecnológico en equipos pequeños. Las comparaciones con soluciones cuasi-analíticas muestran excelente acuerdo.

## REFERENCIAS

1. A. Sawatzky, "Hydrogen in Zircaloy-2: its Distribution and Heat of Transport", *J. Nucl. Mat.*, No. 2, pp. 321(1960).
2. A. Sawatzky y E. Vogt, "Mathematics of the Thermal Difusion of Hydrogen in Zircaloy-2", *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, Vol. 227, pp. 917, (1963).
3. T. Byrne, "Hydride Precipitation and Blister Growth Modeling in Zr-Nb Pressure Tubes", Ontario Hydro Report, No. 84-30-H, Vol. 13, (1984).
4. T. Byrne y M. Leger, "Hydride Blister Growth Modeling", Ontario Hydro Report, No. 85-29-H, Vol. 16, (1985).
5. A. White, A. Sawatzky y C. Woo, "A Computer Model for Hydride-Blister Growth in Zirconium Alloys", Atomic Energy of Canada Limited, Report-8386, (1985).
6. D. Blanchard y M. Frémond, "The Stefan Problem: Computing Without The Free Boundary", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, pp. 757-771, (1984).
7. L. Crivelli y S. Idelsohn, "A Temperature-Based Finite Element Solution for Phase-Change Problems", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 23, pp. 99-119, (1986).
8. W. Rolph y K. Bathe, "An Efficient Algorithm for Analysis of Nonlinear Heat Transfer With Phase Changes", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 18, pp. 119-134, (1982).
9. R. Saliba, "Simulación de la Migración de Hidrógeno y Formación de Blisters en Aleaciones de Circonio", Trabajo Especial de la carrera de Ingeniería Nuclear, Instituto Balseiro, (1991).
10. M. Vénere y E. Dari, "ENREDO versión 6.1", Manual del Usuario, Publicación Interna, Centro Atómico Bariloche, (1990).
11. M. Shoukri y A. Chan, "On The Thermal Analysis of Pressure Tube/Calandria Tube Contact in Candu Reactors", *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 104, pp. 197-206 (1987).