

DESARROLLO DE UN PROCEDIMIENTO PARA EL CÁLCULO ACOPLADO CFD-NEUTRÓNICO CON ANSYS CFX 12.1 Y PARCS

C. Peña¹, S. Chiva¹, R. Miró², T. Barrachina², F. Pellacani³ y R. Macián Juan³

¹Departamento de Ingeniería Mecánica y Construcción
Universitat Jaume I - UJI
Campus del Riu Sec 12080 Castellón de la Plana, Spain
carlos.pena@uji.es, schiva@emc.uji.es

²Instituto de Seguridad Nuclear, Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM)
Universitat Politècnica de València - UPV
Camí de Vera s/n, 46021 Valencia
rmiro@iqn.upv.es, tbarrachina@iqn.upv.es

³NTech Lehrstuhl für Nukleartechnik
Technische Universität München
Boltzmannstr. 15 85748 Garching, Germany
pellacani@ntech.mw.tum.de, macian@ntech.mw.tum.de

SINOPSIS. *Se ha desarrollado una nueva herramienta computacional para los cálculos de reactores nucleares basada en el acople entre el código de transporte neutrónico PARCS y el código comercial de dinámica de fluidos computacional (CFD) ANSYS CFX 12.1. En este trabajo se presenta la metodología desarrollada para el acople de los códigos ANSYS CFX/PARCS. En el pasado, las metodologías desarrolladas tenían por objeto el acople de códigos neutrónicos 3D con códigos termohidráulicos 1D. En este trabajo se presenta el desarrollo de un procedimiento para el acople de los códigos ANSYS CFX/PARCS siendo las metodologías existentes acoples de códigos neutrónicos tridimensionales con códigos termohidráulicos unidimensionales.*

Con esta nueva herramienta de simulación se abren nuevas posibilidades en el diseño de elementos combustibles, ya que contribuye a un mejor entendimiento y una mejor simulación de los procesos de transferencia de calor y fenómenos específicos de dinámica de fluidos como el “crossflow”. La simulación de transitorios de inserción de barra de control, dilución de boro o inyección de agua fría se pueden llevar a cabo con un nivel de precisión que no es posible alcanzar con las metodologías actuales basadas en el uso de códigos de sistema.

El transporte de neutrones depende de varios parámetros, entre ellos, la temperatura del combustible y la densidad del moderador. Estos datos se obtienen del código CFD con una elevada resolución a nivel local y se utilizan como entrada al código neutrónico para calcular la distribución de potencia en el combustible (pin by pin) la cual a su vez se aplica como condición de contorno en el código CFD.

Como se utilizan dos nodalizaciones diferentes para discretizar el mismo sistema, para realizar un intercambio de datos efectivo ha sido necesario desarrollar un procedimiento para poder promediar e interpolar entre éstos. Este procedimiento se ha llevado a cabo mediante la interfaz “User Fortran” que incorpora el código ANSYS CFX. Se ha desarrollado una librería con varias subrutinas que permiten el cálculo y la sincronización entre ambos códigos. La transferencia de datos se realiza mediante el protocolo de comunicación “Parallel Virtual Machine” (PVM).

1. INTRODUCCIÓN

Para obtener la licencia de una planta de energía nuclear se deben realizar una gran variedad de análisis usando códigos termohidráulicos 1D de tipo *best-estimate* capaces de simular una planta completa en régimen transitorio y situaciones de accidente. Con su uso es posible simular un amplio rango de escenarios no solo en condiciones de accidentes como un LOCA sino también transitorios de interés en condiciones normales de funcionamiento como una inserción o extracción de las barras de control. Estos transitorios pueden ser analizados con códigos acoplados capaces de simular el comportamiento termohidráulico y neutrónico de un reactor nuclear con un alto grado de fiabilidad.

No obstante, el estudio detallado de asimetrías de potencia y distribuciones de caudal dentro de los elementos de combustible, incluso usando las opciones de flujo 3D disponibles en algunos de los códigos *best-estimate*, está fuera del alcance de estos códigos acoplados.

El uso de códigos CFD permite captar un alto nivel de precisión de la distribución espacial del flujo ya que son capaces de reproducir detalladamente el movimiento del flujo a nivel de una sola varilla y también considerar la turbulencia y su efecto en la dinámica del fluido que determinan la transferencia local de calor, importante en la evaluación de la integridad del combustible. Los códigos CFD representan detalladamente los campos de velocidad y temperatura en el moderador, los cuales pueden ser acoplados con las descripciones neutrónicas y materiales del combustible a fin de obtener un grado sin precedentes en el análisis del comportamiento del combustible nuclear.

La presente ponencia describe un procedimiento de acople entre un código de CFD de uso genérico y un código de difusión, en concreto el código comercial de CFD ANSYS CFX 12.1[1] y el software de difusión tridimensional de neutrones PARCS. Se ha creado al sistema de acople llamado *Coupled Solver ANSYS CFX/PARCS* (CSAP) y ha sido verificado con un test en condiciones de régimen estacionario para una cuarta parte de un subcanal de un elemento de combustible. Los resultados han sido comparados con los obtenidos mediante el uso del código acoplado RELAP5/PARCS [2] para verificar la consistencia y exactitud.

2. DESCRIPCIÓN DEL PROCEDIMIENTO DE ACOUPLE Y EL PROCESO DE INTERCAMBIO DE DATOS (CSAP)

Esta sección describe el procedimiento de acople y el modo por el cual las ecuaciones de ANSYS CFX y PARCS [3] son resueltas usando variables conjuntamente. Dicho procedimiento hace posible que ambos programas puedan sincronizarse y utilicen como valores de entrada y salida los del otro código, y viceversa, de modo eficiente y físicamente consistente.

2.1 Descripción del procedimiento

Los códigos CFD son capaces de predecir con un alto grado de precisión el comportamiento termohidráulico (en régimen transitorio y estacionario) de un sistema sólido-líquido como el

representado por un elemento combustible de un reactor nuclear cuando se considera el flujo en una sola fase. Ferrando et al. [4] y Conner et al [5] han evaluado códigos CFD en diferentes niveles de resolución para aplicaciones de seguridad nuclear. En trabajos previos, la distribución de potencia considerada en el combustible nuclear ha sido considerada con forma constante, o bien determinada por una función dependiente del tiempo no influenciada por el comportamiento neutrónico del combustible.

Un código neutrónico necesita los valores de variables termohidráulicas fundamentales como la temperatura y densidad del moderador y temperaturas de la vaina para determinar dinámicamente la distribución del flujo neutrónico y la potencia producida en el combustible. PARCS se puede ejecutar acoplado con los códigos RELAP5 o TRACE. La transferencia de información entre estos códigos es similar a la requerida para el acople ANSYS CFX/PARCS. Sin embargo la correspondencia entre la malla termohidráulica y la neutrónica es relativamente sencilla ya que en el caso de mallas gruesas las dimensiones de los nodos neutrónicos y los volúmenes computacionales termohidráulicos son similares, las variables pueden ser transferidas entre códigos sin prácticamente cambios. En el caso de usar un código CFD para la simulación del flujo y la transferencia de calor las mallas termohidráulicas y neutrónicas tienen dimensiones muy diferentes.

La Figura 1 muestra una visión general de los parámetros requeridos por ambos códigos para llevar a cabo la simulación acoplada.

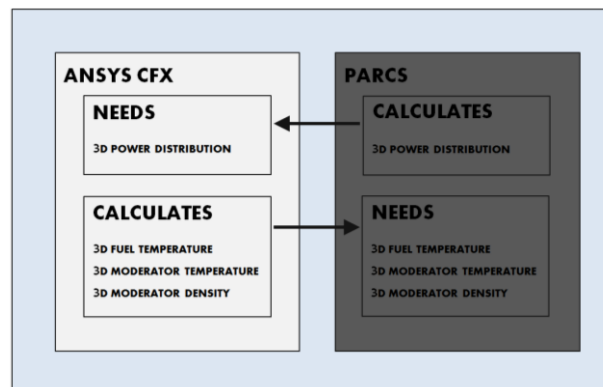


Figura 1.- Esquema general de los parámetros requeridos por los códigos para realizar una simulación acoplada en situaciones básicas.

2.2 Descripción del proceso de intercambio de datos

La Figura 2 describe el proceso general necesario para la asimilación de las variables entre ambos códigos:

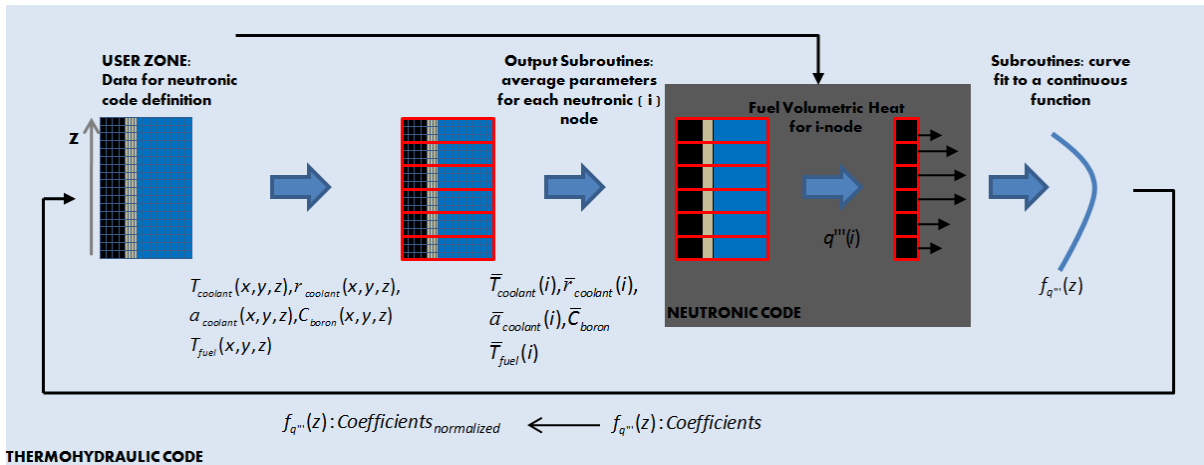


Figura 2.- Diagrama de intercambio de datos.

Las operaciones necesarias se realizan mediante un grupo de subrutinas desarrolladas en lenguaje mixto de programación FORTRAN/C contenidas en la librería dinámica CSAP. Las subrutinas llamadas directamente desde ANSYS CFX han sido programadas en FORTRAN, mientras que las subrutinas encargadas de sincronizar e intercambiar datos con PARCS por medio de llamadas de PVM en C (la librería CSAP está enlazada a las librerías dinámicas de PVM) [6].

A continuación se muestra el diagrama del acople y el esquema de la comunicación entre procesos:

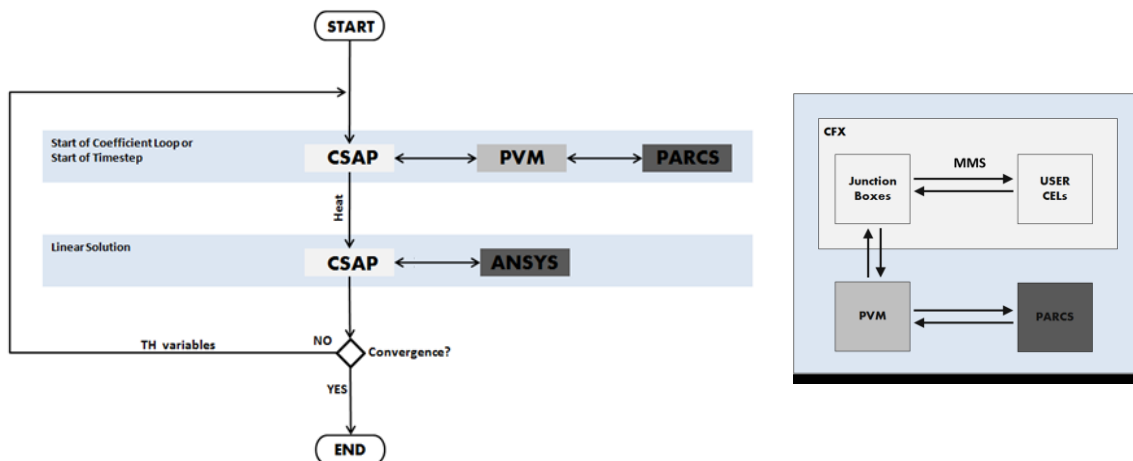


Figura 3.- Diagrama del acople explícito (izquierda) y representación esquemática de la comunicación entre procesos (derecha).

Los datos termodinámicos calculados por ANSYS CFX y elaborados por CSAP son usados para el cálculo de la distribución de potencia en PARCS en la iteración n . Esta distribución de potencia calculada es entonces usada en el cálculo termodinámico para la iteración $n+1$.

Después de que la iteración haya empezado, una rutina de tipo Junction Box es llamada

durante la etapa de *User Input* antes de que el *Solver* comience. Este paso crea e inicializa los ficheros para almacenar temporalmente la información de cada partición.

Durante la etapa de resolución el cálculo de los datos a ser transmitidos entre códigos es efectuado tras finalizar la iteración n y antes de la iteración $n+1$. Esto es requerido debido a que los datos deben ser recolectados desde todas las particiones. En este punto los datos calculados en la iteración n son enviados a PARCS a través de PVM y son usados para calcular la distribución de potencia que es transferida a ANSYS CFX para ser usada en la iteración $n+1$. Antes de aplicar la potencia distribuida como termino fuente de energía, se realiza un ajuste polinómico por mínimos cuadrados para obtener una función continua de modo que pueda ser aplicado a cada punto de la malla del CFD. En este sentido la malla más gruesa de PARCS puede ser consistentemente mapeada a la malla más refinada de ANSYS CFX

Cuando el *Solver* de ANSYS CFX alcanza los criterios de convergencia establecidos o el comando de parada es enviado por el usuario, la librería CSAP indica la correcta finalización del cálculo termohidráulico a PARCS, por lo que el proceso neutrónico terminará.

3. DESCRIPCIÓN DE LOS MODELOS UTILIZADOS PARA LA VALIDACIÓN

3.1 Descripción del modelo de ANSYS CFX

Para el diseño óptimo del modelo se han elaborado con ICEM CFD diversas configuraciones de mallas hexaédricas y se ha realizado un análisis de la sensibilidad de la malla. El modelo con el menor tiempo computacional y con una independencia en los resultados obtenidos cuenta con alrededor de 5000 elementos y representa una cuarta parte de un subcanal usando condiciones de contorno de simetría para el plano de corte axial. Este modelo, incluso siendo simplificado, contiene todos los elementos requeridos para test más complejos.

El modelo consiste en cuatro diferentes dominios: uno fluido y tres sólidos (ver Figura 4). Todos ellos están conectados por interfaces con flujo térmico conservativo. El calor es únicamente generado en el dominio del combustible pero es transferido al fluido a través de la conducción en las regiones de la vaina y del huelgo de la varilla. El huelgo es modelado como un dominio sólido y no fluido análogamente a como se realiza en RELAP5. En ANSYS CFX se han añadido los materiales con las propiedades usadas en RELAP5 para poder realizar la validación de resultados.

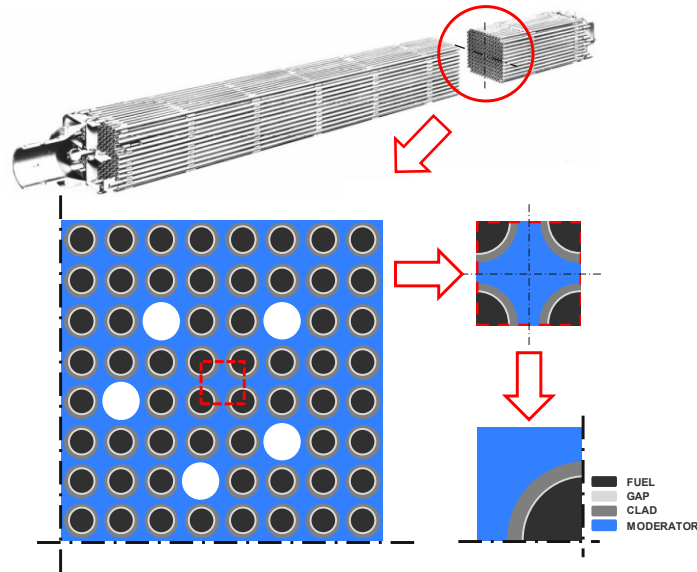


Figura 4. Sección transversal de un elemento de combustible PWR y detalle de una cuarta parte de subcanal.

Las condiciones de contorno usadas para la simulación del CFD se muestran en la Tabla 1. El modelo de turbulencia usado para la fase líquida es el SST, basado en el modelo de turbulencia RANS.

Tabla 1.- Condiciones de contorno para la simulación en estado estacionario.

| | |
|--|-------------|
| Temperatura de entrada del moderador | 567.7 K |
| Flujo másico del moderador | 0.0944 kg/s |
| Presión de referencia | 15.51 MPa |
| Potencia media del elemento de combustible | 17.005 MW |

3.2 Descripción del modelo de PARCS

El modelo creado para PARCS 2.7 es un modelo neutrónico 3D de un elemento de combustible PWR con las características anteriormente citadas. Las secciones eficaces y los parámetros neutrónicos para el elemento combustible han sido calculadas con la metodología SIMTAB basada en el uso conjunto de CASMO/SIMULATE [7] [8] y desarrollado por la Universitat Politècnica de València conjuntamente con Iberdrola [9] [10]. Se pueden llevar a cabo un gran rango de condiciones transitorias ya que han sido preparadas para un gran rango de presión y temperatura.

El método usado para el cálculo de la temperatura Doppler en el combustible está basado en la temperatura media de la estructura de calor calculada por el código termohidráulico. La descripción geométrica del modelo de elementos de combustible contiene 34 nodos en la dirección vertical (primer nodo 14 cm, nodos del 2 al 33 10.625 y último nodo 20 cm) y 1 en la dirección transversal con 23 cm.

4. VALIDACIÓN DEL PROCEDIMIENTO DE ACOPLE

El procedimiento descrito en las secciones anteriores, para acoplar ANSYS CFX y PARCS ha sido validado comparando los resultados producidos mediante el acople RELAP5/PARCS. En RELAP5 el modelo termohidráulico 1D de un elemento de combustible genérico está formado por 34 nodos pero solamente del 2 al 33 representa la longitud activa del elemento de combustible. Los valores del cálculo acoplado con ANSYS CFX/PARCS son valores medios volumétricos que engloban los volúmenes computacionales contenidos en los volúmenes de la malla mucho más gruesa del RELAP5.

No se ha considerado el efecto de los espaciadores y únicamente la pérdida de presión por fricción a lo largo de las varillas contribuye la caída de presión en el elemento de combustible.

4.1 Resultados de la simulación acoplada para un caso estacionario

La distribución de potencia obtenida con RELAP5/PARCS en régimen estacionario ha sido usada en un primer momento como condición de contorno para el cálculo de CFD comprobando la validez del modelo ANSYS CFX. Posteriormente, partiendo de potencia constante, con la simulación del sistema ANSYS CFX/PARCS se obtiene el resultado siguiente:

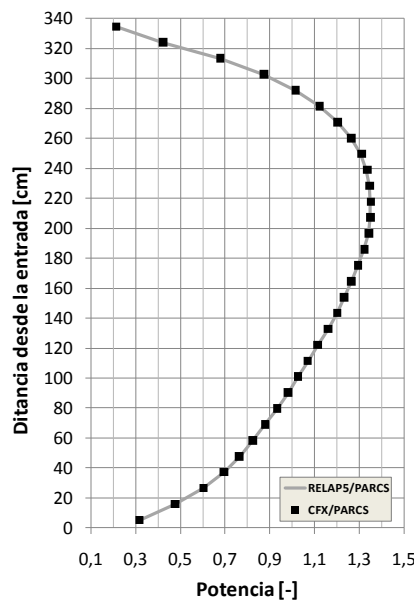


Figura 5.- Comparación de la distribución de potencia obtenida con los códigos acoplados de RELAP5/PARCS y ANSYS CFX/PARCS.

La media de temperatura de la varilla de combustible (asumiendo que todas las varillas tienen la misma potencia) a lo largo del eje axial, la temperatura media del moderador y la densidad media del moderador se muestran en la Figura 5. Los resultados muestran un perfecto ajuste entre ambas soluciones acopladas, validando el procedimiento de acople desarrollada en CSAP. Es importante remarcar que estos resultados no muestran todas las capacidades de la simulación con ANSYS CFX/PARCS, ya que los valores locales detallados para el flujo y variables de la varilla de combustible no han sido representadas, y el problema elegido no contiene asimetrías internas de los elementos de combustibles ya que todas las varillas de

control tienen el mismo poder. La elección del problema resuelto está condicionada por las capacidades disponibles en RELAP5/PARCS, de modo que ambas simulaciones puedan ser comparadas con rigor.

El valor de k efectiva calculado por RELAP5/PARCS corresponde a 1.055552 y el calculado con ANSYS CFX/PARCS es 1.055605. La diferencia de reactividad se considera aceptable.

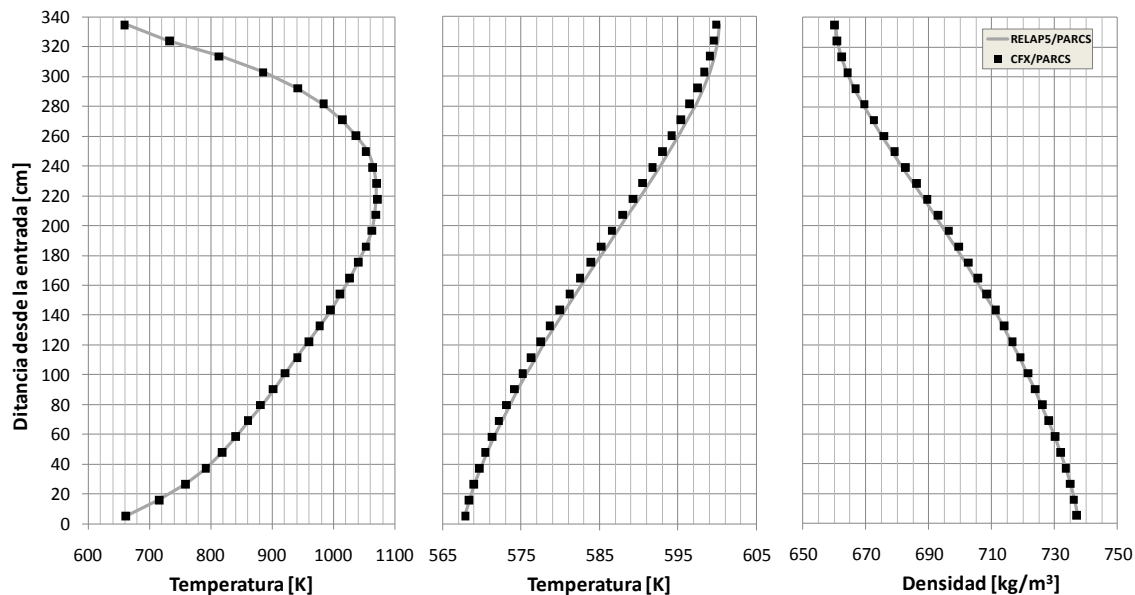


Figura 6.- Comparación de la distribución axial de los valores de temperatura volumétrica media de la estructura de calor (izquierda), temperatura del moderador (centro) y densidad del moderador (derecha) obtenido con los códigos acoplados de RELAP5/PARCS y ANSYS CFX/PARCS.

5. CONCLUSIONES

El procedimiento genérico de acople entre el código CFD ANSYS CFX y el código de difusión de neutrones PARCS ha sido desarrollado y testeado en la simulación de un modelo simplificado de elemento de combustible. Los resultados obtenidos validan el procedimiento en condiciones estacionarias. Futuros desarrollos se centran en la validación del procedimiento considerando uno o más elementos de combustible con la intención de investigar fenómenos más complejos a nivel tridimensional.

REFERENCIAS

- [1] ANSYS CFX Manual. ANSYS Inc., 2009.
- [2] Relap5/mod3 Code Manual Volume I, Idaho National Engineering Laboratory, June 1995.
- [3] PARCS v2.6, U.S. NRC Core Neutronics Simulator, USER MANUAL, Purdue University 2004.
- [4] J. Ferrando, R. Miró, S. Chiva, G. Verdú, Detailed CFD simulation of a PWR fuel rod and fuel element Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, September 12-15, 2005, Avignon, France.
- [5] Michael E. Conner, Emilio Baglietto, Abdelaziz M. Elmahdi, CFD methodology and

- validation for single-phase flow in PWR fuel assemblies Nuclear Engineering and Design, Volume 240, Issue 9, September 2010, Pages 2088-2095.
- [6] Janus Kowalik, PVM: Parallel Virtual Machine. A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing, MIT Press Scientific and Engineering Computation, MIT, 1994.
- [7] Joel Rhodes Malte Edenius, CASMO-4 A FUEL ASSEMBLY BURNUP PROGRAM User's Manual, Studsvik Scandpower Inc., 2001.
- [8] T. Cronin, K. S. Smith, D. M. Ver Planck, "SIMULATE-3. Advanced three-dimensional two-group reactor analysis code", Studsvik/SOA-95/18, 1995.
- [9] R. Miró, T. Barrachina, F. Maggini, O. Roselló, G. Verdú, A. Gómez, A. Ortego, J. C. Martínez-Murillo, Utilization of SIMTAB methodology in translating the kinetics parameters from SIMULATE-3 to RELAP5/PARCS for REA 3D-dynamic analysis in Trillo NPP. ENS International Meeting on LWR Fuel Performance, 2006 Salamanca Spain.
- [10] O. Roselló, Desarrollo de una metodología de generación de secciones eficaces para la simplificación del núcleo de reactores de agua ligera y aplicación en códigos acoplados neutrónicos termohidráulicos, PhD Thesis, UPV, 2004.