



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

Desarrollo y verificación de una plataforma multifísica de altas prestaciones para Análisis de Seguridad en Ingeniería Nuclear

TESIS DOCTORAL

Agustín Abarca Giménez

Dirigida por:

Dr. Rafael Miró Herrero

Dr. Gumersindo Jesús Verdú Martín

Mayo 2017

Agradecimientos

En primer lugar, quiero dar las gracias a Rafa y a Gúmer, por su apoyo y su confianza, porque sin su ayuda y motivación no habría podido realizar esta tesis.

Extiendo el agradecimiento a todo el grupo SENUBIO por el buen ambiente de trabajo y compañerismo reinante. A todos los que seguimos y los que han pasado todos estos años por el grupo, y por extensión a todos los compañeros del Área de Ingeniería Nuclear del Departament d'Enginyeria Química i Nuclear de la UPV.

A mi familia, en especial a mis padres y a mi hermano por su apoyo incondicional durante estos años. Sin su esfuerzo y sacrificio todo esto no sería posible.

A mi mujer Susana por su paciencia y comprensión, gracias.

A mis hijos Thais y Gael por acompañarme en esta travesía. Gracias a ellos, alcanzar la meta es más dulce.

Finalmente, agradecer a Centrales Nucleares Almaraz-Trillo y a Iberdrola Generación Nuclear por la financiación obtenida y por los datos e información facilitada.

A mi familia

Resumen

En los últimos años, paralelamente a los avances en tecnología informática, se están desarrollando multitud de herramientas informáticas mediante las que es posible obtener una descripción detallada de los fenómenos que tienen lugar en el núcleo de los reactores nucleares. El objeto de estas nuevas herramientas es el de realizar análisis de seguridad en reactores nucleares utilizando técnicas de mejor estimación. Las técnicas de mejor estimación, en contraposición con las conservadoras, permiten la operación del reactor con márgenes de seguridad más estrechos, y por tanto mayor economía del núcleo.

En este contexto, en la presente tesis doctoral se desarrolla una plataforma informática que integra códigos informáticos que cubren la mayor parte de las físicas que tienen lugar en los reactores nucleares. Para la integración de los diferentes fenómenos de realimentación entre termohidráulica, neutrónica, mecánica y transmisión de calor se han desarrollado una serie de acoplamientos entre los códigos que componen la plataforma. Todos los desarrollos realizados tienen por objetivo representar de forma realista el diseño y comportamiento de la instalación nuclear, incluyendo el sistema de control, los elementos y las varillas de combustible.

En la plataforma informática se incluyen algunos de los códigos de última generación (estado de arte) para el análisis del comportamiento de reactor. En el plano termohidráulico se utiliza el código acoplado desarrollado, formado por el acople semi-implícito entre el código de sistema TRACE y el de subcanal COBRA-TF (CTF), cuya versión paralela ha sido creada en este trabajo. En transitorios en los que resultan necesarios los cálculos de neutrónica tridimensional, se ha desarrollado el acople explícito entre el simulador tridimensional de núcleos PARCS y el código de subcanal CTF. Para el análisis de la integridad de las varillas de combustible se emplean los códigos FRAPCON y FRAPTRAN, acoplando este último de forma temporalmente explícita con CTF.

Todos los desarrollos realizados se han incluido en una misma plataforma informática que los engloba y coordina las simulaciones bajo las directrices del usuario. La plataforma posee suficiente flexibilidad para realizar estudios de seguridad en multitud de escenarios operacionales o accidentales, y se desea que en un futuro pueda ser utilizada en cálculos de apoyo a licencia. Las herramientas desarrolladas han sido verificadas mediante una serie de aplicaciones prácticas en distintos transitorios y escenarios accidentales en reactores de agua ligera. Los resultados obtenidos se han comparado con medidas reales de planta y con los resultados de otros códigos de simulación mostrando una adecuada capacidad predictiva.

El trabajo realizado en la presente tesis doctoral se enmarca dentro de la línea de investigación financiada por el *Ministerio de Economía y Competitividad* en el proyecto NUC-MULTPHYS (ENE2012-34585) y los proyectos de colaboración interdisciplinar de la *Universitat Politècnica de Valencia* COBRA_PAR (PAID-05-11-2810) y Open-NUC (PAID-05-12).

Resum

En els últims anys, paral·lelament als avanços en tecnologia informàtica, s'estan desenvolupant multitud de ferramentes informàtiques mitjançant les quals és possible obtenir una descripció detallada dels fenòmens que tenen lloc en el nucli dels reactors nuclears. L'objecte final d'aquestes noves ferramentes és el de realitzar anàlisis de seguretat a reactors nuclears utilitzant tècniques de millor estimació. Les tècniques de millor estimació, en contraposició amb les conservadores, permeten l'operació del reactor amb marges de seguretat més estrets, i per tant una major economia del nucli.

En aquest context, en el present treball de tesi es desenvolupa una plataforma informàtica que integra codis informàtics que cobreixen la major part de les físiques que tenen lloc als reactors nuclears. Per a la integració dels diferents fenòmens de realimentació entre termohidràulica, neutrònica i transmissió de calor s'han desenvolupat una sèrie d'acoblements entre els codis que componen la plataforma. Tots els desenvolupaments realitzats tenen per objectiu representar de forma realista el disseny i comportament de la instal·lació nuclear, incloent el sistema de control, els elements i les varetes de combustible.

A la plataforma informàtica s'inclouen alguns dels codis d'última generació (estat de l'art) per a l'anàlisi del comportament de reactor. En el pla termohidràulic s'utilitza el codi acoblat desenvolupat, format per l'acoblament semi-implícit entre el codi de sistema TRACE i el de subcanal COBRA-TF (CTF), en una versió paral·lela creada en aquest treball. En transitoris en els que resulten necessaris els càlculs de neutrònica tridimensional, s'ha desenvolupat l'acoblament explícit entre el simulador tridimensional de nuclis PARCS i el codi de subcanal CTF. Per a l'anàlisi de la integritat de les varetes de combustible s'empren els codis FRAPCON i FRAPTRAN, acoblant aquest últim de forma temporalment explícita amb CTF.

Tots els desenvolupaments realitzats s'han inclòs en una mateixa plataforma informàtica que els engloba i coordina les simulacions sota les directrius de l'usuari. La plataforma posseeix suficient flexibilitat per realitzar estudis de seguretat en multitud d'escenaris operacionals o accidentals, i es desitja que en un futur pugui ser utilitzada en càlculs de suport a llicència. Les ferramentes desenvolupades han sigut verificades mitjançant una sèrie d'aplicacions pràctiques en diferents transitoris i escenaris accidentals en reactors d'aigua lleugera. Els resultats obtinguts s'han comparat amb mesures reals de planta i amb els resultats obtinguts amb altres codis de simulació, mostrant una adequada capacitat predictiva.

El treball realitzat en la present tesi doctoral s'emmarca dins de la línia d'investigació finançada pel *Ministeri d'Economia i Competitivitat* en el projecte NUC-MULTPHYS (ENE2012-34585) i els projectes de col·laboració interdisciplinària de la *Universitat Politècnica de València* COBRA_PAR (PAID-2810.11.05) i Open-NUC (PAID-05-12).

Abstract

In recent years, in parallel with advances in computer technology, a multitude of computer tools have been developed through which it is possible to obtain a detailed description of the phenomena occurring in the core of nuclear reactors. The final objective of these new tools is to perform safety analysis using best estimate techniques. The best estimate techniques, as opposed to the conservative ones, allow the operation of the reactor with narrower safety margins, and thus greater core economy.

In this context, in this work is developed an multiphysics computer platform that integrates simulation codes that cover most of the physics that take place in nuclear reactors. For the integration of the different feedback phenomena between thermal-hydraulics, neutronics and heat transfer, a series of couplings have been developed between the codes that compose the platform. All the developments carried out are intended to realistically represent the design and behavior of the nuclear facility, including the control system, fuel elements and fuel rods.

The computer platform includes some of the state-of-the-art codes for reactor analysis. The thermal-hydraulics is covered with a developed coupled code, consisting of the semi-implicit coupling between the TRACE system code and the subchannel code COBRA-TF (CTF), whose parallel version has been created in this work. In transients where three-dimensional neutron calculations are necessary, the explicit coupling between the three-dimensional PARCS core simulator and the subchannel code CTF has been developed. For the analysis of the integrity of the fuel rods, the FRAPCON and FRAPTRAN codes are used, coupling the latter explicitly with CTF.

All the developed tools have been included in the same computer platform that encompasses and coordinates the simulations under the user's guidelines. The platform has enough flexibility to perform safety studies in a multitude of operational or accidental scenarios, and it is hoped that in the future it may be used for supporting license calculations. The developed tools have been verified through a series of practical applications in different transient and accidental scenarios in light water reactors. The results obtained have been compared with actual plant measurements and with the results of other simulation codes showing adequate predictive capacity.

The work carried out in this doctoral thesis is part of the research line financed by the *Ministerio de Economía y Competitividad* in the NUC-MULTPHYS project (ENE2012-34585) and the interdisciplinary collaboration projects of the *Universitat Politècnica de Valencia* COBRA_PAR (PAID-05-11-2810) and Open-NUC (PAID-05-12).

Contenido

Capítulo 1 Introducción	33
1.1. Motivación.....	33
1.2. Estado del arte	35
1.3. Objetivos y organización del trabajo	38
Capítulo 2 Bases teóricas y fundamentos físicos	45
2.1. Termohidráulica	45
2.1.1. Ecuaciones generalizadas de conservación del fluido multifásico.	46
2.1.2. Discretización espacio-temporal de las ecuaciones de conservación del fluido.	49
2.1.3. Ecuaciones de cierre.....	62
2.1.4. Solución numérica.	64
2.1.5. Códigos y metodologías.....	72
2.2. Neutrónica	75
2.2.1. Teoría de la difusión neutrónica.....	76
2.2.2. Tipos de problemas aplicados a física de reactor	78
2.2.3. El método de diferencias finitas en malla gruesa (CMFD)	83
2.2.4. Determinación de los factores de acoplamiento nodal – problema bi-nodo	85
2.2.5. Reconstrucción de potencia a nivel de varilla	94
2.2.6. Códigos y metodología	100
2.3. Comportamiento de combustible.....	102
2.3.1. Fenomenología y modelos	102
2.3.2. Códigos y metodología	111
Capítulo 3 Diseño de la plataforma multifísica	115
3.1. Aspectos generales de la plataforma multifísica.....	115
3.1.1. Selección de códigos y acoplamientos	115
3.1.2. Acoplamiento y optimización de los códigos de la plataforma	118
3.2. Acople TH-TH semi-implícito TRACE/CTF.....	119
3.2.1. Los componentes tipo ‘exterior’ de TRACE.....	119
3.2.2. Aplicación de los componentes ‘exterior’ al acople TRACE/CTF	123

3.2.3.	Esquema de acople.....	124
3.2.4.	Comunicación y control de ejecución del código acoplado	126
3.2.5.	Intercambio de información entre códigos	127
3.2.6.	Resolución de las ecuaciones acopladas del fluido	135
3.2.7.	El archivo de acople.....	144
3.2.8.	Otros aspectos destacados.....	146
3.3.	Acople semi-implícito TRACE/CTF por solapamiento de dominios	148
3.4.	Acople TH-NK3D CTF/PARCS.....	149
3.4.1.	Esquema de acople.....	149
3.4.2.	Comunicación y control de ejecución del código acoplado	152
3.4.3.	Modificaciones introducidas en los códigos.....	158
3.4.4.	Otros aspectos destacados.....	158
3.5.	Acople TH-TM CTF/FRAPTRAN	159
3.5.1.	Esquema de acople.....	160
3.5.2.	Comunicación y control de ejecución del código acoplado	162
3.5.3.	Modificaciones introducidas en los códigos.....	166
3.5.4.	Otros aspectos destacados.....	166
3.6.	Paralelización de CTF mediante MPI	167
3.6.1.	Optimización del código secuencial original	169
3.6.2.	Sustitución del solucionador	169
3.6.3.	Paralelización en subdominios axiales.....	174
3.6.4.	Distribución de información durante simulaciones acopladas	178
3.6.5.	Escalabilidad y eficiencia de la paralelización.....	179
3.7.	Plataforma informática: diseño y opciones	180
3.7.1.	Diseño e implementación.....	183
3.7.2.	Capacidades y limitaciones simuladoras.....	186
3.7.3.	Opciones de simulación	189
3.7.4.	Interfaz con el usuario y archivo de entrada.....	189
Capítulo 4 Aplicaciones prácticas y resultados.....		193
4.1.	Aplicaciones a reactores PWR.....	193
4.1.1.	Descripción de los escenarios	193
4.1.2.	Modelos desarrollados	195
4.1.3.	Obtención del estado estacionario previo a los transitorios analizados.....	206

4.1.4.	Resultados del transitorio de inserción de barra de control.....	212
4.1.5.	Resultados del transitorio de inyección de boro.....	222
4.2.	Aplicaciones a reactores BWR.....	225
4.2.1.	Análisis de los transitorios de disparo de turbina de Peach Bottom Unit 2.....	225
4.2.2.	Modelos desarrollados.....	228
4.2.3.	Obtención del estado estacionario previo a los transitorios analizados.....	237
4.2.4.	Resultados de los transitorios de PBTT-2.....	244
Capítulo 5 Conclusiones y líneas futuras.....		261
5.1.	Conclusiones.....	261
5.2.	Líneas futuras.....	264
Capítulo 6 Aportaciones.....		267
6.1.	Principales Aportaciones.....	267
6.1.1.	Publicaciones en revistas indexadas JCR.....	267
6.1.2.	Presentaciones realizadas en congresos internacionales.....	268
6.1.3.	Presentaciones realizadas en congresos nacionales.....	271
6.1.4.	Informes técnicos y contratos de I+d+i con empresas.....	275
Referencias.....		277

Figuras

Figura 2.1 Elemento diferencial de volumen (volumen de control)	46
Figura 2.2 Volumen de control definido en coordenadas cartesianas.....	49
Figura 2.3 Esquema discretización espacial en el eje x.	51
Figura 2.4 Ejemplo de la malla espacial en dirección axial z.	55
Figura 2.5 Esquema general del método SIMPLE.	65
Figura 2.6 Esquema de una malla de dimensiones 2x2x2.	71
Figura 2.7 Esquema de un nodo genérico m en coordenadas cartesianas.	78
Figura 2.8 Forma de los flujos homogéneos y heterogéneos intranodales.....	94
Figura 2.9 Esquema del cálculo del flujo de los puntos esquina.	99
Figura 2.10 Diagrama de flujo habitual para el cálculo del comportamiento del combustible.	104
Figura 2.11 Esquema radial de la distribución de temperaturas en la varilla.....	106
Figura 2.12 Diagrama de flujo habitual para el cálculo de temperaturas en la varilla.	107
Figura 3.1 Esquema de acople entre procesos a través de componentes <i>exterior</i>	120
Figura 3.2 Esquema del código acoplado TRACE/CTF.....	124
Figura 3.3 Dominios simulados por TRACE y CTF para la metodología desarrollada.....	125
Figura 3.4 Esquema de comunicación y resolución del código acoplado TRACE/CTF.	127
Figura 3.5 Esquema del mallado 1:1 entre subdominios de TRACE y CTF.....	136
Figura 3.6 Esquema del mallado 1:16 entre subdominios de TRACE y CTF	137
Figura 3.7 Nodalización TRACE/CTF en el ejemplo de acople desarrollado.	138
Figura 3.8 Esquema del procedimiento de <i>backup</i> del código acoplado.	147
Figura 3.9 Esquema explícito de acople CTF/PARCS.	150
Figura 3.10 Esquema general del código acoplado CTF/PARCSv3.2.....	150

Figura 3.11 Parte I del esquema de comunicación CTF/PARCS.	153
Figura 3.12 Parte II del esquema de comunicación CTF/PARCS.	154
Figura 3.13 Esquema de ejecución PARCS caso 0.	155
Figura 3.14 Esquema de ejecución PARCS caso 1 y 2.	156
Figura 3.15 Esquema de ejecución PARCS caso 3.	157
Figura 3.16 Esquema de ejecución PARCS caso 4.	157
Figura 3.17 Esquema general del código acoplado CTF/FRAPTRAN.	160
Figura 3.18 Esquema explícito de acople CTF/PARCS/FRAPTRAN.	162
Figura 3.19 Parte I del esquema de comunicación CTF/FRAPTRAN.	163
Figura 3.20 Parte II del esquema de comunicación CTF/FRAPTRAN.	164
Figura 3.21 Esquema de ejecución FRAPTRAN caso 0.	165
Figura 3.22 Esquema de ejecución FRAPTRAN caso 1.	166
Figura 3.23 Algoritmo para la selección de paso e tiempo de FRAPTRAN.	167
Figura 3.24 Componentes principales de PETSc.	170
Figura 3.25 Parte paralelizada del esquema de cálculo de CTF.	175
Figura 3.26 Esquema de la paralelización en subdominios de CTF.	177
Figura 3.27 Esquema del código acoplado paralelo.	178
Figura 3.28 FOM código acoplado paralelo CTF/PARCS.	180
Figura 3.29 Diagrama de los códigos englobados en la plataforma multifísica.	181
Figura 3.30 Diagrama de bloques de la plataforma multifísica.	183
Figura 3.31 Esquema del proyecto de compilación de la plataforma multifísica.	184
Figura 3.32 Diagrama de flujos de la plataforma informática.	185
Figura 3.33 Diagrama de flujos ascendentes de los códigos integrados en la plataforma.	187
Figura 3.34 Diagrama de flujos descendentes de los códigos integrados en la plataforma.	188
Figura 4.1 Diagrama SNAP del modelo de TRACE del reactor KWU-Siemens de tres lazos.	196

Figura 4.2 Esquema del modelo de CTF del núcleo del reactor KWU-Siemens a nivel de elemento combustible.	198
Figura 4.3 Esquema del modelo de CTF de los elementos combustibles PWR cargados en el núcleo del reactor KWU-Siemens.	199
Figura 4.4 Malla neutrónica de PARCS para el núcleo del reactor KWU-Siemens.	200
Figura 4.5 Croquis del modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN.	201
Figura 4.6 Diseño de los elementos combustible en el archivo de entrada de TRITON/NEWT (sin barra de control izquierda, con barra de control derecha).	204
Figura 4.7 Distribución de flujos (flujo rápido izquierda y flujo térmico derecha) para el elemento combustible PWR sin barra de control.	204
Figura 4.8 Distribución de flujos (flujo rápido izquierda y flujo térmico derecha) para el elemento combustible PWR con barra de control.	205
Figura 4.9 Mapa radial de quemado medio de varilla (GWD/T) por elemento combustible en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	206
Figura 4.10 Perfil axial de potencia del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	208
Figura 4.11 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	208
Figura 4.12 Evolución de la conductividad del huelgo en función del quemado para la varilla de combustible del núcleo PWR.	210
Figura 4.13 Perfil axial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	211
Figura 4.14 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	211

Figura 4.15 Esquema de las posiciones ocupadas por las barras de control y los detectores <i>PDDs</i> en el núcleo del reactor PWR.	213
Figura 4.16 Secuencia de inserción de las barras de control J03 y N07.	214
Figura 4.17 Evolución de la potencia durante la inserción de la barra de control J03.	214
Figura 4.18 Evolución de la potencia durante la inserción de la barra de control N07.	215
Figura 4.19 Perfil de potencia radial durante la inserción de la barra de control J03.	215
Figura 4.20 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector J6 nivel axial 1 durante la caída de la barra J03.	216
Figura 4.21 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector J6 nivel axial 6 durante la caída de la barra J03.	217
Figura 4.22 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector O09 nivel axial 1 durante la caída de la barra N07.	218
Figura 4.23 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector O09 nivel axial 6 durante la caída de la barra N07.	218
Figura 4.24 Esquema de la localización radial de los detectores <i>excore</i>	219
Figura 4.25 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector <i>excore-1</i> durante la caída de la barra N07.	220
Figura 4.26 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector <i>excore-2</i> durante la caída de la barra N07.	221
Figura 4.27 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector <i>excore-3</i> durante la caída de la barra N07.	221
Figura 4.28 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector <i>excore-4</i> durante la caída de la barra N07.	222
Figura 4.29 Secuencia temporal de la inyección de boro realizada a través del CVCS.	223
Figura 4.30 Evolución temporal de la concentración de boro en la entrada y salida del núcleo.	224

Figura 4.31 Evolución temporal de la potencia total y la concentración de boro media en el núcleo durante el transitorio de inyección de boro.	225
Figura 4.32 Diagrama SNAP del modelo de TRACE del reactor de Peach Bottom Unit 2.....	228
Figura 4.33 Esquema de los tipos de diseño de combustible de Peach Bottom Unit 2.....	229
Figura 4.34 Esquema del modelo de CTF del núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.	230
Figura 4.35 Esquema del modelo de CTF de uno de los elementos combustibles BWR cargados en el núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.	231
Figura 4.36 Malla neutrónica de PARCS para el núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.	232
Figura 4.37 Croquis del modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN.....	233
Figura 4.38 Diseño de los elementos combustible en el archivo de entrada de KENO.	235
Figura 4.39 Distribución de flujos para elemento combustible BWR sin barra de control.....	236
Figura 4.40 Distribución de flujos para elemento combustible BWR con barra de control.....	236
Figura 4.41 Mapa radial de quemado medio de varilla (GWD/TU) por elemento combustible.	237
Figura 4.42 Perfil axial de potencia del estado estacionario de PARCS en PBTT-2.....	240
Figura 4.43 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario de PARCS en PBTT-2.	241
Figura 4.44 Evolución de la conductividad del huelgo en función del quemado para PB-2.....	242
Figura 4.45 Perfil axial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.	243
Figura 4.46 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.....	244
Figura 4.47 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.....	248
Figura 4.48 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.	249
Figura 4.49 Segundo pico de potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.	249
Figura 4.50 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 1 de PBTT-2 ..	250

Figura 4.51 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.....	251
Figura 4.52 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.....	251
Figura 4.53 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.....	252
Figura 4.54 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.....	253
Figura 4.55 Segundo pico de potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.....	254
Figura 4.56 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 2 de PBTT-2 ..	254
Figura 4.57 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.....	255
Figura 4.58 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.....	255
Figura 4.59 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.....	257
Figura 4.60 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.....	257
Figura 4.61 Picos secundarios de potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.....	258
Figura 4.62 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 3 de PBTT-2 ..	258
Figura 4.63 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.....	259
Figura 4.64 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.....	259

Tablas

Tabla 3.1 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iInput</i>	128
Tabla 3.2 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iInit</i>	129
Tabla 3.3 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iOldTime</i>	130
Tabla 3.4 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iControl</i>	132
Tabla 3.5 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iSemiEdg</i>	133
Tabla 3.6 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iSemiSolv</i>	133
Tabla 3.7 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iSemiSave</i>	134
Tabla 3.8 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización <i>iConduct</i>	135
Tabla 3.9 Tiempo total del solucionador lineal en segundos.....	172
Tabla 3.10 Aceleración (S) obtenida con cada combinación solucionador/precondicionador.....	173
Tabla 3.11 Eficiencia (ξ) de la simulación obtenida con cada solucionador/precondicionador.	173
Tabla 3.12 Figuras de mérito de la paralelización realizada.....	179
Tabla 3.13 Listado de instrucciones de la plataforma multifísica.....	190
Tabla 3.14 Ejemplo I de archivo de entrada plataforma multifísica.	190
Tabla 3.15 Ejemplo II de archivo de entrada plataforma multifísica.....	191
Tabla 4.1 Parametrización de las secciones eficaces para el transitorio de inserción de barra.	202
Tabla 4.2 Parametrización de las secciones eficaces para el transitorio de inyección de boro.	203
Tabla 4.3 Resumen de los resultados del estado estacionario de TRACE/CTF en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	207
Tabla 4.4. Resumen de los resultados del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.	209
Tabla 4.5 Resumen de los resultados del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.....	212

Tabla 4.6 Secuencia de inyección de agua borada a 8,000 ppm a través del CVCS.....	223
Tabla 4.7 Parametrización de las secciones eficaces en los transitorios de PBTT-2.....	234
Tabla 4.8 Condiciones iniciales previas al transitorio PBTT-2.....	238
Tabla 4.9 Resumen de los resultados del estado estacionario de TRACE/CTF en PBTT-2.....	239
Tabla 4.10 Resumen de los resultados del estado estacionario de PARCS en PBTT-2.....	240
Tabla 4.11 Resumen de los resultados del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.....	243
Tabla 4.12 Secuencia del cierre de la TSV durante el PBTT-2.....	245
Tabla 4.13 Secuencia de apertura de la válvula de bai pás de la turbina.....	246
Tabla 4.14 Secuencia de inserción del banco de barras tras el SCRAM.....	247
Tabla 4.15 Secuencia de eventos del escenario extremo 1 de PBTT-2.....	247
Tabla 4.16 Secuencia de eventos del escenario extremo 2 de PBTT-2.....	252
Tabla 4.17 Secuencia de eventos del escenario extremo 3 de PBTT-2.....	256

Acrónimos

ANM	Método Analítico Nodal.
AOO	Anticipated Operational Occurrence.
APIs	Application Programming Interfaces.
ASM	Additive Schwarz Method.
ASME	American Society of Mechanical Engineers.
ATWS	Anticipated Transient Without SCRAM.
BE	Best Estimate.
BiCGSTAB	Método del Gradiente Biconjugado Estabilizado.
BOC	Beginning Of Cycle.
BPV	Válvula de baipás de turbina.
BWRs	Reactores de Agua en Ebullición.
CAMP	Code Applications and Maintenance Program.
CASL	Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors.
CDS	Central Difference Scheme.
CE	Comisión Europea.
CEA	Commissariat à l'Énergie Atomique.
CFD	Fluidodinámica Computacional.
CFR	Code of Federal Regulations.
CMFD	Coarse Mesh Finite Difference Method.
CN	Central Nuclear.
CNAT	Centrales Nucleares Almaraz-Trillo.
CNCC	Corrective Nodal Coupling Coefficient.
CPR	Critical Power Ratio.
CR	Control Rod.
CSNI	Committee on the Safety of Nuclear Installations.
CVCS	Control Volume Chemical System.

DC	Certificación de Diseño.
DNBR	Departure of Nucleate Boiling Ratio.
DSIC	Departamento de Sistemas Informáticos y Computación.
ECCS	Emergency Core Cooling System.
ECI	Exterior Communications Interface.
EEUU	Estados Unidos de América.
EPRI	Electric Power Research Institute, Inc.
EPRI	Electric Power Research Institute.
ETF	Especificaciones Técnicas de Funcionamiento.
ETIPs	European Technology and Innovation Platforms.
EURATOM	Comunidad Europea de la Energía Atómica.
FEM	Métodos basados en Elementos Finitos.
FGE	Forward Gaussian Elimination.
FMFD	Fine Mesh Finite Difference Method.
FOM	Figure Of Merite.
FTCS	Forward Time/Central Space method.
FVM	Métodos basados en Volúmenes Finitos.
GAMMA	CSNI Working Group on the Analysis and Management of Accidents.
GDC	General Design Criteria.
GE	General Electric.
GI	General Interface.
GMRES	Método Generalizado de los Residuos Mínimos.
GRS	Gesellschaft für Anlagen-und Reaktorsicherheit.
HFP	Hot Full Power.
HPIS	High Pressure Injection System.
HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf.
HZP	Hot Zero Power.
I+D	Investigación y Desarrollo.
IAEA	International Atomic Energy Agency.

ICE	Implicit Continuous Eulerian.
ILU	Factorización LU incompleta.
ILUT	Factorización LU Incompleta con Truncamiento dual.
INL	Idaho National Laboratory.
INSAG	International Nuclear Safety Group.
IRSN	French Nuclear Safety Institute.
KIT	Karlsruhe Institute of Technology.
LAR	Solicitud de Modificación de Licencia.
LOCA	Loss of Coolant Accident.
LWR	Reactor de Agua Ligera.
MCPR	Minimum Critical Power Ration.
MLHR	Flujo Lineal Máximo de Calor.
MPI	Message Passing Interface.
NEA	Nuclear Energy Agency.
NEM	Método de Expansión Nodal.
NTH3D	Códigos Termohidráulicos con Cinética Tridimensional.
NUGENIA	Nuclear Generation II&III Association.
NULIFE	Nuclear Plant Life Prediction.
NURESIM	European Platform for Nuclear Reactor Simulations.
NURISP	Nuclear Reactor Integrated Simulation Project.
NUSAFE	Nuclear Waste Management and Safety as well as Radiation Research.
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development.
PB-2	Peach Bottom Unit 2.
PBTT-2	Peach Bottom Turbine Trip en la Unit 2.
PCMI	Pellet-Cladding Mechanical Interaction.
PCT	Peak Cladding Temperature.
PDD	Power Density Detector.
PETSc	Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation.
PPR	Pin Power Reconstruction.

PVM	Parallel Virtual Machine.
PWRs	Reactores de Agua a Presión.
QUICK	Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics.
RCS	Reactor Coolant System.
RIA	Reactivity Insertion Accident.
RMSE	Root Mean Square Error.
RPT	Disparo de la bomba de recirculación.
RSICC	Radiation Safety Information Computational Center.
S3	SIMULATE-3.
SALOME	The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation.
SET-Plan	European Strategic Energy Technology Plan.
SETS	Stability Enhancing Two-Step.
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations.
SNETP	Sustainable Nuclear Energy Tehcnology Platform.
SOR	Successive Over Relaxation.
SP3	Aproximación al transporte Simplificada P3.
SPARSKIT	A basic tool-KIT for SPARSe matrix computations.
SRP	Standard Review Plan.
SRV	Válvula de alivio y seguridad.
TSV	Válvula de parada de turbina.
TT	Turbine Trip.
UDS	Upwind Difference Scheme.
UE	Unión Europea.
UPV	Universitat Politècnica de València.
USNRC	United States Nuclear Regulatory Commission.
V&V	Validación y Verificación.
WNA	World Nuclear Association.
1-D	Unidimensional.
2-D	Bidimensional.

3-D Tridimensional.

Nomenclatura

ν	Número medio de neutrones emitidos por fisión (adimensional).
σ	Tensión (kg/s^2).
ρ	Densidad (kg/m^3).
ξ	Eficiencia de una simulación paralela (adimensional).
μ	Viscosidad dinámica (Pa-s).
λ	Recíproco del autovalor de la ecuación estacionaria de la difusión neutrónica.
ε	Deformación (m).
α	Fracción de huecos (adimensional).
w	Componente escalar paralela al eje z de la velocidad (m/s).
v	Componente escalar paralela al eje y de la velocidad (m/s).
u	Componente escalar paralela al eje x de la velocidad (m/s).
t	Tiempo (s).
p	Presión (Pa).
k	Conductividad térmica (J/m-s-K).
g	Aceleración Gravitacional (m/s^2).
c	Velocidad de propagación del sonido en el medio (m/s).
W	Trabajo por Unidad de Volumen (J/m^3).
U	Energía Interna por Unidad de Volumen (J/m^3).
T	Temperatura (K).
S	Aceleración de una simulación paralela (speedup) (adimensional).
R	Constante de los gases ideales (J/mol-K).
Q	Calor por Unidad de Volumen (J/m^3).

N	Número de moles (mol).
A	Área (m ²).
E	Módulo de elasticidad (módulo de Young) (kg/m-s ²).
ΔA	Operador diferencial Laplaciano de la variable A.
ϕ_g	Flujo neutrónico en el grupo de energía g (neutrones/cm ²).
χ_{pg}	Espectro de fisión de los neutrones instantáneos del grupo de energía g.
χ_g	Espectro de fisión de los neutrones del grupo de energía g.
χ_{dgk}	Espectro de fisión de los neutrones diferidos del grupo diferidos k.
σ_k	Tensor de fuerzas volumétricas aplicadas a la fase k de un fluido multifásico (N/m ³).
$\sigma_{i,kk'}$	Fuerza volumétrica de rozamiento interfacial entre las fases k y k' de un fluido multifásico (N/m ³).
$\sigma_{i,kk'}$	Fuerza volumétrica de rozamiento con la pared de la fase k de un fluido multifásico (N/m ³).
ρ_k	Densidad de la fase k de un fluido multifásico (kg/m ³).
λ_k	Constante de desintegración de neutrones diferidos del grupo k (s ⁻¹).
ε_{ax}	Deformación axial (m).
ε_p	Deformación plástica (m).
β_k	Fracción de precursores de neutrones diferidos del grupo k (adimensional).
α_k	Fracción volumétrica de la fase k de un fluido multifásico (adimensional).
α_T	Coefficiente de expansión térmica (m/K).
w_k	Componente escalar paralela al eje z de la velocidad de la fase k (m/s).
v_k	Componente escalar paralela al eje y de la velocidad de la fase k (m/s).
v_g	Velocidad neutrónica media de los neutrones del grupo de energía g (cm/s).
u_k	Componente escalar paralela al eje x de la velocidad de la fase k (m/s).
\vec{r}	Vector posición (m).

q'''_{wk}	Energía transferida por unidad de volumen a través de la pared a la fase k en un fluido multifásico (J/m^3).
q'''_{ik}	Energía transferida por unidad de volumen desde la fase k a las otras fases en un fluido multifásico (J/m^3).
n_D	Densidad de partículas de la fase dispersa D (partículas/ m^3).
\vec{n}	Vector unitario normal a una superficie (m^2).
\dot{m}	Caudal másico (kg/s).
k_{eff}	Constante de multiplicación neutrónica (adimensional).
k_{eff}	Constante de multiplicación neutrónica (adimensional).
V_D	Volumen relativo de la fase dispersa D (adimensional).
\vec{V}	Vector volumen (m^3).
T_f	Temperatura de la pastilla de combustible (K).
M_k	Ecuación de conservación de la masa para la fase k.
E_k	Ecuación de conservación de la energía para la fase k.
D_g	Constante de difusión neutrónica del grupo de energía g (cm^{-1}).
C_p	Capacidad calórica específica (J/kg-K).
C_k	Concentración de precursores de neutrones diferidos del grupo k (neutrones/ cm^3).
A_w	Área de pared de una estructura de calor (m^2).
A^{n+1}	Valor en el paso de tiempo actual de una variable genérica A.
A^n	Valor en el paso de tiempo antiguo de una variable genérica A.
$A_{i,kk'}$	Área interfacial de contacto entre la fase k y la k' de un fluido multifásico (m^2).
\bar{A}	Valor promedio de una variable genérica A.
$ A $	Valor absoluto de una variable genérica A.
\vec{A}	Vector área (m^2).
$\Sigma_{t,g}$	Sección eficaz macroscópica de transporte del grupo de energía g (cm^{-1}).

$\Sigma_{s,g \rightarrow g'}$	Sección eficaz macroscópica de cambio de grupo del grupo de energía g al g' (cm^{-1}).
$\Sigma_{f,g}$	Sección eficaz macroscópica de fisión del grupo de energía g (cm^{-1}).
$\Sigma_{a,g}$	Sección eficaz macroscópica de absorción del grupo de energía g (cm^{-1}).
Γ_k	Masa transferida desde la fase k a otras fases por unidad de volumen en un fluido multifásico (kg/m^3).
J_g	Densidad de corriente neutrónica del grupo de energía g (neutrones/ cm^2).
$h_{w,k}$	Coefficiente de transferencia de calor entre el la pared y la fase k de un fluido multifásico ($\text{J}/\text{m}^2\text{-s-K}$).
$h_{sat,k}$	Entalpía de saturación la fase k de un fluido multifásico (J/kg).
h_k^i	Entalpía de la interfase entre la fase k y las otras fases en un fluido multifásico (J/kg).
h_k	Entalpía de la fase k de un fluido multifásico (J/kg).
$h_{i,kk'}$	Coefficiente de transferencia de calor entre la fase k y la k' de un fluido multifásico ($\text{J}/\text{m}^2\text{-s-K}$).
$\vec{\nabla}A$	Operador diferencial vectorial Gradiente de la variable A.
\vec{v}_k	Vector velocidad de la fase k de un fluido multifásico (m/s).
\bar{q}_k^T	Calor volumétrico disipado por turbulencia dentro de la fase k (J/m^3).
\dot{m}_k	Caudal másico de fase k de un fluido multifásico (kg/s).
\bar{Q}_k	Calor volumétrico transmitido por conducción térmica desde la fase k a otras fases (J/m^3).
\vec{J}_g	Vector densidad de corriente neutrónica del grupo de energía g (neutrones/ cm^2).

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Todas las instituciones internacionales destacan la seguridad como objetivo prioritario para el uso civil de la energía nuclear. Tanto organismos internacionales como la *International Atomic Energy Agency* (IAEA), la *World Nuclear Association* (WNA), la *Nuclear Energy Agency* (NEA), y la *Comunidad Europea de la Energía Atómica* (EURATOM), como los nacionales como la *United States Nuclear Regulatory Commission* (U.S.NRC) o el propio Consejo de Seguridad Nuclear (CSN) en España destacan la seguridad de las instalaciones nucleares como aspecto fundamental para su explotación.

En las *Convention on Nuclear Safety* organizadas por la IAEA en Viena, Austria, la mayor parte de los Estados participantes se comprometieron a aplicar los fundamentos de seguridad plasmados en el documento *Fundamental Safety Principles* (SF-1) [1]. Dichas obligaciones en materia de seguridad abarcan la práctica totalidad de los aspectos a tener en cuenta para la construcción y explotación de las centrales nucleares como son la ubicación, el diseño, la construcción, el funcionamiento, la disponibilidad de recursos financieros y humanos adecuados, la evaluación y verificación de la seguridad, el aseguramiento de la calidad y la preparación para casos de emergencia.

Los objetivos que se persiguen con la aplicación de todas las medidas técnicas y administrativas propuestas en las guías de seguridad, elaboradas por los organismos anteriormente citados, es mantener el núcleo de los reactores subcrítico y refrigerado, el material

radiactivo confinado, y cumplir las exigencias en cuanto a radioprotección. Además, estas premisas se deben cumplir bajo cualquier circunstancia, es decir durante la operación normal, operación en estados anormales y durante situaciones accidentales.

La *Comisión Europea* (CE), en septiembre de 2015, publicó el informe *European Strategic Energy Technology Plan* (SET-Plan), definiendo la nueva estrategia a seguir durante los próximos años en cuanto a innovación e investigación en el campo energético. El objetivo que plantea el SET-Plan es acelerar el desarrollo y despliegue de tecnologías de baja emisión de carbono, con objetivo de garantizar un suministro seguro de energía para la *Unión Europea* (UE) y conseguir una drástica reducción de emisión de gases de efecto invernadero (20 % en 2020 en comparación con los emitidos en 1990).

Junto con el plan estratégico, la CE creó las *European Technology and Innovation Platforms* (ETIPs) para apoyar la implementación conjunta del SET-Plan por todos los países de la UE, industrias, y líneas de investigación. De entre las plataformas creadas, la denominada *Sustainable Nuclear Energy Technology Platform* (SNETP) es la encargada de coordinar los desarrollos de la industria nuclear dentro de la estrategia europea de desarrollo energético.

Antes de profundizar en la perspectiva estratégica de la tecnología nuclear bajo el marco de los objetivos planteados por la CE, cabe apuntar que actualmente la producción nuclear de energía eléctrica representa cerca del 27 % de electricidad generada en la UE con un total de 131 plantas nucleares. Por tanto, debido al alto peso específico en el mercado eléctrico de la eurozona, el principal reto marcado por la CE para la industria nuclear es mantener altos niveles de seguridad y competitividad, lo que requiere un gran programa de investigación y desarrollo (I+D) y su asociada infraestructura de investigación. Los desarrollos tecnológicos deben encaminarse para apoyar la construcción de nuevos reactores de agua ligera (LWR), mientras se promueve la mejora continua de la seguridad y competitividad de la actual generación de reactores. Además, tendrán gran importancia los progresos realizados en la definición de objetivos y retos técnicos encaminados al refuerzo de las salvaguardias de seguridad tras el accidente de Fukushima.

Los retos y objetivos planteados dan lugar a los tres principales pilares estratégicos definidos por la SNETP: mantener la seguridad y competitividad de las tecnologías actuales; desarrollar una nueva generación de reactores más sostenibles; y desarrollar nuevas aplicaciones para la energía nuclear.

Dentro de los aspectos estratégicos de I+D definidos por la SNETP, por afinidad con la temática que se desarrollará en la presente tesis, deben destacarse los englobados en el primer pilar: *mantener la seguridad y competitividad de las tecnologías actuales*. Para abordar estos aspectos la SNETP ha creado NUGENIA (*Nuclear Generation II&III Association*), dedicada a la I+D de las tecnologías de fisión nuclear, centrándose en los reactores de Gen II y III. Dentro del portafolio de proyectos y actividades de I+D impulsadas por NUGENIA cabe destacar las que tienen por objetivo la mejora de los modelos

de fenómenos que tienen lugar en plantas nucleares. Estas actividades han sido impulsadas para demostrar la fiabilidad y previsibilidad de los resultados obtenidos mediante simulación avanzada mediante códigos computacionales en los que interacciona y se acoplan los diferentes procesos físicos. Para ello debe realizarse una validación adecuada y extendida, que cubra las necesidades reales de diseño y evaluaciones de seguridad de las plantas nucleares, y que se apoyen en las bases de datos experimentales y los datos operacionales de los reactores.

Por tanto, queda clara la necesidad de impulsar el desarrollo de plataformas multifísicas de códigos computacionales que engloben los diferentes fenómenos físicos que tienen lugar en los reactores nucleares. Siendo de capital importancia el proceso de validación y verificación (V&V) de estas plataformas informáticas frente los datos experimentales disponibles y a los propios datos operacionales de las plantas nucleares, con anterioridad a considerarse óptimas para abordar análisis de seguridad nuclear aplicado al licenciamiento de las instalaciones.

Otros aspectos que han impulsado el trabajo realizado han sido la concesión de un proyecto del Ministerio de Economía y Competitividad NUC-MULTPHYS (ENE2012-34585) y los proyectos de colaboración interdisciplinar de la Universitat Politècnica de València COBRA_PAR (PAID-05-11-2810) y OpenNUC (PAID-05-12). La financiación obtenida mediante estos proyectos ha permitido el desarrollo de la plataforma informática basada en computación de altas prestaciones, basada en el acople de códigos informáticos estado del arte para simular el comportamiento de los distintos fenómenos físicos que tienen lugar en los reactores nucleares. Los proyectos interdisciplinares abiertos entre nuestro grupo y el Departamento de Sistemas Informáticos y Computación (DSIC) de la Universitat Politècnica de València (UPV) han servido para realizar trabajos colaborativos en cuanto a la paralelización y optimización de los códigos empleados.

Por último, cabe citar el gran interés suscitado en las empresas del sector por el producto final desarrollado en el presente trabajo. Gran parte de los desarrollos aquí presentados han sido adquiridos por empresas del sector, que han financiado la implementación de estos desarrollos en sus versiones propietarias de los códigos. Un ejemplo de ello serían los acoplamientos realizados en la presente tesis, cuya replica en las versiones propietarias de *Iberdrola Generación Nuclear* de dichos códigos ha sido financiada vía contratos.

1.2. Estado del arte

El análisis de seguridad de los LWR requiere un profundo conocimiento de los fenómenos físicos clave que determinan el comportamiento e integridad de todos los sistemas y salvaguardias que los componen. Entre las áreas de ingeniería cuyo conocimiento es necesario para el estudio del comportamiento de los LWR destacan entre otras la mecánica de fluidos (tanto monofásica como multifásica), la neutrónica, la transmisión de calor y la resistencia de materiales.

El conocimiento alcanzado durante las últimas décadas en estos fenómenos ha resaltado la necesidad de analizar de forma conjunta todos los procesos físicos que se producen en un reactor nuclear debido a la fuerte relación de dependencia existente entre ellos. Gracias al análisis conjunto de toda la física se consiguen alcanzar estándares de precisión suficientes para dar credibilidad a la predicción realizada.

Con objeto de analizar el estado y evolución de las variables de interés para la operación de los LWR se han desarrollado, paralelamente a los avances de la tecnología nuclear y la informática, multitud de herramientas informáticas, comúnmente denominadas códigos de simulación numérica, que permiten resolver las ecuaciones de conservación en el dominio que describe el reactor nuclear. No obstante, por su complejidad, para su resolución aún es necesario realizar gran cantidad de simplificaciones en los modelos matemáticos y físicos de dichos códigos.

Existen dos grandes áreas de aplicación de los códigos de simulación en un reactor nuclear: el diseño del núcleo del reactor y gestión del combustible; y el análisis de seguridad de la planta nuclear. Ambos tipos de análisis se basan principalmente en la termohidráulica o mecánica de fluidos calientes, la transmisión de calor y la cinética de reactor o neutrónica, si bien dichas físicas se encuentran íntimamente acopladas a través de la generación de calor y transmisión de energía entre el refrigerante y el combustible nuclear. Por este motivo, los códigos de simulación han evolucionado incluyendo los efectos de realimentación entre las distintas físicas presentes en los análisis nucleares.

Esta evolución en el desarrollo de los códigos de simulación numérica conduce hacia la integración de los mismos en plataformas multifísicas. Dichas plataformas pueden integrar diversos códigos de efectos separados, estudian por separado diferentes fenómenos, realimentados entre ellos a través de condiciones de contorno comunes. La aplicación de este tipo de plataformas al análisis de seguridad en ingeniería nuclear es un tema recurrente de relevante actualidad y una de las líneas de I+D más importantes en los últimos años en el ámbito de la ingeniería nuclear. Dichas herramientas resultan de gran importancia en las plantas actuales (GEN II y III) y en su extensión de vida (NUSAFE/NU-LIFE), así como para los nuevos diseños (GEN IV).

El uso de plataformas multifísicas en las que se simula conjuntamente la termohidráulica y la neutrónica en seguridad nuclear, está avalada por las conclusiones que se extraen tras la publicación del *CSNI Integral Test Facility Validation Matrix for the Assessment of Thermal-Hydraulic codes for LWR LOCA and Transients* [2]. En este documento se indica explícitamente que para obtener resultados adecuados en numerosos transitorios en LWRs es necesario utilizar un modelo cinético neutrónico multidimensional acoplado a un modelo termohidráulico.

Como herramientas de simulación capaces de abordar estos transitorios con la suficiente potencia y de un modo realista se deben utilizar códigos termohidráulicos que posean una cinética tridimensional del núcleo del reactor (códigos NTH3-D, o de estimación óptima). Esta cinética suele corresponder a programas que implementan una resolución

de la ecuación de la difusión en varios grupos de energía (como por ejemplo PARCS o VALKIN), y que resulta válida siempre que el combustible no se encuentre muy quemado o que no sea muy heterogéneo, en cuyo caso será necesario un código que integre la ecuación del transporte de Boltzmann, como TRIVAC/DRAGON [3].

Numerosas publicaciones concluyen que los códigos acoplados NTH3-D, son los únicos [4] que permiten describir de modo práctico, en un tiempo de computación razonable y con precisión, los fenómenos que tienen lugar en el núcleo del reactor y la interacción con el resto de la dinámica de la planta. Además, también se ha demostrado que las técnicas de computación de altas prestaciones pueden proporcionar el grado de desarrollo necesario para hacer posible una disminución sustancial en el tiempo de computación para este tipo de problemas [5].

Existen numerosas iniciativas a nivel internacional de mejora y desarrollo de códigos termohidráulicos, como es el caso de TRACE (*TRAC/RELAP Advanced Computational Engine*) buque insignia de la US NRC para realizar análisis termohidráulicos, con el cual se pretende sustituir a los códigos actuales TRAC/BF1, TRAC/PF1 y RELAP. Mencionar que TRACE incorpora el código de difusión neutrónica 3-D PARCS (*The Purdue Advanced Reactor Core Simulator*), también mantenido por la US NRC, por lo que puede considerarse como una herramienta NTH3-D.

Por otra parte, en la industria nuclear existe un interés creciente en disponer de información detallada de lo que ocurre a nivel elemento de combustible por temas de licenciamiento, lo cual ha llevado a varios grupos de investigación (*Paul Scherrer Institut, Pennsylvania State University, Michigan University, etc.*) a interesarse por el acople de los códigos de planta con los códigos de subcanal o de fluidodinámica computacional (CFD) [6].

En Estados Unidos (EEUU), el consorcio CASL (*Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors*) formado por numerosos Laboratorios Nacionales (Oak Ridge, Idaho, Los Alamos, Sandia, MIT), algunas universidades (Michigan, North Carolina) e incluso algunas empresas como Westinghouse, están desarrollando una plataforma multifísica (VERA) que tiene por objetivo proporcionar capacidades vanguardistas de modelado y simulación para mejorar el rendimiento de los LWR que se encuentran en operación. Las metas a cumplir por todos los desarrollos y códigos de la plataforma son crear un reactor virtual moderno, proporcionar más comprensión de los límites de seguridad mientras se abordan los problemas de operación y diseño, involucrar a toda la comunidad nuclear en la importancia del modelado y la simulación y desarrollar nuevos paradigmas de patrocinio y colaboración multidisciplinar [7].

Igualmente, cabe mencionar aquí los proyectos europeos NURESIM y NURISP, auspiciados por el *Commissariat à l'Énergie Atomique* (CEA) francés, que han desarrollado una plataforma informática, SALOME (*The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation*). SALOME partió con la premisa de facilitar la integración en un

mismo sistema informático de diferentes códigos de simulación: neutrónicos; termohidráulicos; CAD, CFD, etc. Esta plataforma requiere una gran modificación de los códigos (modularidad) y la generación de APIs (*Application Programming Interfaces*) para la integración de los códigos en ella. Estos motivos hacen que no sea factible la integración de códigos de los que no se disponga de las fuentes (códigos *open source*).

En cuanto al desarrollo de plataformas multifísicas para el estudio detallado del comportamiento de los reactores nucleares (planta, componentes, comportamiento térmico, realimentación, etc.), en los últimos años la comunidad internacional ha comenzado a movilizarse en este sentido mediante presentación de numerosas contribuciones en congresos internacionales, y la creación del grupo de expertos *CSNI Working Group on the Analysis and Management of Accidents* (GAMA) a través de la NEA. El objetivo de este grupo es la preparación de un *Benchmark* para determinar las incertidumbres en sistemas LWR y procesos en todos los estados de cálculo. Destacan grupos de investigación involucrados como los del *Paul Scherrer, Technische Universität München, Università di Pisa, Universidad Politécnica de Madrid* y *Commissariat à l'Énergie Atomique*.

1.3. Objetivos y organización del trabajo

El objeto de la presente tesis doctoral es desarrollar una plataforma informática de herramientas termohidráulicas, neutrónicas y termomecánicas, que puedan interactuar entre sí de forma automática. Esta plataforma simula computacionalmente el comportamiento de los reactores nucleares y sus límites de actuación, permitiendo realizar estudios de seguridad en los transitorios y accidentes de reactividad más comunes. Dicha herramienta de cálculo de seguridad nuclear incluye los códigos de última generación (estado de arte), según los estándares de la industria nuclear, para cada una de las físicas que resultan de importancia en este tipo de análisis.

La plataforma está compuesta por algunas de las herramientas de referencia de las distintas disciplinas de la física necesarias para la descripción de los fenómenos clave. En los aspectos termohidráulicos se utiliza el código de sistema TRACE y el código de subcanal COBRA-TF (*Coolant-Boiling in Rod Arrays – Two Fluids*), abreviado como CTF. Para la neutrónica se utiliza el código de difusión tridimensional PARCS. Para abordar los análisis de comportamiento de las varillas de combustible nuclear se utilizan las herramientas informáticas FRAPCON/FRAPTRAN. Todas estas herramientas se encuentran englobadas dentro de una misma plataforma informática que permite la realimentación interna entre ellas durante las simulaciones.

Para conseguir alcanzar el objetivo principal del trabajo, es necesario cumplir una serie de hitos intermedios basados en los acoplamientos y optimizaciones de los códigos que terminarán definiendo la plataforma final. Entre estos hitos u objetivos parciales destacan los distintos acoplamientos entre códigos que se realizarán. Mención especial al desarrollo más importante del presente trabajo, el acoplamiento interno semi-implícito entre los

códigos termohidráulico de sistema TRACE y de subcanal CTF. Destacar también, el acoplamiento interno explícito NTH3-D entre el código de subcanal CTF y el neutrónico PARCS y el acoplamiento explícito entre el propio CTF y el de análisis de comportamiento de combustible FRAPTRAN. Otro hito destacado, es la paralelización y optimización mediante la tecnología *Message Passing Interface* (MPI) del código CTF.

El primer hito que se aborda es el acople semi-implícito entre los códigos termohidráulicos de sistema TRACE y de subcanal CTF. Este acople permite mejorar la capacidad predictiva del código de sistema TRACE en el núcleo del reactor. Las características tridimensionales y el mayor detalle en la representación geométrica de los elementos de combustible, conjuntamente con la utilización de tres campos en la representación del fluido bifásico y algunos modelos físicos avanzados, hacen del código de subcanal el complemento ideal para la representación en detalle del núcleo del reactor. Este acople se ha programado utilizando los componentes de paralelización y comunicación entre procesos que presenta el código TRACE a través de la *Exterior Communications Interface* (ECI). Para este cometido se han tenido que realizar pequeñas modificaciones en el código fuente de TRACE. Ha sido necesaria una sustancial modificación de CTF para programar toda la interfaz de comunicación con TRACE, implementando las ecuaciones semi-implícitas de acople y los términos correctores de presión dentro de su esquema de resolución.

En este acople la representación y simulación de los sistemas de planta se realiza utilizando TRACE. Este moderno código termohidráulico ha sido diseñado para consolidar y extender las capacidades que exigen las normas y estándares estadounidenses sobre códigos termohidráulicos para análisis de seguridad. Es capaz de analizar eventos de pérdida de refrigeración (LOCAs) causados por roturas tanto grandes como pequeñas y analizar transitorios, tanto en reactores de agua a presión como en reactores de agua en ebullición (PWRs y BWRs). Actualmente existe capacidad de modelar fenómenos termohidráulicos tanto de manera unidimensional (1-D) como tridimensional (3-D). Esta herramienta, como se ha mencionado con anterioridad, es la mantenida por US NRC para realizar análisis termohidráulicos.

Con objeto de ampliar el detalle en el análisis termohidráulico del núcleo del reactor y los propios elementos de combustible se selecciona el código de subcanal COBRA-TF para acoplarlo con TRACE. Esta herramienta de simulación termohidráulica está implícitamente diseñada para el análisis en detalle de núcleos de LWR. Utiliza dos fases y tres campos (líquido continuo, gotas de líquido dispersas en ciertos regímenes de ebullición y vapor) como aproximación al fluido bifásico cuyas ecuaciones de conservación se resuelven en una malla ortogonal tridimensional (3-D). El código, originalmente desarrollado por el *Pacific Northwest Laboratory* en los 80 ha sido utilizado y modificado por numerosas instituciones en las últimas décadas.

Con este acople se pretende unir lo mejor de cada código, es decir, en los análisis de sucesos accidentales con importancia sobre la integridad del núcleo, los valores calculados por los códigos de planta se pueden utilizar como condiciones de contorno para el

código de subcanal, el cual puede calcular información de detalle del canal o canales “calientes”, que puede ser utilizada para tomar decisiones junto al sistema de control de la planta, y a la vez para realimentar con valores termohidráulicos más detallados a los códigos de planta.

El segundo de los hitos del presente trabajo consiste en la creación de una nueva herramienta para la simulación de la cinética nuclear mediante el acople de la termohidráulica del núcleo y la cinética del mismo. Para ello se ha optado por la construcción de un código NTH3-D mediante el acople del código termohidráulico anteriormente presentado CTF y el neutrónico PARCS. En dicho acople se ha seguido la lógica del acople explícito interno entre la neutrónica y la termohidráulica. El código PARCS, que se encuentra disponible dentro de los códigos fuente de TRACE, ya que está internamente acoplado con dicho código, ha sido ligeramente modificado para facilitar la comunicación con CTF. Además, se ha programado una completa interfaz de acople en CTF (detallada en el capítulo 3) para facilitar tanto la comunicación como el intercambio de datos entre ambos códigos. Cabe mencionar, que la versión de partida CTF en el presente trabajo carecía de interfaz de acople con códigos neutrónicos, y dicha interfaz ha sido completamente programada por el autor.

El código seleccionado para reproducir el comportamiento cinético del combustible nuclear es el actual código de referencia de la US NRC para la simulación de núcleos, PARCS. Este código es un simulador de la neutrónica en núcleos reactores tridimensional (3-D) que resuelve, tanto en estacionario como en transitorio, la ecuación de la difusión en multigrupos tanto en geometrías rectangulares o hexagonales. Además, este código también cuenta con la posibilidad de realizar cálculos mediante aproximaciones de bajo orden angular a la ecuación del transporte (SP3) y realizar la reconstrucción de potencia a nivel de varilla de combustible a partir de la solución nodal, lo que será interesante para cálculos detallados del comportamiento de elementos combustibles. El código actualmente está siendo desarrollado en el *Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences* de la *University of Michigan*, financiado y mantenido a través de la US NRC.

La plataforma, en cuanto a códigos informáticos y físicas analizadas, se completa con el tercer hito marcado previamente, consistente en el análisis termomecánico de combustible nuclear. Para ello se utilizan los códigos FRAPCON/FRAPTRAN, que proporcionan valores del comportamiento del combustible tanto en casos pseudo-estacionarios (en función del quemado adquirido durante el periodo que permanece el combustible en el núcleo), como durante los análisis transitorios rápidos.

El sistema de códigos FRAPCON/FRAPTRAN se emplea para calcular la respuesta en operación normal (FRAPCON) y en transitorios LOCA (*Loss of Coolant Accident*), ATWS (*Anticipated Transient Without SCRAM*) y RIA (*Reactivity Insertion Accident*) (FRAPTRAN), de las varillas de combustible de los LWRs. Este sistema de códigos calcula la temperatura, presión, deformación y el histórico de fallos de las varillas de combustible en función de la evolución temporal de la potencia y de las condiciones de

contorno del refrigerante, que deben ser proporcionadas por algún código termohidráulico. A su vez, las variables calculadas con FRAPCON/FRAPTRAN pueden utilizarse como variables de entrada en los modelos de control que incorporan los programas termohidráulicos. Estos valores pueden ayudar a complementar la lógica de las diferentes actuaciones automáticas que implementa el sistema de control del código termohidráulico. Por tanto, el acople de códigos termohidráulicos y termomecánicos incrementa la complementariedad de ambos tipos de códigos, lo cual resulta muy beneficioso en cálculos de licencia.

Los valores calculados por estos códigos termomecánicos pueden ser utilizados tanto para calcular parámetros limitantes de seguridad durante transitorios de seguridad nuclear, como para realimentar las estructuras que representan las varillas de combustible en el código termohidráulico con variables calculadas con mayor exactitud. Debido a la importancia que cobra el análisis de los límites térmicos y mecánicos de las varillas de combustible durante la simulación de transitorios, se ha trabajado también en el acople interno del código termohidráulico para análisis de núcleo CTF y el código termomecánico transitorio FRAPTRAN. Para ello se ha realizado un acople interno en el que CTF proporciona de manera precisa las condiciones del fluido que rodea a la varilla de combustible y la potencia lineal previamente calculada por PARCS. Posteriormente FRAPTRAN las utiliza como condición de contorno para el análisis del comportamiento de la varilla de combustible.

Una vez presentados los diferentes códigos y acoples que se han realizado en el presente trabajo, se analiza el alcance de las simulaciones que se pueden efectuar con la plataforma diseñada. Para ello conviene repasar el cometido de los códigos que la componen y los acoples que se han realizado. El código TRACE se utiliza para la simulación de todo el sistema hidráulico y de control de la planta nuclear (circuitos primario y secundario incluyendo la vasija del reactor). El núcleo del reactor se modela con el código de subcanal CTF, dada la mayor capacidad del mismo para representar tridimensionalmente y con alto nivel de detalle a los elementos combustibles. Recordar que ambos códigos se acoplan semi-implícitamente, por lo que se podrán realimentar entre ellos. Para resolver el comportamiento neutrónico del núcleo se utiliza PARCS, que podrá funcionar realimentado con TRACE, con CTF o con ambos al unísono gracias a los acoples creados. El código FRAPCON se emplea para proporcionar inicialización a FRAPTRAN. Este último, calcula de forma fiable los parámetros relativos a la integridad de las varillas, de importancia en los análisis de seguridad nuclear, gracias a las robustas condiciones de contorno que le proporciona CTF a través del acople desarrollado. Con ello se concluye que la plataforma es capaz de simular el comportamiento del reactor abarcando los procesos desde el nivel de sistemas y componentes hasta el nivel de pastilla de combustible gracias a todos los acoples y códigos que incluye.

Resaltar también como meta la paralelización de algunos de los módulos que componen la plataforma. Del análisis de los códigos que la forman y la utilidad de los mismos rápidamente se concluye que el objeto fundamental de dicha paralelización debe ser el

código termohidráulico de subcanal CTF. Por sus características y su misión dentro de la plataforma aquí desarrollado, obviamente CTF es el código que más recursos computacionales requiere. El código es susceptible de paralelización, tanto a nivel de resolución de sistemas de ecuaciones (solucionador), como a nivel geométrico (subdominios). Este es un punto importante e innovador en el trabajo realizado.

Por último, se abordará la integración de los diferentes códigos acoplados en una plataforma común bajo la librería de procesamiento en paralelo MPI. El objetivo final es disponer de una plataforma multifísica en la que el usuario decida qué tipo de análisis desea llevar cabo, y que elija entre las diferentes opciones disponibles anteriormente presentadas. La integración de los diferentes códigos acoplados se realiza mediante una librería de ejecución en paralelo MPI, la cual se encarga de trasvasar la información necesaria entre los diferentes códigos o módulos, de esta forma, los códigos siguen conservando sus capacidades originales, es decir, pueden seguir ejecutándose sin acoplar. Además, siguiendo la línea de automatización, se genera un programa para escribir los ficheros de entrada para los análisis más habituales de forma semiautomática, ganando tiempo y evitando errores de usuario.

Una vez diseñada y ejecutada la plataforma informática, es necesario plantear como objetivo su verificación y validación. Para ello se han programado ejercicios de validación mediante aplicaciones a simulación de reactores tipo PWR y BWR. En las aplicaciones a reactores PWR se simula un transitorio operacional de caída de barra de control que obedece a una prueba real de la planta nuclear sobre la que se pueden utilizar datos experimentales para la validación. Por otra parte, también se simula un transitorio ficticio de inyección de boro en el primario de un reactor PWR. Por otra parte, las validaciones relativas a los reactores BWR se llevarán a cabo simulando los ejercicios propuestos en el *benchmark* internacional del disparo de turbina de *Peach Bottom Unit 2*. Los resultados relativos esta aplicación se intercomparan con los obtenidos por los participantes en dicho *benchmark*.

El presente documento se ha dividido en seis capítulos, incluyendo el presente en el que se realiza una introducción argumentando la motivación que ha llevado al autor a la elaboración del trabajo y los objetivos que se desean alcanzar, y la presentación de las referencias utilizadas durante el desarrollo del trabajo.

El segundo capítulo corresponde a las “bases teóricas y fundamentos físicos”, donde se realiza una detallada presentación de las ecuaciones generales y algunos de los métodos empleados para resolver las distintas físicas acopladas que intervienen en los cálculos de seguridad nuclear.

El tercer capítulo denominado “Diseño de la plataforma multifísica” es probablemente el que más peso tiene respecto a las contribuciones y desarrollos científicos presentados con este trabajo. En este capítulo se aborda la selección de códigos, la incorporación de los mismos en una única plataforma informática, y la realimentación o acople entre ellos para su funcionamiento conjunto en simulaciones multifísicas de seguridad nuclear.

Además, en este capítulo se aborda la aplicación de los estándares de computación de altas prestaciones, mediante algoritmos de computación en paralelo, aplicados a la optimización de la plataforma desarrollada.

El cuarto capítulo titulado “Metodología de análisis de seguridad nuclear” expone la metodología empleada por la plataforma multifísica y la aplicabilidad de la misma a los cálculos de seguridad nuclear de LWRs, haciendo hincapié en la importancia de la correcta descripción de los componentes del reactor en sus diferentes escalas y físicas consideradas para obtener resultados satisfactorios en los análisis de seguridad nuclear.

En el quinto capítulo “Aplicaciones y resultados” se analizan diversas aplicaciones llevadas a cabo en reactores tipo PWR y BWR. En este capítulo se presentan sucesivamente las especificaciones de cada transitorio analizado y los resultados obtenidos.

Por último, en el sexto capítulo se detallan las conclusiones obtenidas como respuesta a los planteamientos y objetivos iniciales. Además, en este capítulo también se establecen las líneas futuras de investigación que sería posible acometer a partir de los resultados de esta tesis. Por último, se enumeran las principales aportaciones en forma de publicaciones científicas derivadas del trabajo de desarrollo de la tesis.

Capítulo 2

Bases teóricas y fundamentos físicos

2.1. Termohidráulica

La termohidráulica es la disciplina de la física encargada del estudio de fluidos en movimiento sometidos a un calentamiento y/o enfriamiento pudiendo llegar experimentar un cambio de fase en su seno. Esta disciplina aúna los principios físicos de la mecánica de fluidos, la termodinámica y la transmisión de calor. El estudio de este tipo de fluidos implica el planteamiento de ecuaciones de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía.

Algunos científicos engloban a la termohidráulica dentro de la propia mecánica de fluidos: “la Mecánica de Fluidos es la rama de la Física que se ocupa del movimiento de los líquidos y gases, tanto en forma homogénea como en forma multifásica, y de los fenómenos de transporte de calor y masa que ocurren en su seno” [8].

En cualquier caso, se puede decir que con Euler (1755) nace la mecánica de fluidos moderna, que postuló las primeras leyes de conservación de la masa y cantidad de movimiento del fluido. Posteriormente, Navier (1823), Saint-Venant (1843) y especialmente Stokes (1845) generalizaron las ecuaciones de Euler añadiendo las fuerzas viscosas. Las ecuaciones que rigen el movimiento del fluido fueron formuladas por Stokes y son comúnmente denominadas como ecuaciones de Navier-Stokes (Ecuación 2.1 y Ecuación 2.2), aplicables a fluidos de densidad ρ y viscosidad μ constantes [9].

$$\nabla v = 0$$

Ecuación 2.1

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + v \nabla v \right) = -\nabla p + \rho g + \mu \Delta v \quad \text{Ecuación 2.2}$$

Si a las ecuaciones de Navier-Stokes se añade la primera ley de la termodinámica, que establece que el cambio de energía interna en un sistema es igual al calor añadido al sistema menos el trabajo realizado por el mismo, como ecuación de conservación de la energía (Ecuación 2.3), se tendrá el sistema de ecuaciones necesarias para estudiar la mecánica de fluidos calientes (termohidráulica).

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial Q}{\partial t} - \frac{\partial W}{\partial t} \quad \text{Ecuación 2.3}$$

2.1.1. Ecuaciones generalizadas de conservación del fluido multifásico.

En este apartado se van a presentar las ecuaciones de conservación para un fluido multifásico formuladas para un elemento diferencial de volumen (volumen de control V) y una fase genérica k . En la Figura 2.1 se presenta un esquema del volumen de control generalizado sobre el cual se van a derivar las ecuaciones de conservación del fluido del presente apartado.

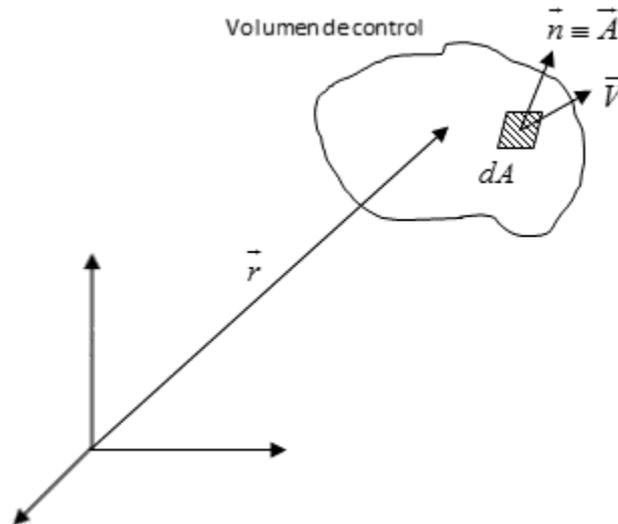


Figura 2.1 Elemento diferencial de volumen (volumen de control).

La ecuación generalizada de conservación de la masa para el volumen de control se puede escribir según la Ecuación 2.4. Donde el primer término de la parte izquierda de la igualdad corresponde con la variación temporal de masa en el volumen de control para la fase k y el segundo término con la variación de masa a través de las caras del volumen de control.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) = \Gamma_k \quad \text{Ecuación 2.4}$$

Donde el término α_k es la fracción volumétrica de la fase k , ρ_k es la densidad volumétrica y \vec{v}_k el vector velocidad de la fase k . El término Γ_k en la parte derecha de la igualdad representa la masa transferida a la fase k desde las otras fases por unidad de volumen. Este intercambio de masa puede deberse a un cambio de fase o a una reacción química y es el primero de los números términos de interacción entre fases que existen. Claramente, como la masa total debe conservarse, se tiene que cumplir la Ecuación 2.5.

$$\sum_k \Gamma_k = 0 \quad \text{Ecuación 2.5}$$

En este punto cabe hacer un inciso, complementariamente a las ecuaciones de conservación de la masa para fases continuas, en ocasiones se formulan ecuaciones de conservación para los constituyentes de fases dispersa, por ejemplo, el número de burbujas, gotas, partículas, gases incondensables, etc. Si no se crean ni destruyen “partículas” de la fase dispersa dentro del elemento diferencial de volumen, y se considera como D al componente disperso del fluido multifásico, el número total de “partículas” dispersas por unidad de volumen se denota como n_D , y \vec{v}_{Di} es la velocidad de la fase dispersa dentro del medio continuo. Siendo la Ecuación 2.6 la *ecuación de conservación del número de partículas*.

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_D) + \nabla(n_D \vec{v}_{Di}) = 0 \quad \text{Ecuación 2.6}$$

Cabe notar, que generalmente no se tiene en cuenta la formulación de ecuaciones de continuidad para fases dispersas. No obstante, dado que pueden existir fases dispersas en los fluidos multifásicos que refrigeran los reactores nucleares en el presente trabajo se presenta dicha formulación. Por último, mencionar que es muy sencillo pasar de notación continua a dispersa, ya que si se denota por V_D a la relación entre el volumen ocupado por una de partículas de la fase dispersa D y el volumen total del volumen de control, se tiene que:

$$\alpha_D = n_D V_D \quad \text{Ecuación 2.7}$$

Continuando con las ecuaciones de conservación para fases continuas, se analizará ahora la *ecuación de conservación de la cantidad de movimiento*, también conocida como ecuación de conservación del momento por su traducción del inglés.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k) + \nabla(\alpha_k \rho_k \vec{v}_k \vec{v}_k) = -\alpha_k \rho_k \vec{g} - \alpha_k \nabla p - \vec{v}_k \Gamma_k + \nabla \sigma_k \quad \text{Ecuación 2.8}$$

El primer término del lado izquierdo de la igualdad representa la variación temporal de cantidad de movimiento en la fase k , el segundo término representa la tasa de cambio de cantidad de movimiento a través de la cara del volumen de control perpendicular al vector velocidad \vec{v}_k . En el lado derecho de la igualdad se tiene las fuerzas a las que está

sujeto el volumen de control: el primer término representa las fuerzas gravitacionales, el segundo término las fuerzas debidas a la presión, el tercero la cantidad de movimiento producida por intercambio de masa entre las fases y el cuarto las fuerzas viscosas que actúan sobre cada una de las fases del volumen considerado (tensor de fuerzas). Este tensor de fuerzas habitualmente está compuesto por las fuerzas de rozamiento viscoso con la pared, fuerzas de rozamiento viscoso entre las distintas fases, fuerzas de origen turbulento y fuerzas debidas al cambio de fase. Algunos de los términos de este tensor de fuerzas como por la fricción interfacial relaciona todas las fases existentes en el fluido.

Por último, cabe analizar la ecuación de conservación de la energía para fluidos multifásicos. La formulación de la ecuación de la energía, incluso en el caso concreto de fluidos monofásicos, es compleja cuando se consideran procesos de transferencia de energía como la conducción de calor a través del propio fluido y la disipación viscosa de energía. Afortunadamente en la mayoría de situaciones es posible despreciar estos efectos ya que son insignificantes. Una vez apuntada la complejidad, la Ecuación 2.9 representa de forma generalizada la *ecuación de conservación de la energía* para fluidos multifásicos.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k h_k) + \nabla(\alpha_k \rho_k h_k \vec{v}_k) \\ & = -\nabla[\alpha_k(\bar{Q}_k + \bar{q}_k^T)] + \Gamma_k h_k^i + q_{wk}'' - p \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} - p \nabla(\alpha_k \vec{v}_k) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.9}$$

Los términos de la parte izquierda de la igualdad representan la variación temporal de la energía de la fase k y el término advectivo, es decir el intercambio de energía de la fase k a través de las caras del volumen de control perpendicular al vector velocidad \vec{v}_k . El primer término de la parte derecha de la igualdad representa la conducción térmica \bar{Q}_k y el flujo de calor disipado por turbulencia \bar{q}_k^T dentro de la propia fase. El segundo término $\Gamma_k h_k^i$ se identifica con la transferencia de energía debido al cambio de fase (otro término que relaciona las distintas fases). El tercer término q_{wk}'' corresponde a la transferencia volumétrica de energía a través de la pared; y el cuarto, y último, es el trabajo virtual debido a la variación del par presión-velocidad.

Esta ecuación generalizada asume que no existe generación de calor dentro del propio fluido (por reacciones químicas), y que la disipación interna es despreciable, pudiendo considerar la presión uniforme en todas las fases.

2.1.2. Discretización espacio-temporal de las ecuaciones de conservación del fluido.

En esta sección se presenta la discretización espacial y temporal de las ecuaciones de conservación generalizadas del fluido multifásico presentadas en el apartado anterior. En este trabajo se opta por la discretización espacial en coordenadas cartesianas utilizando el método de volúmenes finitos. El criterio de signos y nomenclatura del vector velocidad se presentan en volumen de control de la Figura 2.2 definido para geometría cartesiana. No obstante, se puede efectuar con facilidad la discretización en coordenadas cilíndricas aplicando los oportunos cambios de variables.

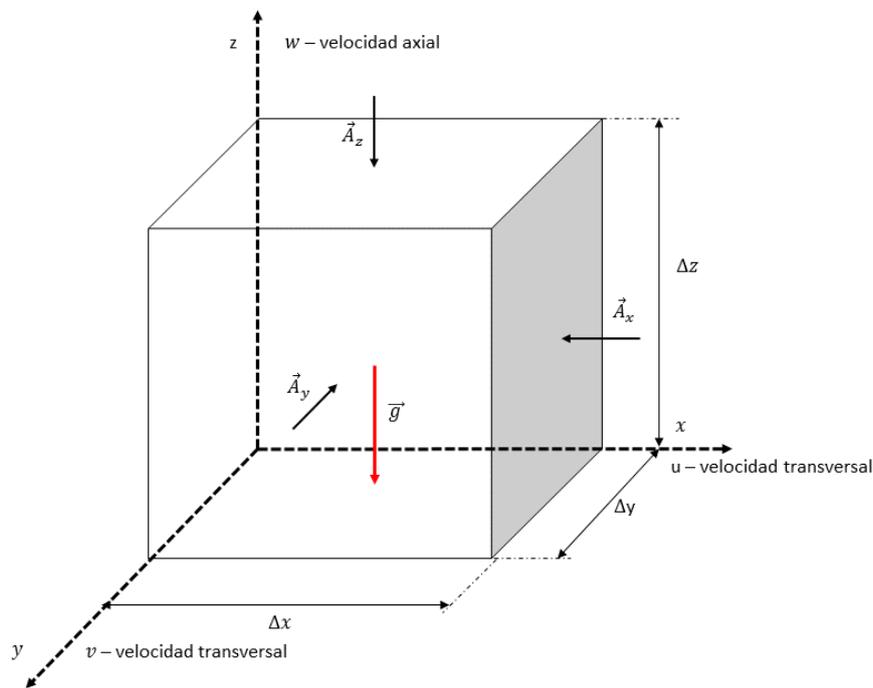


Figura 2.2 Volumen de control definido en coordenadas cartesianas.

Antes de comenzar con la discretización espacio-temporal de las ecuaciones generales del fluido multifásico se adaptan las mismas desarrollando los operadores diferenciales en coordenadas cartesianas. Recordando la definición de operador diferencial vectorial gradiente representado por Nabla $\vec{\nabla}$ en la Ecuación 2.10.

$$\vec{\nabla} = \vec{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{u}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad \text{Ecuación 2.10}$$

Donde \vec{u}_x , \vec{u}_y , y \vec{u}_z son los vectores unitarios en cada una de las componentes cartesianas.

Aplicando los operadores diferenciales a la Ecuación 2.4 se obtiene la *ecuación de conservación de la masa* en coordenadas cartesianas (Ecuación 2.11).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k u_k) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_k \rho_k v_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_k \rho_k w_k) = \Gamma_k \quad \text{Ecuación 2.11}$$

Del mismo modo, si aplicamos el operador diferencial gradiente en coordenadas cartesianas a la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (Ecuación 2.8) se llega a la Ecuación 2.12., que representa la *ecuación tridimensional de conservación de la cantidad de movimiento*.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k u_k) + \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k v_k) + \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k w_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k u_k u_k) \\ & + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_k \rho_k u_k v_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_k \rho_k u_k w_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k v_k u_k) \\ & + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_k \rho_k v_k v_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_k \rho_k v_k w_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k w_k u_k) \\ & + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_k \rho_k w_k v_k) + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_k \rho_k w_k w_k) \\ & = -\alpha_k \rho_k g - \alpha_k \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial z} \right) - \Gamma_k (u_k + v_k + w_k) \\ & + \left(\frac{\partial \sigma_k}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_k}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_k}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.12}$$

Por último, aplicando las derivadas parciales correspondientes a la Ecuación 2.9, se obtiene la *ecuación de conservación de la energía* en coordenadas cartesianas (Ecuación 2.13).

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k h_k) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k h_k u_k) + \frac{\partial}{\partial y}(\alpha_k \rho_k h_k v_k) \\ & + \frac{\partial}{\partial z}(\alpha_k \rho_k h_k w_k) \\ & = \alpha_k \left(\frac{\partial}{\partial x}(\bar{Q}_k + \bar{q}_k^T) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{Q}_k + \bar{q}_k^T) + \frac{\partial}{\partial z}(\bar{Q}_k + \bar{q}_k^T) \right) + \Gamma_k h_k^i \\ & + q_{ik}''' - p \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} - p \alpha_k \left(\frac{\partial u_k}{\partial x} + \frac{\partial v_k}{\partial y} + \frac{\partial w_k}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.13}$$

2.1.2.1 Métodos de discretización espacio-temporal

Llegado a este punto se analiza la discretización espacio-temporal de las ecuaciones de conservación del fluido multifásico. Existen diversos métodos aplicables a la discretización espacio-temporal de las ecuaciones del fluido. En este apartado se presentan de manera breve los métodos disponibles y se justifica la selección realizada en el presente trabajo para continuar con el desarrollo de las ecuaciones de conservación del fluido.

Con lo que respecta a la discretización espacial en volúmenes finitos (las cantidades se promedian en el nodo) de las ecuaciones diferenciales del fluido multifásico existen numerosos métodos en función de las celdas o nodos sobre los que se realiza la derivación de los gradientes y por tanto del orden de aproximación espacial seleccionado. Estos métodos pueden clasificarse básicamente en dos tipos: los métodos basados en esquemas de diferencias centrales (CDS) y los métodos basados en esquemas de *upwind* (UDS). El esquema presentado en la Figura 2.3 sirve como apoyo en la explicación de los métodos de discretización espacial.

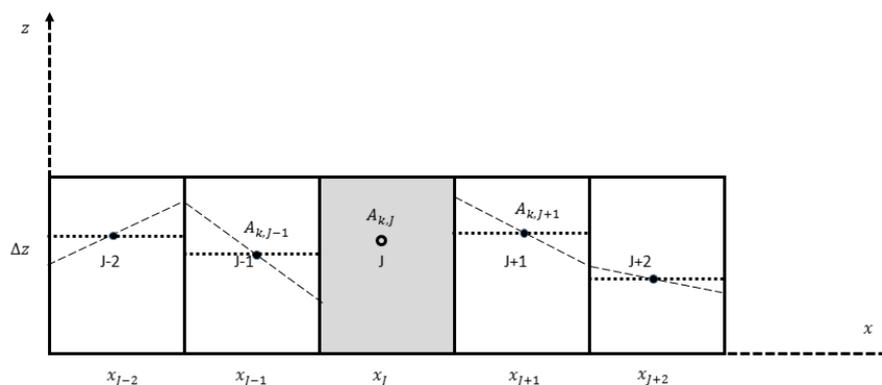


Figura 2.3 Esquema discretización espacial en el eje x.

En los *esquemas de diferencias centrales* el valor de la variable genérica en el nodo J ($A_{k,J}$) se aproxima por interpolación lineal con los valores en los nodos vecinos $J-1$ y $J+1$. Por lo tanto, los valores de la variable $A_{k,J}$ puede escribirse según la Ecuación 2.14.

$$A_{k,J} \approx \varphi_J A_{k,J-1} + (1 - \varphi_J) A_{k,J+1} \quad \text{Ecuación 2.14}$$

Donde φ_J es el factor de interpolación en función de la geometría espacial (Ecuación 2.15).

$$\varphi_J = \frac{x_J - x_{J-1}}{x_{J+1} - x_{J-1}} \quad \text{Ecuación 2.15}$$

Como puede comprobarse con series de Taylor, este método presenta un error de interpolación de segundo orden. Además, utilizando más puntos para calcular la pendiente (centros de nodo), puede aumentarse el orden de la aproximación.

En los *esquemas de diferencias tipo upwind* el valor de la variable genérica A_k es aproximada mediante funciones tipo escalón. Por tanto, el valor de la variable en el nodo J depende de la dirección de la variable transportada. Es decir, si la variable transportada es el flujo másico, el valor de la variable $A_{k,J}$ calculado con el esquema *upwind* viene dado por la Ecuación 2.16.

$$\begin{aligned} A_{k,J} &= A_{k,J-1} \quad , \quad \text{si } \dot{m}_j > 0 \\ A_{k,J} &= A_{k,J+1} \quad , \quad \text{si } \dot{m}_j < 0 \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.16}$$

Utilizando expansiones en series de Taylor es sencillo comprobar que el método UDS, independientemente de la malla, conduce a errores de interpolación de primer orden. Este error está asociado al flujo convectivo y es el causante de la denominada difusión numérica.

Una aproximación *upwind* de alto orden frecuentemente empleada es la aproximación cuadrática, que en la literatura se conoce como el método QUICK (*Quadratic Upwind Interpolation for Convective Kinematics*). En este método se ajusta un polinomio cuadrático a través de los dos puntos vecinos $J-1$ y $J+1$, y un tercer punto, que está situado aguas arriba o aguas abajo ($J-2$ o $J+2$) dependiendo de la dirección de la magnitud transportada. Al evaluar este polinomio en punto central del nodo J se obtiene la aproximación deseada. Este método produce errores de interpolación de tercer orden.

Una vez presentados los distintos métodos existentes para la discretización espacial, se apuntará que en lo sucesivo se utiliza el método *upwind* para el desarrollo de las ecuaciones de conservación del fluido. Este método presenta gran simplicidad de implementación y estabilidad numérica. Por otro lado, como se ha expuesto, el método es de primer orden y presenta como inconvenientes la alta difusión numérica. No obstante, es un método que se suele emplear en la mayor parte de los códigos de simulación termohidráulica aplicados a reactores nucleares.

De forma general, la aproximación realizada a la derivada espacial de una variable genérica A_k en la dirección cualquiera x está representada en la Ecuación 2.17, siendo x el punto central del volumen considerado J y $x \pm \Delta x$ los centros de los volúmenes adyacentes en la dirección considerada.

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_{k,J}}{\partial x} &\approx \frac{A_k^x - A_k^{x+\Delta x}}{\Delta x} \quad , \quad \text{si } \dot{m}_j > 0 \\ \frac{\partial A_{k,J}}{\partial x} &\approx \frac{A_k^x - A_k^{x-\Delta x}}{\Delta x} \quad , \quad \text{si } \dot{m}_j < 0 \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.17}$$

Los esquemas de discretización temporal están directamente conectados con los métodos de discretización espacial. La forma más simple de aproximar la derivada temporal de una variable cualquiera A_k es empleando el esquema directo, o hacia delante, descrito en la Ecuación 2.18 (*forward difference approximation*).

$$\frac{\partial A_k}{\partial t} \approx \frac{A_k^{n+1} - A_k^n}{\Delta t} + O(\Delta t) \quad \text{Ecuación 2.18}$$

Donde el superíndice n representa el paso de tiempo anteriormente calculado para el que ya se conoce el valor de A_k , y el superíndice $n+1$ representa el paso de tiempo para el que actualmente se está calculando la variable genérica A_k . El término $O(\Delta t)$ representa el error de primer orden cometido en esta aproximación a la derivada temporal.

Los esquemas de discretización espacio-temporal empleados para discretizar ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, como las que describen el comportamiento del fluido, se pueden clasificar en métodos explícitos e implícitos. En los *esquemas explícitos* todo el cálculo se realiza a tiempo pasado (subíndice n). Por el contrario, en los *esquemas implícitos* las ecuaciones diferenciales se resuelven utilizando las variables en tiempo actual (subíndice $n+1$).

La mayor parte de los esquemas completamente explícitos son numéricamente inestables y presentan gran difusividad numérica debido a que todos los cálculos se realizan utilizando variables dependientes del tiempo anterior. Por el contrario, este tipo de esquemas presenta mejor convergencia respecto a los implícitos. Como ejemplos de los métodos explícitos se puede mencionar el método temporalmente directo y de diferencias centrales en el espacio (*Forward Time/Central Space method (FTCS)*), o el método de Richardson.

Los esquemas completamente implícitos son numéricamente estables (condicional o incondicionalmente), pero presentan problemas de convergencia siendo difíciles de resolver y requiriendo más tiempo de computación para cada paso de tiempo. Por el contrario, al ser estables, se pueden adoptar pasos de tiempo de mayor tamaño que los métodos explícitos. Como ejemplos de los métodos implícitos se puede mencionar el método de Laasonen y el método de Crank-Nicolson.

Para aunar las ventajas de ambos tipos de esquemas, se han desarrollado los *métodos semi-implícitos*. En éste tipo de esquemas los valores de algunas variables se toman en el tiempo anterior y se combinan con otras en las que se utiliza el tiempo nuevo. Este método es uno de los más utilizados en los códigos computacionales termohidráulicos debido a que combinan algunas de las mejores características de ambos métodos, buena convergencia y niveles aceptables de difusión y estabilidad numérica. Por los motivos anteriormente expuestos, en este trabajo se desarrollan las ecuaciones de conservación del fluido multifásico utilizando el método semi-implícito para la discretización espacio-temporal.

Para fluidos incompresibles y Eulerianos, la mayoría de los métodos numéricos empleados por los códigos informáticos están basados en la técnica Euleriana Implícita Continua (*Implicit Continuous Eulerian (ICE)*) [10]. Esta técnica está basada en los métodos semi-implícitos y presenta niveles aceptables de difusión numérica. El tamaño del paso de tiempo está restringido por el límite material de Courant, que se basa en la velocidad de propagación de la onda sonora en el medio simulado [11].

2.1.2.2 Aspectos básicos del método semi-implícito empleado

Cuando un flujo de fluido es modelado con un método totalmente explícito, los tamaños de paso de tiempo están restringidos por el Límite de Courant que viene dado por la Ecuación 2.19.

$$\Delta t \leq k \cdot \frac{\Delta x}{|u| + c} \quad \text{Ecuación 2.19}$$

Donde Δx es la longitud característica del elemento de malla, u es la velocidad del fluido, c la velocidad de propagación del sonido en el medio, y el parámetro k es un valor dependiente del método, pero aquí puede tomarse como 1.0. Esta clase simple de métodos es apropiada cuando es importante rastrear los detalles de la propagación de ondas de presión (por ejemplo, ondas de choque). Sin embargo, en la mayoría de los transitorios del reactor, este nivel de detalle no es importante. A lo sumo, deben seguirse las ondas de continuidad (niveles de líquidos en movimiento o frentes de ebullición). Frecuentemente, el transitorio es simplemente una evolución entre estados cuasi-estacionarios.

Por esta razón, tanto el ICE como los métodos semi-implícitos relajan las restricciones explícitas en el tamaño de paso de tiempo evaluando los términos implicados en la propagación de la onda de presión al nuevo tiempo ($n+1$).

Por ello la *ecuación de conservación de la cantidad de movimiento* requiere valores en el paso de tiempo nuevo para el gradiente de presión. Por ejemplo, desarrollando el gradiente en el eje x se obtiene la relación que se presenta en la Ecuación 2.20.

$$\alpha_k \frac{\partial p}{\partial x} = \bar{\alpha}_k^n \left(\frac{p_{x+\Delta x}^{n+1} - p_x^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad \text{Ecuación 2.200}$$

Del mismo modo, también requiere de relajación de las restricciones sobre el tamaño de los pasos de tiempo en las velocidades involucradas en el cálculo del flujo másico y de energía en las ecuaciones de conservación de la masa y la energía respectivamente. Por ello el gradiente de velocidad en el eje x de la *ecuación de conservación de la masa* se escribe según la Ecuación 2.21.

$$\frac{\partial}{\partial x} (\alpha_k \rho_k u_k) = (\bar{\alpha}_k \rho_k)^n \left(\frac{u_{x+\Delta x}^{n+1} - u_x^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad \text{Ecuación 2.21}$$

Y tanto los gradientes de velocidad que aparecen en los términos de la *ecuación de conservación de la energía* se escriben utilizando valores en el tiempo nuevo. Estos términos se presentan respectivamente en las Ecuaciones 2.22 y 2.23 también sobre el eje x .

$$\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_k \rho_k h_k u_k) = (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})^n \left(\frac{u_{x+\Delta x}^{n+1} - u_x^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad \text{Ecuación 2.22}$$

$$p \frac{\partial u_k}{\partial x} = p^{n+1} \bar{\alpha}_k^n \left(\frac{u_{x+\Delta x}^{n+1} - u_x^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad \text{Ecuación 2.23}$$

Una vez presentados todos los aspectos necesarios para realizar la discretización espacio-temporal de las ecuaciones del fluido multifásico, empleando técnicas semi-implícitas para la derivada temporal y esquema *upwind* para la discretización espacial, se van a escribir las mismas en forma de volúmenes finitos.

2.1.2.3 Ecuaciones de conservación en volúmenes finitos

De esta forma, utilizando ambas aproximaciones a las derivadas presentadas anteriormente se puede llegar a las ecuaciones de conservación del fluido multifásico en volúmenes finitos descritos mediante coordenadas cartesianas. En la Figura 2.4 se presenta un esquema de la malla utilizada a través de la dirección z . Análogos razonamientos geométricos se realizarían para las direcciones x e y .

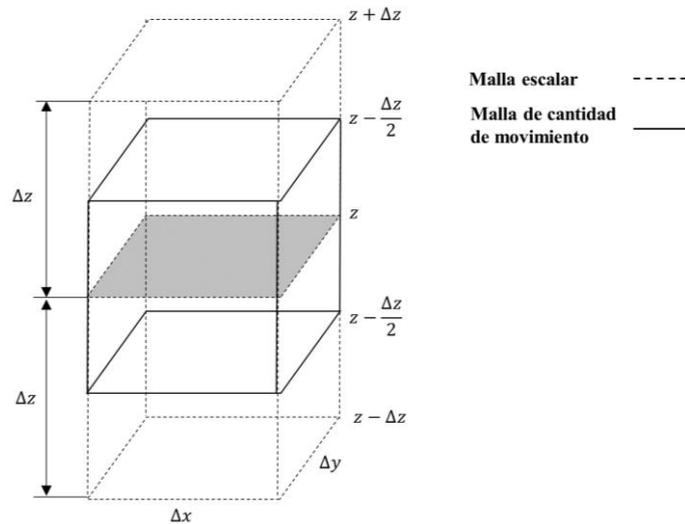


Figura 2.4 Ejemplo de la malla espacial en dirección axial z .

La ecuación de conservación de la masa, en el volumen de control cartesiano V como el presentado en la Figura 2.2, viene dada por la Ecuación 2.24.

$$\begin{aligned}
 & \frac{(\alpha_k \rho_k)_V^{n+1} - (\alpha_k \rho_k)_V^n}{\Delta t} \\
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{x+\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k})_x^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^{n+1} \cdot A_{x,c_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{x-\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k})_{x+\Delta x}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^{n+1} \cdot A_{x,c_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right] \\
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{y+\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k})_y^n \cdot v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^{n+1} \cdot A_{y,c_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{y-\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k})_{y+\Delta y}^n \cdot u_{k,y-\frac{\Delta y}{2}}^{n+1} \cdot A_{y,c_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right] \\
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{z+\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k})_z^n \cdot u_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^{n+1} \cdot A_{z,c_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{z-\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k})_{z+\Delta z}^n \cdot u_{k,z-\frac{\Delta z}{2}}^{n+1} \cdot A_{z,c_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right] = \Gamma_k^{n+1}
 \end{aligned}
 \tag{Ecuación 2.24}$$

Comenzando por el primer término de la parte izquierda de la ecuación, el cambio temporal de masa en volumen cualquiera de la malla se representa mediante la diferencia temporal de masas entre el tiempo actual $n+1$ y el tiempo anteriormente calculado n cuyos valores son conocidos.

Los términos advectivos en cada una de las direcciones cartesianas (x , y , z), se representan mediante sumatorios debido a que una celda puede tener múltiples conexiones (nc_x , nc_y , nc_z) con otras adyacentes en cada una de las direcciones consideradas a través de sus caras (c_x , c_y , c_z). El primer sumatorio de cada término representa los caudales de la cara más próxima al origen de coordenadas ($x - \Delta x/2$, $y - \Delta y/2$, $z - \Delta z/2$), al cual se le sustraen los caudales escalares de la cara más alejada del origen de la celda analizada ($x + \Delta x/2$, $y + \Delta y/2$, $z + \Delta z/2$). Por tanto, el criterio utilizado implica que la dirección

positiva para el caudal (y velocidad, por tanto) se define como la que se mueve desde en sentido positivo de los ejes coordenados (saliente por las caras).

El parámetro β que aparece en los términos advectivos indica que el signo de estos términos es dependiente de la dirección de la velocidad. Según el criterio utilizado estos términos serán negativos cuando el vector velocidad sea entrante al volumen de control (sentido contrario al vector área de la cara), y positivos cuando el vector velocidad sea saliente. Por tanto, dicho criterio se define según la Ecuación 2.25.

$$\begin{cases} \beta = 1 & , \text{ si } \frac{\partial u^n}{\partial x} > 0 \\ \beta = 0 & , \text{ si } \frac{\partial u^n}{\partial x} < 0 \end{cases} \quad \text{Ecuación 2.25}$$

Análogamente, los términos diferenciales de ecuación de conservación de la cantidad de movimiento generalizada para el volumen de control cartesiano V (presentado en la Figura 2.2) pueden desarrollarse. En este caso, se opta por dividir la ecuación en sus tres componentes direccionales. La *ecuación de conservación de la cantidad de movimiento sobre la dirección x* viene dada por la Ecuación 2.26.

$$\begin{aligned} & \frac{(\alpha_k \rho_k u_k)_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{n+1} - (\alpha_k \rho_k u_k)_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n}{\Delta t} \\ & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{x+\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right. \\ & \left. - \sum_{c_{x-\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right] \\ & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{y+\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y,c_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right. \\ & \left. - \sum_{c_{y-\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y,c_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right] \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.26}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{z+\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{z,c_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{z-\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{x,c_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right] \\
 & = - \frac{\bar{\alpha}_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n (p_{x+\Delta x}^{n+1} - p_x^{n+1})}{\Delta x} - u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n \Gamma_k^n + \sigma_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^{n+1}
 \end{aligned}$$

El primer término de la parte izquierda de la ecuación representa la variación temporal de la cantidad de movimiento en la dirección x transversal. Este término viene dado por la diferencia temporal de cantidades de movimiento entre el tiempo actual $n+1$ y el tiempo anteriormente calculado n .

Al igual que en la ecuación de la masa, los términos advectivos se representan mediante sumatorios debido a las múltiples conexiones que pueden existir en cada una de las direcciones consideradas (nc_x , nc_y , nc_z). También aparece el parámetro β presentado anteriormente indicando que el signo de los términos de generación de cantidad de movimiento transversal (*eje* x) debido a velocidades axiales (w_k^n) y transversales (u_k^n , v_k^n) en las caras es dependiente de la dirección de la propia velocidad.

En la parte derecha de la igualdad únicamente aparecen las fuerzas debidas a la diferencia de presión transversal, la cantidad de movimiento generada por cambio de fase y las fuerzas viscosas que actúan sobre cada una de las fases en la dirección considerada (tensores de fuerzas en x). El tensor de fuerzas se desarrolla con posterioridad.

Ahora se presenta la *ecuación de conservación de la cantidad de movimiento sobre la dirección* y dada por la Ecuación 2.27.

$$\begin{aligned}
 & \frac{(\alpha_k \rho_k v_k)_{y+\frac{\Delta y}{2}}^{n+1} - (\alpha_k \rho_k v_k)_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n}{\Delta t} \\
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{x+\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{x-\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{Ecuación 2.27}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{y+\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y,c_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{y-\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{x,c_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right] \\
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{z+\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{z,c_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{z-\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k v_k})_{z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{x,c_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right] \\
& = - \frac{\bar{\alpha}_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^n (p_{y+\Delta y}^{n+1} - p_y^{n+1})}{\Delta y} - v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^n \Gamma_k^n + \sigma_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^{n+1}
\end{aligned}$$

Los términos que aparecen tanto en la parte derecha como en la izquierda de la igualdad son análogos a los descritos para la conservación de la cantidad de movimiento sobre la dirección x . Únicamente cambia la dirección considerada.

Por último, se presenta la *ecuación de conservación de la cantidad de movimiento sobre la dirección z* (Ecuación 2.28).

$$\frac{(\alpha_k \rho_k w_k)_{z+\frac{\Delta z}{2}}^{n+1} - (\alpha_k \rho_k w_k)_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n}{\Delta t}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{x+\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{x-\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right]
\end{aligned}$$

Ecuación 2.28

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{y+\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y,c_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{y-\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{x,c_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right] \\
 & + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{z+\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{z,c_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right. \\
 & \left. - \sum_{c_{z-\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k w_k})_{z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{x,c_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right] \\
 & = -(\overline{\alpha_k \rho_k})_{z+\frac{\Delta z}{2}}^{n-1} \cdot \mathbf{g} - \frac{\bar{\alpha}_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^n (p_{z+\Delta z}^{n+1} - p_z^{n+1})}{\Delta z} - w_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^n \Gamma_k^n \\
 & + \sigma_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^{n+1}
 \end{aligned}$$

Los términos que aparecen en la Ecuación 2.28 son análogos a los descritos para la conservación de la cantidad de movimiento sobre las direcciones x e y . Únicamente cambia la dirección considerada, y la presencia del término de fuerza hidrostática.

En el primer término de la parte derecha de la igualdad, asumiendo que el vector gravedad \vec{g} tiene dirección z negativo (ver Figura 2.2), se representa la cantidad de movimiento generada por la fuerza gravitacional sobre el volumen de control V . De nuevo, el último término representa el tensor de fuerzas viscosas. El desarrollo de este tensor de fuerzas se realizará en el apartado de ecuaciones de cierre.

Por último, la *ecuación de conservación de la energía*, en el volumen de control cartesiano V como el presentado en la Figura 2.2, viene dada por la Ecuación 2.29.

$$\begin{aligned}
& \frac{(\alpha_k \rho_k h_k)_V^{n+1} - (\alpha_k \rho_k h_k)_V^n}{\Delta t} \\
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{x+\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^{n+1} \cdot A_{x,c_{x+\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{x-\frac{\Delta x}{2}}=1}^{nc_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^{n+1} \cdot A_{x,c_{x-\frac{\Delta x}{2}}} \right) \right] \\
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{y+\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y+\frac{\Delta y}{2}}^{n+1} \cdot A_{y,c_{y+\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{y-\frac{\Delta y}{2}}=1}^{nc_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k,y-\frac{\Delta y}{2}}^{n+1} \cdot A_{y,c_{y-\frac{\Delta y}{2}}} \right) \right] \\
& + \frac{1}{V} \left[\sum_{c_{z+\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z+\frac{\Delta z}{2}}^{n+1} \cdot A_{z,c_{z+\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right. \\
& \left. - \sum_{c_{z-\frac{\Delta z}{2}}=1}^{nc_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k h_k})_{z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k,z-\frac{\Delta z}{2}}^{n+1} \cdot A_{z,c_{z-\frac{\Delta z}{2}}} \right) \right] \\
& = (\overline{Q}_k + \overline{q}_k^T)_V + \Gamma_k^{n+1} h_{i,k}^n + q_{ik}''^n - p^{n+1} (\overline{\alpha}_k^{n+1} - \overline{\alpha}_k^n) \\
& - p^{n+1} \overline{\alpha}_k^n (u_{x+\Delta x}^{n+1} - u_x^{n+1}) - p^{n+1} \overline{\alpha}_k^n (u_{y+\Delta y}^{n+1} - u_y^{n+1}) \\
& - p^{n+1} \overline{\alpha}_k^n (u_{z+\Delta z}^{n+1} - u_z^{n+1})
\end{aligned}$$

Ecuación 2.29

Los términos de la parte izquierda de la igualdad son equivalentes a los de las ecuaciones de masa y cantidad de movimiento, pero en este caso representan la variación temporal de energía y los términos de transferencia de cantidad de movimiento a través cada una de las caras del volumen de control V .

En la parte derecha de la igualdad se representa la conducción térmica \overline{Q}_k y la disipación térmica por turbulencia \overline{q}_k^T que tiene lugar en el volumen de control. Estos dos términos se asumen en esta ocasión como una cantidad promedio en el volumen $(\overline{Q}_k + \overline{q}_k^T)_V$ y se obvian sus dependencias espaciales. Los siguientes términos del lado derecho represen-

tan la transferencia de energía debido al cambio de fase $\Gamma_k h_k^i$ y la transferencia volumétrica de energía a través de la pared q_{ik}'' . Por último, se tienen los términos espaciales de expansión de fase y de trabajo virtual debido a la variación del par velocidad-presión dentro del propio volumen V .

Una vez presentadas las ecuaciones de conservación del fluido multifásico discretizadas en volumen finitos en coordenadas cartesianas, se está en situación de realizar un recuento de ecuaciones e incógnitas para el sistema obtenido. Revisando las variables que son incógnitas en el tiempo actual ($n+1$) se tienen que estas son $\alpha_k, \rho_k, h_k, u_k, v_k, w_k$ y p . Es decir, se tienen $6k + 1$ incógnitas en el sistema. Por otro lado, haciendo recuento de las ecuaciones disponibles se ve claramente que se cuentan con $5k$ ecuaciones (conservación de la masa, conservación de la cantidad de movimiento en cada dirección y conservación de la energía). Como se ha comprobado se tienen más incógnitas que ecuaciones, pero este problema se subsana con las condiciones de contorno del problema analizado.

2.1.3. Ecuaciones de cierre.

Las ecuaciones de conservación del fluido multifásico descritas en el apartado anterior contienen términos de cierre que deben ser calculados con anterioridad a su resolución. Algunos de estos términos permiten relacionar las distintas fases del fluido proporcionando el nexo de unión necesario entre el comportamiento de las diferentes fases que componen el fluido. Estos términos comprenden fenómenos como la transferencia de calor con la pared, la transferencia de calor interfacial, la fricción con la pared, y la fricción interfacial. Sin embargo, todos los términos de cierre son dependientes del comportamiento de las distintas fases del fluido dentro del medio que lo contiene, es decir de los regímenes de flujo y transferencia de calor. Generalmente los códigos termohidráulicos se valen de mapas de regímenes de flujo y transferencia de calor, y las ecuaciones de cierre están definidas en función de cada uno de estos regímenes.

Las ecuaciones de cierre se pueden definir, al igual que la de conservación, de manera implícita, explícita o semi-implícita. En este apartado se definen las relaciones de cierre con distinta formulación en función del fenómeno modelado. Las ecuaciones de cierre aquí presentadas se han discretizado acorde al desarrollo anteriormente presentado.

Comenzando con las *ecuaciones de cierre presentes en la ecuación de conservación de la masa*, se presenta en la Ecuación 2.30 la definición del *coeficiente de transferencia másica* entre fases, suponiendo que todas las fases están en contacto directo a través de la interfase.

$$\Gamma_k^{n+1} = \frac{-\sum_{k=1}^{nk} q_{i,k}^{n+1}}{\sum_{\substack{k'=1 \\ k' \neq k}}^{nk} (h_{sat,k}^{n+1} - h_{sat,k'}^{n+1})} \quad \text{Ecuación 2.30}$$

Donde los *calores volumétricos interfaciales* $q_{i,k}^{n+1}$ vienen dados por la Ecuación 2.31 para cada fase k .

$$q_{i,k}^{n+1} = h_{i,k}^n A_{i,kk'}^n (T_{sat,k}^{n+1} - T_k^{n+1}) \quad \text{Ecuación 2.31}$$

Notar que tanto el coeficiente de transferencia de calor interfacial $h_{i,k}^n$, como el área interfacial $A_{i,kk'}^n$ se calculan referidas al paso de tiempo antiguo n , mientras que las temperaturas se calculan utilizando las presiones del paso de tiempo actual $n+1$.

Continuando con las *ecuaciones de cierre de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento*, se tiene el tensor de fuerzas viscosas presentado en la Ecuación 2.32. Las fuerzas de rozamiento viscoso con la pared y las fuerzas de rozamiento entre fases que completan este tensor se calculan utilizando las velocidades en el paso de tiempo actual.

$$\sigma_{k,V}^{n+1} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}_k \quad \text{Ecuación 2.32}$$

No se entra en detalle en todas las componentes de las fuerzas que componen el tensor. No obstante, a título ilustrativo, la Ecuación 2.33 muestra el cálculo de la *fuerza de rozamiento interfacial* entre la fase k y la k' a lo largo del eje x .

$$\sigma_{xx_{i,kk'}}^{n+1} = k_{i,kk'}^n (u_k^{n+1} - u_{k'}^{n+1}) |u_k^{n+1} - u_{k'}^{n+1}| \quad \text{Ecuación 2.33}$$

Como puede verse en la Ecuación 2.33, el coeficiente de rozamiento viscoso $k_{i,kk'}^n$ se calcula con variables en el paso de tiempo anterior, mientras para el cálculo de las velocidades relativas entre las dos fases se utilizan los nuevos valores de velocidad u_k^{n+1} y $u_{k'}^{n+1}$.

De la misma forma, la Ecuación 2.34 muestra el cálculo de la *fuerza de rozamiento con la pared* de la fase k sobre el eje x . Las fuerzas de rozamiento viscoso con la pared en los otros ejes pueden obtenerse de manera análoga.

$$\sigma_{xx_{w,k}}^{n+1} = k_{w,k}^n u_k^{n+1} |u_k^{n+1}| \quad \text{Ecuación 2.34}$$

En la Ecuación 2.34, el coeficiente de rozamiento viscoso entre la pared y la fase $k_{w,k}^n$, se calcula con variables en el paso de tiempo anterior, mientras para las velocidades se utilizan los valores actuales u_k^{n+1} .

Por último, se presentan las *ecuaciones de cierre presentes en la ecuación de conservación de la energía*. Generalmente los códigos de simulación termohidráulica obvian, como se apuntó anteriormente, el calor generado (o disipado) por conducción térmica y turbulencia $(\bar{Q}_k + \bar{q}_k^T)_V$. Por ello sólo se presentan las ecuaciones de cierre del calor volumétrico aportado (o disipado) a través de la pared en contacto con el fluido. De forma general la Ecuación 2.35 presenta la *ecuación de cierre para la transferencia de calor con la pared*.

$$q_{w,k}^{n+1} = h_{w,k}^n A_w (T_w^{n+1} - T_k^{n+1})$$

Ecuación 2.35

Al igual que para el cálculo de la transferencia de calor interfacial, el coeficiente de transferencia de calor con la pared $h_{w,k}^n$, se calcula referido al paso de tiempo antiguo n , mientras que las temperaturas se calculan utilizando las presiones y condiciones de la pared del paso de tiempo actual $n+1$.

2.1.4. Solución numérica.

El proceso de resolución de las ecuaciones anteriormente presentadas puede analizarse desde dos perspectivas. Desde la primera de ellas, perspectiva generalista, se tiene en cuenta que se está resolviendo una aproximación de las ecuaciones en diferencias parciales del fluido multifásico. En este contexto, el tiempo y la posición son variables independientes, y las propiedades físicas (presión, entalpía, etc.) son las variables dependientes del sistema. Como las condiciones iniciales y de contorno son conocidas, la solución se debe integrar a través del tiempo sobre todo el dominio espacial definido en el problema. El tamaño del paso de tiempo para la integración se selecciona basándose en algoritmos de cierta complejidad y que en método explícitos o semi-implícitos deben cumplir con el *límite material de Courant*. Desde la segunda perspectiva, perspectiva numérica, la solución ignora las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales. Dentro de un paso de tiempo dado, uno o más sistemas de ecuaciones algebraicas deben resolverse para obtener el estado de sistema al final en dicho paso. En este contexto, el tiempo y la posición no son variables independientes, son sólo contribuciones a las constantes dentro de las ecuaciones algebraicas. Las variables independientes para las ecuaciones algebraicas son las variables de estado en el final del paso de tiempo (es decir: velocidad, entalpía, presión y fracción de fase).

Por ser la estrategia seguida por los códigos de simulación termohidráulica que se utilizan en el presente trabajo, este capítulo ignora la forma original de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, y aborda la solución del problema desde la segunda perspectiva planteada, utilizando el desarrollo presentado anteriormente para construir las ecuaciones algebraicas aproximando las derivadas.

2.1.4.1 Método semi-implícito para ecuaciones acopladas por la presión

Uno de los métodos numéricos más utilizados en hidráulica para resolver las ecuaciones de conservación del fluido es el método semi-implícito para ecuaciones acopladas por la presión (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations (SIMPLE)*) [12] [13]. Este método propone las siguientes etapas para resolver el sistema de ecuaciones de conservación del fluido multifásico:

1. Inicializar las presiones con un valor tentativo p^* .
2. Resolver las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento para obtener unos caudales máxicos tentativos para cada fase $\dot{m}_{k,x}^*$, $\dot{m}_{k,y}^*$, y $\dot{m}_{k,z}^*$.

3. Resolver el sistema de ecuaciones de conservación de masa y energía obteniendo las presiones corregidas $p = p^* + \Delta p$.
4. Realizar la corrección del campo de caudales máscicos sustituyendo en la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento las nuevas presiones corregidas $\dot{m}_{k,x}$, $\dot{m}_{k,y}$, y $\dot{m}_{k,z}$
5. Resolver las restantes ecuaciones utilizando los campos de presión y los caudales corregidos.
6. Seleccionar la presión corregida p como nuevo valor tentativo p^* y repetir los pasos hasta alcanzar la convergencia.

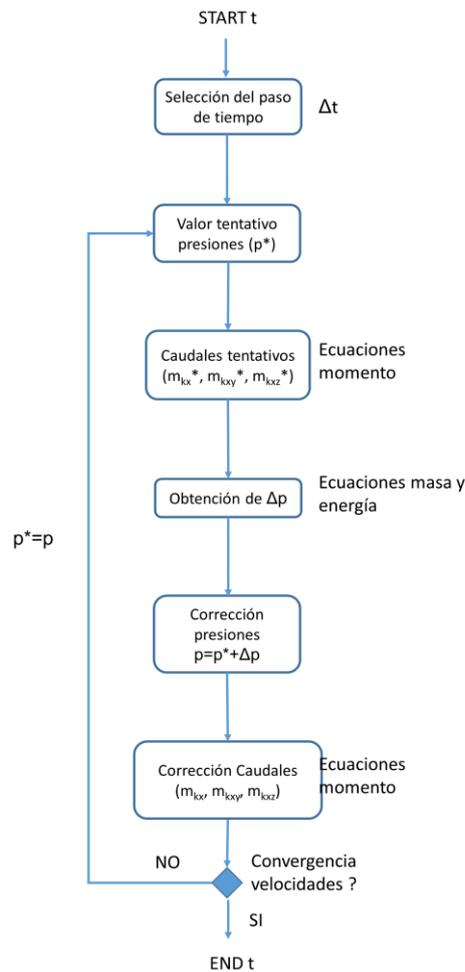


Figura 2.5 Esquema general del método SIMPLE.

Una vez presentado el esquema general del método, se detallarán los pasos seguidos para la resolución de una de las iteraciones (etapa 1 a 5). Mencionar previamente que el esquema general aquí presentado puede variar ligeramente en los diferentes códigos numéricos. Por tanto, es simplemente ilustrativo y no una regla general.

En la etapa 1, se utilizan los valores iniciales A_k^0 de las variables independientes para la resolución del primer paso. En pasos de tiempo siguientes, se utilizan los valores del paso de tiempo anterior A_k^n para resolver el valor nuevo A_k^{n+1} . A partir de estos valores se calcula el campo de presiones p_V^* del dominio teniendo en cuenta las fuerzas hidrodinámicas.

En la etapa 2, se utilizan las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento para, una vez linealizadas, obtener los caudales tentativos en función del campo de presiones inicialmente supuesto p_V^* .

En primer lugar, se despejan los caudales para cada fase k a partir de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (Ecuación 2.36). En este caso se despejan los caudales a partir de la ecuación en el eje x (v_k).

$$\dot{m}_k^* = A_k + B_k \cdot p_V^* + C_{kk} \cdot \dot{m}_k^* + \sum_{k'=1}^{nk'} C_{kk'} \cdot \dot{m}_{k'}^* \quad \text{Ecuación 2.36}$$

Teniendo en cuenta la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento sobre la dirección x dada por la Ecuación 2.26 y que $\dot{m}_k = \alpha_k \rho_k u_k A$, se puede calcular el valor de los coeficientes de la Ecuación 2.36.

En primer lugar se calcula la constante A_k que viene dada por la Ecuación 2.37.

$$A_k = \dot{m}_{k,x}^n - \frac{\Delta t \cdot V}{\Delta x} [\{m_{cuu}\}^n + \{m_{cuv}\}^n + \{m_{cuw}\}^n + \Gamma_k^n u_{k,x}^n] \quad \text{Ecuación 2.37}$$

Los términos $\{m_{cuu}\}^n$, $\{m_{cuv}\}^n$ y $\{m_{cuw}\}^n$ son las cantidades de movimiento netas generadas en el volumen de control V por las velocidades $u_{k,x}^n$, $v_{k,x}^n$ y $w_{k,x}^n$ respectivamente. Es decir, los sumatorios de los términos advectivos de la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en x . Esto se ve reflejado en las Ecuaciones 2.38 a 2.40.

$$\{m_{cuu}\}^n = \frac{1}{V} \left[\sum_{x+\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}}^{nc} \left(\beta (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x+\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c} \right) - \sum_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x-\frac{\Delta x}{2}}^{nc} \left((1-\beta) (\overline{\alpha_k \rho_k u_k})_{x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot u_{k,x-\frac{\Delta x}{2}}^n \cdot A_{x,c} \right) \right] \quad \text{Ecuación 2.38}$$

$$\{mcuv\}^n = \frac{1}{V} \left[\begin{array}{l} \sum_{c, y+\frac{\Delta y}{2}=1}^{nc, y+\frac{\Delta y}{2}} \left(\beta \left(\overline{\alpha_k \rho_k u_k} \right)_{y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k, y+\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y, c, y+\frac{\Delta y}{2}} \right) - \\ \sum_{c, y-\frac{\Delta y}{2}=1}^{nc, y-\frac{\Delta y}{2}} \left((1-\beta) \left(\overline{\alpha_k \rho_k u_k} \right)_{y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot v_{k, y-\frac{\Delta y}{2}}^n \cdot A_{y, c, y-\frac{\Delta y}{2}} \right) \end{array} \right] \quad \text{Ecuación 2.39}$$

$$\{mcuw\}^n = \frac{1}{V} \left[\begin{array}{l} \sum_{c, z+\frac{\Delta z}{2}=1}^{nc, z+\frac{\Delta z}{2}} \left(\beta \left(\overline{\alpha_k \rho_k u_k} \right)_{z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k, z+\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{z, c, z+\frac{\Delta z}{2}} \right) - \\ \sum_{c, z-\frac{\Delta z}{2}=1}^{nc, z-\frac{\Delta z}{2}} \left((1-\beta) \left(\overline{\alpha_k \rho_k u_k} \right)_{z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot w_{k, z-\frac{\Delta z}{2}}^n \cdot A_{z, c, z-\frac{\Delta z}{2}} \right) \end{array} \right] \quad \text{Ecuación 2.40}$$

El término que multiplica a las presiones B_k está representado en la Ecuación 2.41.

$$B_k = -\frac{\Delta t \cdot V}{\Delta x} \left(\frac{\bar{\alpha}_{k,x}^n}{\Delta x} \right) \quad \text{Ecuación 2.41}$$

Mientras que por último, los términos que acompañan a los caudales máscos de las distintas fases C_{kk} y $C_{kk'}$ vienen dados por las Ecuaciones 2.42 y 2.43.

$$C_{k,k} = -\frac{\Delta t \cdot V}{\Delta x} \left(k_{w,k}^n + \sum_{\substack{k'=1 \\ k' \neq k}}^{nk'} k_{i,kk'}^n \right) \quad \text{Ecuación 2.42}$$

$$C_{k,k'} = \frac{\Delta t \cdot V}{\Delta x} \sum_{\substack{k'=1 \\ k' \neq k}}^{nk'} k_{i,kk'}^n \quad \text{Ecuación 2.43}$$

Todo el desarrollo efectuado con la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento en la dirección transversal x puede escribirse en forma matricial para una celda genérica V de la malla que define el dominio simulado (Ecuación 2.44).

$$\begin{bmatrix} C_{1,1} - 1 & C_{1,2} & \cdots & C_{1,nk} \\ C_{2,1} & C_{2,2} - 1 & \cdots & C_{2,nk} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{nk,1} & C_{nk,2} & \cdots & C_{nk,nk} - 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \dot{m}_1^* \\ \dot{m}_2^* \\ \vdots \\ \dot{m}_{nk}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A_1 - B_1 \cdot p_V^* \\ -A_2 - B_2 \cdot p_V^* \\ \vdots \\ -A_{nk} - B_{nk} \cdot p_V^* \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 2.44}$$

Estas ecuaciones forman un sistema lineal que puede resolverse si se conocen los valores de la presión en el volumen de control V . Por tanto, una vez supuestos unos valores iniciales para la presión p_V^* , pueden obtenerse los valores de los caudales máxicos de las distintas fases utilizando métodos numéricos. Sistemas análogos se plantean para las restantes direcciones cartesianas (y , z).

Como la matriz de coeficientes es cuadrada y la dimensión del sistema lineal resultante (Ecuación 2.44) en cada celda es generalmente pequeña ($nk \approx 2 - 3$), el sistema puede resolverse de manera simple utilizando eliminación Gaussiana para obtener el campo de caudales tentativos a partir de las presiones de celda.

En este punto, el campo de presiones inicialmente supuesto se ha empleado para el cálculo de los caudales máxicos tentativos. Sin embargo, es posible que el campo de presiones, calculado utilizando valores iniciales o información del paso de tiempo anterior, no satisfaga las ecuaciones de conservación de la masa y la energía. Por esto, en la etapa 3, se determinan qué ajustes deben realizarse en las variables independientes (si los hay que realizar) para que estas satisfagan las ecuaciones de masa y energía de manera simultánea. Para ello se debe iterar con el nuevo campo de presión aquí calculado y corregir los valores de caudal inicialmente considerados.

En este punto se tiene que las ecuaciones de conservación de masa y energía forman un sistema que debe ser resuelto simultáneamente de forma que todas ellas queden igualadas a cero, y por tanto la masa y la energía se conserve. Continuando con la formulación tridimensional de las ecuaciones de conservación del fluido multifásico, las ecuaciones de conservación de la masa (M_k) y la energía (E_k) pueden expresarse en función de las variables independientes siguiendo la forma presentada en las Ecuaciones 2.45 y 2.46.

$$M_k(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{nk}, \alpha_1 h_1, \alpha_2 h_2, \dots, \alpha_{nk} h_{nk}, p_V, p_{c1}, p_{c2}, \dots, p_{cnc}) = 0 \quad \text{Ecuación 2.45}$$

$$E_k(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{nk}, \alpha_1 h_1, \alpha_2 h_2, \dots, \alpha_{nk} h_{nk}, p_V, p_{c1}, p_{c2}, \dots, p_{cnc}) = 0 \quad \text{Ecuación 2.46}$$

En este punto de la solución, las variables independientes del sistema son las fracciones de fase α_k , la energía transportada por cada fase ($\alpha_k h_k$), la presión del volumen de control V (p_V) y la presión en cada una de las caras del volumen de control considerado (p_{ci}). Siendo en las Ecuaciones 2.45 y 2.46 nk el número de fases y nc el número de caras del volumen del control.

Para ello es necesario linealizar las ecuaciones para cada fase en función de las variables independientes, excepto el campo de velocidades tentativas v_k^* que ya es conocido, y construir la matriz Jacobiana de la celda.

Cabe notar que las ecuaciones no son únicamente función de la presión promedio del volumen de control p_V , sino que también depende de la presión de todas las celdas del mallado que conectan con la celda considerada p_{ci} . Este es el motivo de que se deba

obtener una solución simultánea sobre todas las celdas que componen el dominio simulado.

Llegados a este punto se adopta la forma vectorial del sistema de ecuaciones de masa y energía para cada fase cuya forma se ha presentado mediante las Ecuaciones 2.45 y 2.46. En la Ecuación 2.47, \vec{f} es un vector que representa las ecuaciones de masa y energía para la nk fases del fluido, el cual es función de las variables independientes del sistema que están representadas por el vector \vec{x} .

$$\vec{f}(\vec{x}) = \vec{0} \quad \text{Ecuación 2.47}$$

Assumiendo que todas las ecuaciones de conservación se satisfacen, estas deben de ser igual al vector nulo. Como puede desprenderse del sistema vectorial de la Ecuación 2.47, en este caso se está ante un problema de autovalores (valores propios). Por este motivo, el sistema completo de las ecuaciones de masa y energía puede resolverse utilizando cualquiera de los métodos numéricos disponibles para tales tipos de problemas.

En este caso, a título ilustrativo, se ha decidido utilizar el método iterativo de Newton-Raphson para el cálculo de los autovalores. El método de Newton-Raphson [14] es un método abierto, en el sentido de que no está garantizada su convergencia global. La única manera de alcanzar la convergencia es seleccionar un valor inicial lo suficientemente cercano a la raíz buscada. Así, se ha de comenzar la iteración con un valor razonablemente cercano a la solución, como sucede con los valores calculados a partir de los pasos de tiempo anteriores.

El método iterativo de Newton-Raphson parte de la Ecuación 2.48.

$$\vec{f}(\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}_0) + D\vec{f}(\vec{x}) \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) \quad \text{Ecuación 2.48}$$

Donde $D\vec{f}(\vec{x})$ representa la tasa de cambio en cada una de las funciones con respecto a las variables independientes, es decir las derivadas parciales de las ecuaciones de conservación respecto a cada una de las variables independientes. Este término es comúnmente conocido como Jacobiano (o matriz Jacobiana). El Jacobiano es una matriz formada por las derivadas parciales de primer orden de una función. Una de las aplicaciones más interesantes de esta matriz es la posibilidad de aproximar linealmente a la función en un punto. En este sentido, en el problema analizado el Jacobiano representa la derivada de las funciones multivariable representadas por las ecuaciones de conservación de masa (Ecuación 2.45) y energía (Ecuación 2.46) del fluido multifásico. Matricialmente la matriz Jacobiana del volumen de control V puede representarse por la Ecuación 2.49.

$$Df(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial M_1}{\partial p_V} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c=nc}} \\ \frac{\partial M_2}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial M_2}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial M_2}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial M_2}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial M_2}{\partial p_V} & \frac{\partial M_2}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial M_2}{\partial p_{c=nc}} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial M_{nk}}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial M_{nk}}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial M_{nk}}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial M_{nk}}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial M_{nk}}{\partial p_V} & \frac{\partial M_{nk}}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial M_{nk}}{\partial p_{c=nc}} \\ \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial E_1}{\partial p_V} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c=nc}} \\ \frac{\partial E_2}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial E_2}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial E_2}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial E_2}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial E_2}{\partial p_V} & \frac{\partial E_2}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial E_2}{\partial p_{c=nc}} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial E_{nk}}{\partial \alpha_1} & \dots & \frac{\partial E_{nk}}{\partial \alpha_{nk}} & \frac{\partial E_{nk}}{\partial \alpha_1 h_1} & \dots & \frac{\partial E_{nk}}{\partial \alpha_{nk} h_{nk}} & \frac{\partial E_{nk}}{\partial p_V} & \frac{\partial E_{nk}}{\partial p_{c=1}} & \dots & \frac{\partial E_{nk}}{\partial p_{c=nc}} \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 2.49}$$

Volviendo a la Ecuación 2.49, la matriz Jacobiana $D\vec{f}(\vec{x})$ se multiplica por el cambio en las variables entre dos iteraciones sucesivas ($\vec{x} - \vec{x}_0$) y se suma al valor de la función en la iteración anterior $\vec{f}(\vec{x}_0)$ para obtener los valores de la función en la nueva iteración. Para satisfacer la conservación de la masa y la energía se debe igualar a cero $\vec{f}(\vec{x}) = \vec{0}$. De este modo las incógnitas resultantes representan el cambio en cada variable para que el sistema de ecuaciones alcance una solución simultánea. Por brevedad se denota el cambio en las variables ($\vec{x} - \vec{x}_0$) como $\Delta\vec{x}$. Plasmando todos estos cambios se obtiene la Ecuación 2.50.

$$D\vec{f}(\vec{x}) \cdot \Delta\vec{x} = \vec{f}(\vec{x}_0) \quad \text{Ecuación 2.50}$$

El Jacobiano se calcula tomando la derivada parcial de cada ecuación con respecto a cada variable independiente y posteriormente sustituyendo en las variables del paso de tiempo anterior (o condiciones iniciales en caso del primer paso de tiempo). El término de la parte derecha de la Ecuación 2.50 contiene los términos de las ecuaciones de conservación en el paso de tiempo anterior. Si el perfil de velocidades tentativas previamente calculado por medio de las ecuaciones de cantidad de movimiento es exacto (y no se necesitan correcciones), el término de la parte derecha sería cero. Durante un transitorio, este término no será nulo y se obtendrán algunos valores residuales (residuos).

Las incógnitas del término de corrección $\Delta\vec{x}$ podrían resolverse por eliminación Gaussiana si existen el mismo número de incógnitas y ecuaciones. Sin embargo, la matriz no es cuadrada debido al efecto de la presión en celdas interconectadas, existiendo un número de incógnitas mayor al de ecuaciones para la celda seleccionada. Recordando que la Ecuación 2.50 se plantea para una celda (el volumen de control). Cada celda de la malla que define el dominio simulado tiene su propia matriz Jacobiana y sus propios residuos. Por tanto, el problema se zanja resolviendo al unísono la matriz de presión

formada por el término inferior del Jacobiano reducido y formando la matriz de presiones del sistema.

Para encontrar las ecuaciones algebraicas con las que formar la matriz de presiones, primero el Jacobiano de cada celda debe reducirse. Cabe recordar que la matriz Jacobiana de celda no es cuadrada, ya que tiene dimensiones $(2nk) \cdot (2nk + nc + 1)$. No obstante, pueden emplearse técnica de reducción por bloques (escalones en filas) para encontrar las formas algebraicas deseadas para los términos de presión. Por ejemplo, se puede emplear la técnica de reducción *Forward Gaussian Elimination* (FGE), que resulta válida para la reducción de matrices no cuadradas.

Una vez efectuada la reducción del Jacobiano, se selecciona el término algebraico más simple que permita relacionar la presión en el volumen de control con las presiones en las caras. Para ello se selecciona la última fila del Jacobiano reducido, es decir la que representa las derivadas respecto a las variables independientes de la ecuación de conservación de la energía de la fase nk . Por tanto, para cada elemento de la malla se dispone de una ecuación algebraica análoga a la presentada en la Ecuación 2.51. Esta ecuación relaciona la presión del volumen de control con las presiones de las celdas adyacentes, y se utiliza para confeccionar la matriz de presiones del dominio simulado.

$$dp_V = b_{2nk} + \sum_{c=1}^{nc} a_{2nk,c} \cdot dp_c \quad \text{Ecuación 2.51}$$

A título de ejemplo, para un dominio tridimensional cuya malla sea de dimensiones $2 \times 2 \times 2$ como la que se presenta en la Figura 2.6. La matriz de presiones tendrá la forma presentada en la Ecuación 2.52.

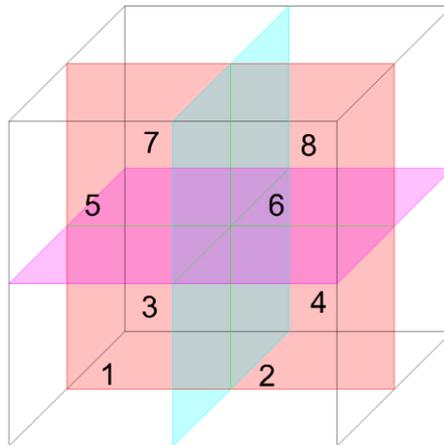


Figura 2.6 Esquema de una malla de dimensiones $2 \times 2 \times 2$.

$$\begin{bmatrix} 1 & -a_{1,2} & -a_{1,3} & 0 & -a_{1,5} & 0 & 0 & 0 \\ -a_{2,1} & 1 & 0 & -a_{2,4} & 0 & -a_{2,6} & 0 & 0 \\ -a_{3,1} & 0 & 1 & -a_{3,4} & 0 & 0 & -a_{3,7} & 0 \\ 0 & -a_{4,2} & -a_{4,3} & 1 & 0 & 0 & 0 & -a_{4,8} \\ -a_{5,1} & 0 & 0 & 0 & 1 & -a_{5,6} & -a_{5,7} & 0 \\ 0 & -a_{6,2} & 0 & 0 & -a_{6,5} & 1 & 0 & -a_{6,8} \\ 0 & 0 & -a_{7,3} & 0 & -a_{7,5} & 0 & 1 & -a_{7,8} \\ 0 & 0 & 0 & -a_{8,4} & 0 & -a_{8,6} & -a_{8,7} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ dp_3 \\ dp_4 \\ dp_5 \\ dp_6 \\ dp_7 \\ dp_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 2.52}$$

Para resolver el sistema lineal formado por la matriz de presiones se debe tener en cuenta que existe una ecuación de corrección de la presión para cada celda en la que se ha subdividido el dominio. Esto implica que la matriz a resolverse puede ser de gran tamaño y presentar gran dispersión. El problema lineal puede resolverse utilizando métodos de inversión directa (por ejemplo, mediante eliminación Gaussiana) o, más apropiado para grandes tamaños y matrices dispersas, utilizando métodos iterativos basados en subespacios de Krylov [15].

Con las correcciones al campo de presiones dp_V calculadas, se está en disposición de pasar a la Etapa 4 en la que se corrigen las velocidades sustituyendo en la Ecuación 2.36 los nuevos valores de presión calculados en las celdas escalares p_V (sustituyendo en la Ecuación 2.51). Además, hay que realizar la sustitución de las presiones para obtener el resto de variables de las ecuaciones de masa y energía a partir de las ecuaciones algebraicas obtenidas a partir de cada una de las filas del Jacobiano reducido.

En la Etapa 5, se resuelven las demás ecuaciones de cierre considerando las variables independientes actuales. Las Etapas 1 a 5 forman un ciclo que se conoce como iteración externa (*outer iteration*). Los códigos de simulación numérica necesitan de un criterio de convergencia que se revisa cada vez que se completa la Etapa 5. Si no se cumple, se repite la iteración actual, pero con un paso de tiempo más pequeño. Si la iteración externa converge, comienza un nuevo paso de tiempo, repitiendo de nuevo las Etapas 1 a 5 y avanzando hasta que la simulación quede completada.

2.1.5. Códigos y metodologías

Existe gran variedad de códigos termohidráulicos desarrollados para el análisis de los sistemas de refrigeración de los reactores nucleares desde el origen de los mismos. Dependiendo del alcance del código se suele hacer una subdivisión de este tipo de códigos entre códigos diseñados para el análisis de los sistemas del reactor (códigos de planta) y códigos de análisis de núcleos o elementos de combustible (códigos de subcanal).

2.1.5.1 Códigos termohidráulicos de planta.

Históricamente se han desarrollado multitud de códigos numéricos de planta, también llamados códigos de sistema, para analizar el comportamiento termohidráulico de los sistemas de refrigeración de los reactores nucleares. Estos códigos han ido evolucionando de la mano de los avances en la tecnología informática y nuclear hasta ser capaces de modelar con gran nivel de fiabilidad todos los sistemas mecánicos y de control presentes en las instalaciones nucleares de la generación actual. Además, gracias a la gran labor de verificación y validación de fenómenos termohidráulicos llevada a cabo por la industria nuclear han ido experimentando mejoras que hace que los resultados obtenidos sean cada vez más realistas.

A lo largo de los años, algunos de los códigos han quedado obsoletos (o faltos de mantenimiento) o han sido integrados en otros más modernos o con mayores capacidades. Con objeto proporcionar una visión global del desarrollo de este tipo de códigos se comenzará mirando al otro lado del Atlántico.

Auspiciado por el temprano desarrollo de la tecnología nuclear, tanto para uso militar como civil, numerosos Laboratorios Nacionales en los Estados Unidos trabajaron en el desarrollo de códigos termohidráulicos financiados por la US NRC y el propio Departamento de Energía. Por ejemplo, en el *Idaho National Laboratory* (INL) se desarrolló el código RELAP5, que posteriormente se incluyó entre los códigos para análisis de seguridad de la US NRC junto con el TRAC-P y el TRAC-B. Por otro lado, el *Electric Power Research Institute, Inc.* (EPRI) desarrollo los códigos de la familia RETRAN muy utilizados en la industria para el licenciamiento. Actualmente, la mayoría de estos códigos primogénitos siguen utilizándose. El RELAP5 y los TRAC-B/P han sido integrados en el moderno código termohidráulico TRACE cuyo desarrollo sigue estando auspiciado por la US NRC. Además, en el INL se están desarrollando los potentes códigos termohidráulicos RELAP5-3-D y RELAP7 a partir de la base del RELAP5 original. Mientras que la familia del RETRAN evolucionó hasta el actual RETRAN-3-D.

Por otro lado, el desarrollo de códigos termohidráulicos en Europa ha venido siempre de la mano de la potente industria nuclear francesa y alemana. Los máximos exponentes son el código CATHARE para análisis de PWR desarrollado conjuntamente por AREVA, la *French Atomic Energy Commission* (CEA), EDF y el *French Nuclear Safety Institute* (IRSN) y el código ATHLET desarrollado por *Global Research for Safety* (GRS) en Alemania.

Los códigos tradicionales en la industria nuclear, como TRAC-B, RELAP5 o TRACE son básicamente códigos 1-D, salvo componentes especiales en los que aparecen características 3-D un tanto primitivas, en las que haciendo uso de nodos muy grandes se puede tener en cuenta ciertos fenómenos multidimensionales muy básicos. En algunos de estos códigos existen componentes, como los plenos, la vasija, el presionador o el generador de vapor, que son 3-D por naturaleza, y cuya modelización con componentes

1-D siempre conlleva pérdida de información, sobre todo en aquellos en los que el flujo es geoméricamente muy complejo.

En la actualidad, gran parte de los códigos de licencia funcionan con modelos relativamente sencillos, pero muy bien estudiados, que suplen los factores desconocidos y la simplicidad de sus modelos físicos con el uso de grandes márgenes de seguridad. Sin embargo, los organismos reguladores permiten la utilización de los denominados códigos de mejor estimación (*Best Estimate, BE*) junto con la aplicación de las técnicas de análisis de incertidumbres para mejorar el margen operativo de las instalaciones. Estos análisis de mejor estimación cubren la falta de información sobre ciertos fenómenos que ocurren en realidad, aumentando los márgenes que aseguran la integridad de las instalaciones.

Los códigos termohidráulicos para la simulación del comportamiento de una planta nuclear disponen de un amplio conjunto de modelos para simular cada uno de los fenómenos físicos que pueden tener lugar en la misma en función de las condiciones de operación que se quieran simular. Así, cualquier código que pretenda simular el funcionamiento de una planta debe disponer de: un modelo neutrónico y un modelo de transmisión de calor, para dar cuenta de la producción y transporte del calor generado en el núcleo del reactor, un modelo hidrodinámico, modelos de componentes y sistemas de control que describan, de un modo fiable, la fenomenología de los fluidos dentro de un sistema nuclear.

Básicamente, los modelos neutrónicos disponibles en estos códigos pueden ser: de cinética puntual, de cinética 1-D y de cinética 3-D, dependiendo de la geometría utilizada para resolver la ecuación de la difusión neutrónica. En cuanto a los modelos hidrodinámicos, éstos se pueden diferenciar en función de las fases que considera el modelo para simular los fluidos. Básicamente, el sistema de ecuaciones a resolver está formado por la ecuación de conservación de la masa, la de la energía y la de cantidad de movimiento.

Los códigos disponibles por el grupo de investigación son el RELAP5, TRAC-PF1, TRAC-BF1 y TRACE en sus diferentes versiones, los cuales implementan modelos termohidráulicos con ecuaciones de balance de masa, energía y cantidad de movimiento para ambas fases, líquido y vapor, modelos de cinética puntual y 1-D, y pueden ser acoplados a diferentes códigos neutrónicos 3-D. Estos códigos están disponibles gracias a la participación del grupo de investigación, a través del Consejo de Seguridad Nuclear, en el programa CAMP (*Code Applications and Maintenance Program*) promovido por la US NRC para el desarrollo y validación de sus códigos.

2.1.5.2 Códigos termohidráulicos de subcanal.

Los códigos de subcanal podrían considerarse como a medio camino entre los códigos de simulación en fluido dinámica (*Computational Fluid Dynamics (CFDs)*) y los códigos de planta. Sus capacidades de discretización espacial es análoga a los CFDs rudimentarios, utilizando mallas 3-D estructuradas. Estos códigos están muy enfocados al análisis del comportamiento de elementos de combustible, tanto PWR como BWR permitiendo

su modelado a nivel de subcanal, es decir al volumen de refrigerante que rodea a cada una de las varillas de un elemento combustible. Las ventajas de este tipo de códigos es su rapidez comparado con los CFDs, debido principalmente a que no incorporan toda la física de la turbulencia y los modelos bifásicos con que cuenta provienen de modelos 1-D adaptados, y que la aproximación realizada al fluido bifásico es lo suficientemente madura como para simular todos los posibles regímenes de ebullición, cosa que no ocurre con los CFDs actuales.

Gran cantidad de códigos de subcanal actuales derivan de un mismo código original, el COBRA. COBRA es un código desarrollado en los años 60-70 en el *Pacific Northwest Laboratories* para el análisis termohidráulico de los haces de varillas que forman los elementos combustibles. A partir de esta versión primogénita de COBRA se desarrollaron otros códigos de subcanal que se siguen utilizando en la actualidad, la denominada familia de códigos COBRA. Entre todos estos destacan el WCOBRA-TRAC de Westinghouse, el COBRA-TF mantenido actualmente por el *Reactor Dynamics and Fuel Modeling Group* del departamento de energía nuclear de la *North Carolina State University*, el F-COBRA-TF de Areva, el VIPRE desarrollado por la EPRI o el GOTHIC.

Además, en el *Karlsruhe Institute of Technology* (KIT) (Alemania) se ha desarrollado un código de subcanal denominado SUBCHANFLOW que se ha utilizado principalmente para el análisis de combustibles tipo PWR.

El grupo de investigación posee una versión propia de COBRA-TF que parte de la desarrollada en el departamento de mecánica e ingeniería nuclear de la *Pennsylvania State University* (PSU). Esta es la misma versión de partida que la utilizada por el consorcio CASL y que se espera se incorpore al programa CAMP promovido por la NRC.

2.2. Neutrónica

La neutrónica podría tildarse como la disciplina dentro de la física nuclear encargada del estudio de los movimientos e interacciones de los neutrones con la materia. La neutrónica, como disciplina que estudia el movimiento de partículas radiactivas, asienta sus bases en la teoría del transporte desarrollada por Boltzmann.

La neutrónica se utiliza fundamentalmente para determinar el comportamiento de los núcleos de reactores nucleares y en haces de neutrones experimentales, industriales y médicos. La única aplicación de interés en el presente trabajo es la utilización de la neutrónica para el estudio estático y dinámico de los núcleos de reactores nucleares de agua ligera, el cual resulta de vital importancia en numerosos transitorios realizados durante los análisis de seguridad nuclear.

2.2.1. Teoría de la difusión neutrónica.

La teoría de la difusión parte de la aproximación angular P1 a la ecuación del transporte de Boltzmann para neutrones, denominada ecuación de la difusión neutrónica. La utilización de transporte en cálculos dinámicos no se suele utilizar por su extremado coste computacional, mientras que la difusión supone una buena aproximación en el cálculo de núcleo relativamente homogéneos, como el de los LWR. La obtención de la ecuación de la difusión a partir de la del transporte no entra dentro de los objetivos de la tesis, por lo que se ha omitido este desarrollo que puede encontrarse en múltiples referencias [16], [17], [18].

Partiendo de este punto, se presenta la ecuación temporal multigrupo de la difusión neutrónica dada por la Ecuación 2.53 [19].

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d\phi_g(\vec{r}, t)}{dt} = & -\nabla \vec{J}_g(\vec{r}, t) - \\ & \left(\Sigma_{a,g}(\vec{r}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{s,g \rightarrow g'}(\vec{r}, t) \right) \phi_g(\vec{r}, t) + \\ & \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \\ & \chi_g(\vec{r}, t) \left((1 - \beta) \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k(\vec{r}, t) \right) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.53}$$

La ecuación de la concentración los k grupos de precursores de neutrones diferidos se escribe según la Ecuación 2.54.

$$\frac{dC_k(\vec{r}, t)}{dt} = \beta_k \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) - \lambda_k C_k(\vec{r}, t) \quad \text{Ecuación 2.54}$$

Se puede observar que la fuente de neutrones diferidos no es completamente independiente del flujo escalar, y por tanto las ecuaciones precursoras están acopladas a la ecuación de difusión, y deben resolverse simultáneamente.

Las corrientes neutrónicas \vec{J}_g que aparecen en la Ecuación 2.53 se pueden calcular con la ayuda de la Ley de Fick tal y como se muestra en la Ecuación 2.55.

$$\vec{J}_g(\vec{r}, t) = -D_g(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, t) \quad \text{Ecuación 2.55}$$

Donde D_g es la constante de difusión neutrónica.

Existen diversos métodos para resolver la ecuación de la difusión que difieren principalmente en la forma en que se realiza la integración espacial sobre la malla que define el dominio simulado. La integración espacial puede realizarse por métodos de diferencias finitas (FDM), elementos finitos (FEM), volúmenes finitos (FVM) y otros métodos nodales como el método de expansión nodal (NEM), método analítico nodal (ANM), colocación nodal, etc.

Los métodos basados en diferencias finitas generalmente se utilizan con mallas espaciales muy pequeñas (*fine mesh finite difference method* (FMFD)), del orden de 1 cm, para aplicaciones a reactores nucleares. Si bien, en ocasiones resulta interesante su aplicabilidad para mallas rectangulares de mayor tamaño, del orden de la anchura del elemento combustible (*coarse mesh finite difference method* (CMFD)).

Los métodos basados en los elementos finitos (FEM) [20] [21] y en volúmenes finitos (FVM) [19] compiten directamente ya que ambos pueden ser utilizados con gran flexibilidad adaptándose a distintas formas y tamaños de malla. La ventaja principal de estos métodos de integración espacial es que puede ajustarse con precisión a cualquier geometría complicada (flexibilidad geométrica) a costa de incrementar la dimensión del problema.

En cualquier caso, todos los métodos presentados se basan en asumir desarrollos polinomiales de alto orden en la distribución espacial de flujo neutrónico como condición para resolver la ecuación de la difusión. La introducción teórica presentada en este trabajo se centra en los métodos empleados por el código neutrónico utilizado en la plataforma multifísica, PARCS [22]. Este código, emplea como técnica de discretización espacial la formulación CMFD y el método nodal bi-nodo basado en NEM, ANM, o una mezcla de ambos (HYBRID), como se detallará posteriormente.

En primer lugar, se van a detallar los métodos de discretización espacio-temporal de las ecuaciones de balance neutrónico empleados por PARCS. Para la discretización temporal de la ecuación de la dinámica (sistema de Ecuaciones 2.53 y 2.54) se utiliza el método *theta* [23] con transformación exponencial del flujo, para la ecuación temporal de los precursores (Ecuación 2.54) se emplea una técnica de integración analítica de segundo orden. Para la discretización espacial, se emplea un método nodal no lineal, sobre el que se aplican esquemas de diferencias finitas en malla gruesa (CMFD) y los problemas bi-nodales (*two-node problems*) para el cálculo de las corrientes en las interfaces nodales, que deben resolverse repetidamente durante la iteración no lineal de la solución de la malla gruesa. Los métodos nodales no lineales resultan eficientes debido a que presentan bajos requisitos de memoria y existen solucionadores muy eficientes para esquemas CMFD [24] [25]. Para obtener la solución del sistema lineal finalmente obtenido se utilizan métodos basados en subespacios de Krylov.

Los problemas bi-nodales se resuelven para corregir el error de discretización en las corrientes neutrónicas de interface entre nodos (\bar{J}_g) que resulta de aplicar la aproximación de diferencias finitas en una estructura de malla gruesa (continuidad de corrientes). Estos

problemas pueden resolverse utilizando cualquiera de los métodos nodales para la resolución de la ecuación de la difusión, que en PARCS son el NEM [26] y el ANM [27]. Además, existe la posibilidad de utilizar el método híbrido ANM/NEM que proporciona una solución muy robusta al problema de difusión [28].

2.2.2. Tipos de problemas aplicados a física de reactor

Una vez presentados los métodos existentes para resolver la ecuación de la difusión, se pasa a analizar los tipos de problemas aplicados a la física del reactor que pueden resolverse a partir de dicha ecuación. Los dos tipos básicos son el problema de estática del reactor (autovalores) y el problema dinámico. El problema de estática, que implica la resolución estacionaria de la ecuación de la difusión, se utiliza para conocer el estado del núcleo (criticidad, distribución de flujos y potencia) previo al comienzo de un transitorio o de cálculos de quemado. El problema dinámico, resolución de la ecuación temporal de la difusión, se utiliza para la simulación de la dinámica del núcleo del reactor en transitorios generalmente aplicados para el licenciamiento, diseño o análisis.

Antes de analizar los dos tipos de problemas, por simplicidad y brevedad a la hora de presentar los desarrollos, se va reescribir la ecuación de la difusión en notación de operadores, donde en la práctica estos operadores aparecerán como matrices. Además, la ecuación se aplica a un nodo m en geometría cartesiana. En la Figura 2.7 se presenta, como apoyo a los formalismos empleados, un esquema del nodo m .

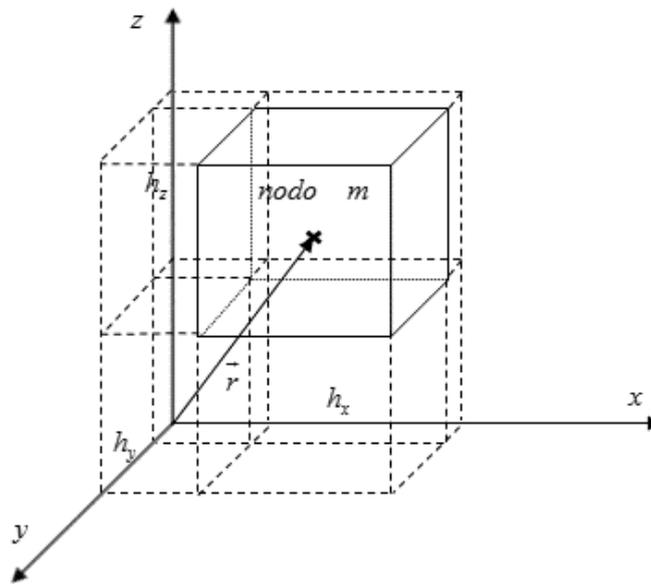


Figura 2.7 Esquema de un nodo genérico m en coordenadas cartesianas.

En la Ecuación 2.56 se presenta una adaptación de la ecuación dinámica de la difusión neutrónica (Ecuación 2.53) aplicada a un nodo genérico m y en la que se han introducido una serie de formalismos para facilitar el desarrollo de los métodos nodales. El comportamiento temporal del flujo neutrónico está gobernado por el sistema de ecuaciones de balance nodal 2.56 y 2.57. El balance nodal está representado en términos de flujo promedio nodal (ϕ_g^m), concentración de precursores de neutrones diferidos (C_k^m), y corrientes netas superficiales ($J_{gu}^{m\pm}$), y otros parámetros cinéticos representados en su notación estándar.

$$\frac{1}{v_g^m} \frac{d\phi_g^m}{dt} = \frac{1}{k_{eff}} \chi_{pg} \sum_{g=1}^G v_{pg} \sum_{fg}^m \phi_g^m + \chi_{dg} \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^m + \sum_{g'=1}^G \sum_{g'g}^m \phi_{g'}^m - \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{h_u^m} (J_{gu}^{m+} - J_{gu}^{m-}) - \sum_{ag}^m \phi_g^m$$

Ecuación 2.56

La variación temporal de precursores de neutrones diferidos está representada por la Ecuación 2.57 para cada grupo k de precursores.

$$\frac{dC_k^m}{dt} = \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^G v_{dkg} \sum_{fg}^m \phi_g^m - \lambda_k C_k^m$$

Ecuación 2.57

En estas ecuaciones los superíndices más y menos (\pm) de las corrientes representan la cara positiva y negativa de las superficies laterales del nodo m en la dirección u (siendo $u=x, y, z$). Los subíndices p y d representan respectivamente los neutrones instantáneos (*prompt*) y diferidos (*delayed*), y G y K representan el número total de grupos de energía de neutrones instantáneos y el número total de grupos de precursores de neutrones diferidos, respectivamente. La k_{eff} se introduce para habilitar que los transitorios no tengan por qué empezar desde un estado crítico. El autovalor se determina durante un cálculo estacionario inicial, y permanece constante durante todo el transitorio.

La Ecuación 2.56 se puede reescribir en notación matricial, para el nodo m , de la forma presentada en la Ecuación 2.58.

$$\frac{1}{v_g^m} \frac{d\phi_g^m}{dt} = (F_p^m - M^m) \phi_g^m + S_d^m$$

Ecuación 2.58

La fuente de neutrones diferidos resultantes de la desintegración de los K grupos de precursores de neutrones diferidos, con constantes de desintegración λ_k , puede escribirse según la Ecuación 2.59.

$$S_d^m = \chi_{dk} \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^m$$

Ecuación 2.59

Donde χ_{dk} es el espectro de emisión de neutrones diferidos y donde la concentración de precursores de neutrones diferidos viene dada por la Ecuación 2.57, presentada con anterioridad.

El operador de neutrones instantáneos, conocido como matriz de fisión, $F_p^m \phi_g^m$ viene presentado en la Ecuación 2.63 y el operador de pérdidas en la Ecuación 2.64.

$$F_p^m \phi_g^m = \chi_{pg} \sum_{g=1}^G \nu_{pg} \sum_{fg}^m \phi_g^m \quad \text{Ecuación 2.60}$$

$$M^m \phi_g^m = \sum_{g'=1}^G \sum_{g'}^m \phi_{g'}^m - \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{h_u^m} (J_{gu}^{m+} - J_{gu}^{m-}) - \sum_{ag}^m \phi_g^m \quad \text{Ecuación 2.61}$$

Por tanto el balance se puede analizar de la siguiente forma: la tasa de cambio del flujo neutrónico escalar en el nodo m , para el grupo de energía g y en ausencia de fuentes externas, es el resultado de la producción de neutrones por fisión (operador de neutrones instantáneos $F_p^m \phi_g^m$ y la fuente de neutrones diferidos S_d^m), menos los neutrones eliminados por absorción, cambio de grupo por dispersión o por fugas a otros puntos del reactor (operador $M^m \phi_g^m$). La presencia del término de fuga en M^m (los términos de corrientes), introduce el acoplamiento espacial entre puntos del reactor y proporciona una distribución continua del flujo.

En lo sucesivo se emplea tanto la notación general, como la matricial en función de lo que resulte más conveniente en función de los desarrollos presentados.

2.2.2.1 El problema estacionario

En un cálculo de estado estacionario, los términos temporales que aparecen en la parte izquierda de la Ecuación 2.58 se anulan y no se necesita hacer distinción entre neutrones instantáneos y diferidos, ya que estos no intervienen ($S_d = 0$). Las ecuaciones de balance neutrónico en estacionario pueden ser derivadas a partir de las transitorias tomando el paso de tiempo y/o la velocidad de los neutrones como infinita. El sistema lineal para el estado estacionario puede por tanto convertirse en un problema de autovalores moviendo el término de fisión al lado derecho de la igualdad e introduciendo un valor propio λ que multiplica el término fuente de fisión. De esta forma, en la Ecuación 2.62 se escribe el sistema lineal matricial para el estado estacionario en la notación habitual para el problema de autovalores.

$$[M] \phi_g = \lambda [F] \phi_g \equiv \frac{1}{k_{eff}} [F] \phi_g \quad \text{Ecuación 2.62}$$

Por tanto, la constante multiplicativa k_{eff} se determina a partir de la solución no trivial del sistema matricial presentado en la Ecuación 2.62.

Este problema de autovalores podría resolverse por multitud de métodos, como por ejemplo utilizando el método de iteración de la fuente de fisión, llamado también método de la potencia, que implica la resolución del problema iterativo presentado en la Ecuación 2.63 y que puede resolverse por métodos iterativos lineales.

$$[M] \phi_g^{n+1} = s^n \equiv \frac{1}{k_{eff}^n} [F] \phi_g^n \quad \text{Ecuación 2.63}$$

Para acelerar este tipo de problemas iterativos, algunos códigos de difusión neutrónica, como el NESTLE, incorporan métodos polinomiales de Chebyshev [29], mientras que otros como PARCS utilizan el método de autovalor desplazado de Wielandt [30]. El método de Wielandt conlleva resolver la Ecuación 2.64 que se obtiene restando una fuente de fisión en ambos lados de la Ecuación 2.63.

$$\left[M - \frac{1}{k_s} F \right] \phi_g = \left(\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_s} \right) [F] \phi_g \quad \text{Ecuación 2.64}$$

La iteración de la fuente de fisión para este caso puede hacerse de la forma expresada en la Ecuación 2.64.

$$\left[M - \frac{1}{k_s^n} F \right] \phi_g^{n+1} = \tilde{s}^n = \left(\frac{1}{k_{eff}^n} - \frac{1}{k_s^n} \right) [F] \phi_g^n \quad \text{Ecuación 2.65}$$

Donde $k_s^n = k_{eff}^n + \delta k$.

2.2.2.2 El problema transitorio

En este apartado se resuelve la ecuación temporal de la difusión a partir de la Ecuación 2.58 definida mediante los operadores matriciales. Por simplicidad, se plantea la solución para dos grupos de energía (neutrones rápidos y térmicos) como se expresa en la Ecuación 2.66.

$$\phi_g = \begin{bmatrix} \phi_1^m \\ \phi_2^m \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{flujo térmico} \\ \text{flujo rápido} \end{array} \quad \text{Ecuación 2.66}$$

Además, se aplican las suposiciones generalmente asumidas en las aproximaciones en dos grupos de energía de la ecuación transitoria de la difusión.

- Todos los neutrones aparecen en el grupo rápido, esto es:

$$\chi_{p1} = \chi_{d1} = 1.0 \quad \chi_{p2} = \chi_{d2} = 0.0$$

- No existe dispersión con ganancia de energía ($\Sigma_{21}^m = 0$).
- No existe dependencia energética de los precursores de neutrones diferidos.
- $\nu_{djk} \Sigma_{fg}^m = \beta_k^m \nu \Sigma_{fg}^m$, $\nu_{pg} \Sigma_{fg}^m = (1 - \beta^m) \nu \Sigma_{fg}^m$ donde $\beta^m = \sum_{k=1}^K \beta_k^m$

Una vez tenidas en cuenta estas consideraciones, se puede plantear el problema dinámico de dos grupos. A partir de las Ecuaciones 2.58 y 2.59, realizando una serie de cambios en la notación, se pueden escribir la Ecuaciones 2.67 y 2.68.

$$\frac{1}{\nu_g^m} \frac{d}{dt} \phi_g^m = R_g^m \equiv \begin{cases} (1 - \beta^m) \psi^m + S_d^m - L_1^m - \Sigma_{a1}^m \phi_1^m, & g = 1 \\ \Sigma_{12}^m \phi_1^m - L_2^m - \Sigma_{a2}^m \phi_2^m, & g = 2 \end{cases} \quad \text{Ecuación 2.67}$$

$$\frac{d}{dt} C_k^m = \beta_k^m \psi^m - \lambda_k C_k^m \quad \text{Ecuación 2.68}$$

En la Ecuación 2.67 $R_g^m \equiv (F_p^m - M^m) \phi_g^m + S_d^m$. El término de fisión total ψ^m , la fuente de neutrones diferidos S_d^m , y los términos de fugas por grupo L_g^m se definen según las Ecuaciones 2.69 a 2.71.

$$\psi^m \equiv \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^2 \nu \Sigma_{fg}^m \phi_g^m \quad \text{Ecuación 2.69}$$

$$S_d^m = \sum_{k=1}^K \lambda_k C_k^m \quad \text{Ecuación 2.70}$$

$$L_g^m \equiv \sum_{u=x,y,z} L_{gu}^m, \quad L_{gu}^m = \frac{1}{h_u^m} (J_{gu}^{m+} - J_{gu}^{m-}) \quad \text{Ecuación 2.71}$$

El problema transitorio se formula a partir de las ecuaciones dinámicas en dos grupos aplicando métodos de discretización temporal. En el caso de PARCS, como se apuntó con anterioridad, se emplea el método *theta* de discretización temporal con una técnica de integración de segundo orden para los precursores. La discretización temporal de la ecuación 2.67, en el instante temporal n , utilizando el método *theta* conduce a la Ecuación 2.72.

$$\frac{\phi_g^{m,n} - \phi_g^{m,n-1}}{\nu_g^m \Delta t_n} = \theta R_g^{m,n} + (1 - \theta) R_g^{m,n-1} \quad \text{Ecuación 2.72}$$

Donde el paso de tiempo empleado es $\Delta t_n = t_n - t_{n-1}$. Por ejemplo, cuando se utiliza $\theta = 0.5$ se está empleando el conocidísimo método de Crank-Nicholson, que presenta

precisión de segundo orden y permite pasos de tiempo suficientemente grandes en la mayoría de cálculos transitorios. Además, en PARCS, como se apuntó con anterioridad, se utiliza la transformación exponencial de flujos para mejorar la exactitud del método *theta*. Esta transformación exponencial de los flujos se representa mediante la Ecuación 2.73.

$$\phi_g^{m,n}(t) = e^{\alpha_g^{m,n} t} \phi_g^m(t), \quad \text{para } t \in [t_{n-1}, t_n] \quad \text{Ecuación 2.73}$$

Donde el flujo transformado $\phi_g^m(t)$ puede ser una función que varíe mucho más lentamente que el flujo original si se selecciona de manera adecuada la constante $\alpha_g^{m,n}$.

2.2.3. El método de diferencias finitas en malla gruesa (CMFD)

En este apartado se describen los aspectos relativos al método CMFD aplicado a la discretización espacial tanto a los problemas de difusión neutrónica estáticos como dinámicos que se han presentado en el apartado anterior. Las ecuaciones de balance neutrónico están acopladas entre los nodos vecinos a través de los términos de fugas L_g^m . Este acoplamiento nodal se resuelve utilizando métodos no lineales en los que las corrientes en la interfase entre dos nodos se representan en términos de los flujos medios de dichos nodos, tal y como se representa en la Ecuación 2.74.

$$J_{gu}^{m+} = D_{gu}^{m+} \phi_g^m - D_{gu}^{m+lu-} \phi_g^{m+lu} \quad \text{Ecuación 2.74}$$

Donde $m+lu$ es el índice del nodo vecino del m en dirección u positiva. En la Ecuación 2.74 D_{gu}^{m+} es el coeficiente correctivo de acople nodal (*Corrective Nodal Coupling Coefficient*, CNCC) que se determina a través de la solución de alto orden. La aproximación generalmente empleada en PARCS para determinar estos coeficientes de acople nodal a partir de la solución local se basa en la teoría generalizada de la equivalencia (Ecuación 2.75).

$$D_{gu}^{m+} = \frac{2\tilde{f}_{gu}^{m+}}{\frac{\tilde{f}_{gu}^{m+} \Delta u_m}{D_{gu}^{m+}} + \frac{\tilde{f}_{gu}^{m+lu-} \Delta u_{m+lu}}{D_{gu}^{m+lu-}}} \quad \text{Ecuación 2.75}$$

Donde \tilde{f}_{gu}^{m+} es el factor de discontinuidad que se define en la Ecuación 2.76 a partir de la corriente J_{gu}^{m+} y el flujo superficial $\widehat{\phi}_{gu}^{m+}$ en la superficie entre el nodo m y $m+lu$ a partir de la solución local de alto orden.

$$\tilde{f}_{gu}^{m+} = \frac{\widehat{\phi}_{gu}^{m+}}{\phi_g^m - \frac{J_{gu}^{m+} \Delta u_m}{2D_{gu}^{m+}}} \quad \text{Ecuación 2.76}$$

En la Ecuación 2.76 D_{gu}^{m+} es el coeficiente de difusión de la cara, el cual se ajusta a partir del coeficiente de difusión del nodo D_g^m para asegurar un valor positivo del factor de discontinuidad \tilde{f}_{gu}^{m+} . Puede deducirse fácilmente que la corriente definida en el coeficiente correctivo de acople nodal definido por las Ecuaciones 2.74, 2.75 y 2.76 es siempre la misma corriente que la obtenida en la solución de alto orden, independientemente del valor de D_{gu}^{m+} . Por tanto, D_{gu}^{m+} se define condicionalmente según la Ecuación 2.77.

$$D_{gu}^{m+} = \begin{cases} \tilde{f}_{gu}^{m+} D_g^m, & \text{si } J_{gu}^{m+} > 0 \text{ y } \phi_g^m - \frac{J_{gu}^{m+} \Delta u_m}{2D_{gu}^{m+}} < \widehat{\phi}_{gu}^{m+} \\ D_g^m, & \text{en otras situaciones} \end{cases} \quad \text{Ecuación 2.77}$$

Utilizando la ecuación de la corriente neutrónica en las caras (Ecuación 2.74), los términos de fugas del problema transitorio (Ecuación 2.71) se pueden escribir según la Ecuación 2.78.

$$L_{gu}^m = a_{gu}^{m-} \phi_g^{m-l_u} + a_{gu}^m \phi_g^m + a_{gu}^{m+} \phi_g^{m+l_u} \quad \text{Ecuación 2.78}$$

Donde los coeficientes $a_{gu}^{m\pm}$ vienen dados por la Ecuación 2.79.

$$\begin{aligned} a_{gu}^{m-} &\equiv -\frac{1}{h_u^m} D_{gu}^{m-l_u} \\ a_{gu}^m &\equiv \frac{1}{h_u^m} (D_{gu}^{m+} + D_{gu}^{m-}) \\ a_{gu}^{m+} &\equiv -\frac{1}{h_u^m} D_{gu}^{m+l_u} \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.79}$$

Sustituyendo la Ecuación 2.78 en la Ecuación 2.67 se obtiene un problema transitorio en el que las únicas incógnitas son los flujos promedio nodales (suponiendo conocidos los coeficientes de acople).

Por ejemplo, el problema transitorio, aplicado a una malla de M elementos, para dos grupos de energía podría representarse en forma matricial según la Ecuación 2.80.

$$A_n \phi_n = S_n \quad \text{Ecuación 2.80}$$

Donde cada una de las matrices y vectores están definidos según las Ecuaciones 2.81 a 2.86.

$$A_n \equiv \text{col}(\alpha_n^1, \dots, \alpha_n^M) \in \mathfrak{R}^{2M, 2M} \quad \text{Ecuación 2.81}$$

$$\phi_n \equiv \text{col} \left(\begin{bmatrix} \phi_1^{1,n} \\ \phi_2^{1,n} \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} \phi_1^{M,n} \\ \phi_2^{M,n} \end{bmatrix} \right)$$

$$S_n \equiv \text{col} \left(\begin{bmatrix} S_1^{1,n} + S_d^{1,n-1} \\ S_2^{1,n} \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} S_1^{M,n} + S_d^{M,n-1} \\ S_2^{M,n} \end{bmatrix} \right) \quad \text{Ecuación 2.82}$$

$$(\phi_n, S_n) \in \mathfrak{R}^{2M}$$

$$\alpha_n \equiv \text{row}(\dots a_z^{m-,n} \dots a_y^{m-,n} \dots a_x^{m-,n}, d^{m,n}, a_x^{m+,n} \dots a_y^{m+,n} \dots a_z^{m+,n}) \in \mathfrak{R}^{1, 2M} \quad \text{Ecuación 2.83}$$

$$a_u^{m\pm,n} \equiv \begin{bmatrix} a_{1u}^{m\pm,n} & 0 \\ 0 & a_{2u}^{m\pm,n} \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 2.84}$$

$$d_n^m \equiv \begin{bmatrix} d_1^{m,n} - \beta_p^m \lambda v \Sigma_{f1}^{m,n} & -\beta_p^m \lambda v \Sigma_{f2}^{m,n} \\ -\Sigma_{12}^{m,n} & d_2^{m,n} \end{bmatrix} \in \mathfrak{R}^{2,2} \quad \text{Ecuación 2.85}$$

$$d_g^{m,n} \equiv \Sigma_{ag}^{m,n} + \frac{1}{\theta v_g^m \Delta t_n} + \frac{\alpha_g^{m,n}}{v_g^m} + \sum_{u=x,y,z} a_{gu}^{m\pm,n} \quad \text{Ecuación 2.86}$$

El sistema lineal representado por las Ecuaciones 2.72 a 2.78 se refiere como un problema transitorio CMFD y puede resolverse utilizando cualquier método iterativo para solucionar sistemas lineales. Por ejemplo, en PARCS están disponibles dos métodos basados en subespacios de Krylov, como son el BiCGSTAB y el GMRES, en ambos casos la matriz es preconditionada con el preconditionador BILU3D.

2.2.4. Determinación de los factores de acoplamiento nodal – problema bi-nodo

En el apartado anterior los coeficientes correctivos de acoplamiento nodal, $D_{gu}^{m\pm}$ se han asumido como conocidos. Sin embargo, estos coeficientes deben determinarse durante la iteración no-lineal de la malla gruesa que implica la resolución del método CMFD y los cálculos bi-nodo. Los cálculos bi-nodo se realizan para cada interface nodal que aparece en el dominio del problema modelado. El objeto de los cálculos bi-nodo es determinar las corrientes en la interface basándose en las distribuciones de flujo promedio nodal disponibles a partir del cálculo previo de diferencias finitas en malla gruesa

CMFD. Los CNCC se determinan por lo tanto de forma que la corriente en la interface obtenida mediante la Ecuación 2.74 sea la misma que la corriente en la interface nodal obtenida a partir de un cálculo bi-nodo.

En este apartado, se desarrollan dos métodos de obtener la solución al problema bi-nodo, el *Nodal Expansión Method* (NEM) y el *Analytical Nodal Method* (ANM).

2.2.4.1 Método nodal analítico (ANM)

El formalismo básico de los métodos nodales analíticos consiste en realizar una integración transversal de los términos de fugas a través del nodo sobre cada una de las direcciones consideradas. Este procedimiento se realiza sucesivamente y conduce a un sistema de n ecuaciones 1-D en las diferentes direcciones de las caras del nodo. En este caso, a título ilustrativo se presenta un breve desarrollo del método ANM en coordenadas cartesianas para un nodo genérico m , continuando con la nomenclatura de la Figura 2.7.

Con objeto de introducir el esquema general del método de resolución ANM se parte de la integración de la ecuación tridimensional estacionaria de la difusión sobre uno de los planos transversales del nodo m , en este caso la dirección x , obteniendo la Ecuación 2.87.

$$-D_g^m \frac{d^2 \phi_g^m(x)}{dx^2} + \Sigma_{ag}^m \phi_g^m(x) - F_g^m(x) \phi_g^m(x) = -L_g^m(x) \phi_g^m(x) \quad \text{Ecuación 2.87}$$

Donde el operador $F_g^m(x) \phi_g^m(x)$ se puede desarrollar para G grupos de energía según la Ecuación 2.88. Y el operador de fugas transversales $L_g^m(x) \phi_g^m(x)$ se desarrolla en términos de corrientes en la Ecuación 2.89.

$$F_g^m(x) \phi_g^m(x) = \frac{\chi_g^m}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^m \phi_{g'}^m(x) \quad \text{Ecuación 2.88}$$

$$L_g^m(x) \phi_g^m(x) = \frac{1}{h_y} (J_{gy}^+(x) - J_{gy}^-(x)) + \frac{1}{h_z} (J_{gz}^+(x) - J_{gz}^-(x)) \quad \text{Ecuación 2.89}$$

Para obtener la relación entre los flujos promedio en el nodo en cada dirección y las fugas transversales en las caras del nodo, se necesita únicamente resolver la Ecuación 2.87 para $\phi_g^m(x)$ e integrar este flujo unidimensional sobre todo el nodo. Desafortunadamente, la dependencia espacial de los términos de fugas transversales $L_g^m(x)$ hace que éstas deban ser conocidas, o al menos aproximadas, para obtener una solución a la ecuación inicialmente planteada. Esta circunstancia hace necesaria la aproximación espacial de dichos términos en el ANM.

Las posibilidades para realizar las aproximaciones a los términos de fugas transversales de la Ecuación 2.89 son ilimitadas. Sin embargo, es razonable esperar que cuanto más complicado sea la forma que se asuma, más difícil será la obtención de los flujos unidimensionales.

Por su simplicidad, uno de los primeros métodos propuestos fue asumir que los términos de fugas transversales y los flujos unidimensionales tienen la misma forma (*Buckling Approximation*) [31]. Esta aproximación puede ser exacta si los flujos fueran espacialmente separables dentro del nodo. Sin embargo, esta aproximación produce grandes errores en problemas en los que el flujo internodal es muy interdependiente entre las direcciones (problemas altamente no-separables).

Como alternativa a la aproximación del *Buckling* el mismo autor [31] desarrolló una aproximación espacialmente plana sobre el nodo de los términos de fuga transversales y la aproximación en dos-pasos, en los que se asume que los términos de fuga están compuestos por dos funciones constantes dentro de cada nodo [32]. A pesar de los esfuerzos de Shober, otros investigadores encontraron soluciones más precisas utilizando expansiones polinomiales de alto orden para definir la distribución espacial de los términos de fuga transversales ([33], [34] y [35]).

De todas las aproximaciones polinomiales desarrolladas, la más comúnmente empleada en los métodos nodales es asumir variaciones espaciales cuadráticas de los términos de fugas. Utilizar dicha aproximación en el planteamiento actual conduce a que los términos de fugas transversales obedezcan a la Ecuación 2.90.

$$L_g^m(x) = \bar{L}_g^m + b_{g1}^m f_1(\xi) + b_{g2}^m f_2(\xi) \quad \text{Ecuación 2.90}$$

Donde \bar{L}_g^m son las fugas transversales promediadas en el nodo y $f_g(\xi)$ son las funciones polinomiales utilizadas.

Existen multitud de autores que proponen diferentes funciones polinomiales cuadráticas para la aproximación espacial de los términos de fugas obteniendo con ellas resultados relativamente buenos. Por ejemplo, en PARCS, se utilizan las funciones polinómicas que aparecen en la Ecuación 2.91.

$$\xi = \frac{x}{h_x^m}, \quad f_1(\xi) = \xi, \quad f_2(\xi) = 3\xi^2 - \frac{1}{4} \quad \text{Ecuación 2.91}$$

Donde estas funciones polinomiales presentan las siguientes propiedades (Ecuación 2.92).

$$f_1\left(\xi = \pm \frac{1}{2}\right) = \pm \frac{1}{2}, \quad f_2\left(\xi = \pm \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}$$

$$f_1'\left(\xi = \pm \frac{1}{2}\right) = 1, \quad f_2'\left(\xi = \pm \frac{1}{2}\right) = \pm 3$$

Ecuación 2.92

Los coeficientes \bar{L}_g^m y b_{gp}^m son calculados para una distribución de flujo promedio nodal que se asume conocida de la iteración anterior de la solución de malla gruesa (CMFD). Además de la información de fugas transversales y los flujos promedio nodales, el valor del recíproco del autovalor (λ) se asume también conocido a partir de un cálculo previo CMFD. Teniendo en cuenta toda la argumentación presentada, puede obtenerse la solución analítica de la Ecuación 2.87 para el problema bi-nodal, y a partir de dicha solución, calcular la corriente en las interfaces de los nodos.

El procedimiento de obtención de la solución analítica de la ecuación diferencial de segundo orden presentada en la Ecuación 2.87 consiste en una solución homogénea y una particular que se calculan por separado y posteriormente se combinan (sumándose) para obtener la solución general que debe satisfacer las restricciones de flujo medio nodal, y continuidad de flujo y corriente en la interface.

Por brevedad, y escapar de los objetivos de la presente tesis, se omite mayor detalle en la obtención de la solución homogénea y la particular. La solución general para el problema bi-nodal, en una de las interfaces del nodo m , en la dirección x y para dos grupos de energía, puede considerarse dada por las funciones $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ de la Ecuación 2.93.

$$\begin{bmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1^H(x) + \phi_1^P(x) \\ \phi_2^H(x) + \phi_2^P(x) \end{bmatrix}$$

Ecuación 2.93

Las distribuciones de flujo de la Ecuación 2.93 se obtendrán una vez sean calculadas las ocho incógnitas (cuatro para cada grupo de energía) que presenta el problema bi-nodal. Estas incógnitas solamente pueden ser determinadas si se aplican el mismo número de restricciones, es decir cuatro valores de flujo promedio nodal (dos grupos por dos nodos), dos condiciones de continuidad de flujo (dos grupos por una interface), y dos condiciones de continuidad de la corriente (dos grupos por una interface).

En la Ecuación 2.94 se presenta la restricción aplicada al flujo promedio nodal.

$$\bar{\phi}_g^q = \frac{1}{h_x^q} \int_{-\frac{h_x^q}{2}}^{\frac{h_x^q}{2}} \phi_g^q(x) dx = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \phi_g^q(h_x^q \xi) d\xi, \quad q \in \{r, l\}$$

Ecuación 2.94

Donde ϕ_g^q está dado para cada nodo por el cálculo previo de CMFD. Y el criterio para designar los nodos es r para la cara derecha de la interface del nodo y l para la izquierda. La continuidad de flujo y corriente en la interface se determina empleando las restricciones presentadas en las Ecuaciones 2.95 y 2.96, respectivamente.

$$\xi_g^l \phi_g^l \left(\frac{h_x^l}{2} \right) = \xi_g^r \phi_g^r \left(-\frac{h_x^r}{2} \right) \quad \text{Ecuación 2.95}$$

Donde ξ_g^q son los factores de discontinuidad del flujo que deben calcularse, conjuntamente con las secciones eficaces y demás parámetros cinéticos, mediante un código de transporte de malla fina.

$$-D_g^l \frac{d\phi_g^l(x)}{dx} \Big|_{\frac{h_x^l}{2}} = -D_g^r \frac{d\phi_g^r(x)}{dx} \Big|_{-\frac{h_x^r}{2}} \quad \text{Ecuación 2.96}$$

Una vez se determinan los ocho coeficientes aplicando todas las restricciones a la Ecuación 2.93, se obtienen los flujos térmico y rápido. Sustituyendo estos flujos en la parte izquierda o derecha de las Ecuaciones 2.95 y 2.96, se obtienen los flujos y corrientes en la interface de los dos nodos considerados. Los flujos y corrientes superficiales se utilizan entonces en las Ecuaciones 2.74 a 2.78 para obtener los CNCC. A su vez estos CNCC se utilizan para los cálculos de la siguiente iteración del CMFD.

2.2.4.2 Método de expansión nodal (NEM)

Las principales características del método de expansión nodal son los desarrollos polinomiales que se realizan tanto en los flujos como en los términos de fugas transversales para cada dirección. Generalmente se utilizan expansiones cuadráticas para ambos términos. A título ilustrativo, se presenta una breve introducción del método NEM para un nodo hexaédrico genérico m (ver Figura 2.7).

Considerando forma general de la ecuación estacionaria de la difusión neutrónica en multigrupo, escrita de forma estándar en la Ecuación 2.97, y con las constantes de grupo (es decir, secciones eficaces y factores de discontinuidad) disponibles a partir de un cálculo de transporte en malla fina para G grupos de energía.

$$\vec{\nabla} \cdot D_g \vec{\nabla} \phi_g + \Sigma_{tg} \phi_g = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sgg'} \phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'} \phi_{g'} \quad \text{Ecuación 2.97}$$

Donde la dependencia espacial de cada cantidad ha sido suprimida. La Ecuación 2.97 se integra espacialmente, en coordenadas cartesianas, sobre un nodo m con propiedades homogeneizadas, obteniendo la Ecuación 2.98.

$$D_g^m \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_g^m(\vec{r}) + D_g^m \frac{\partial^2}{\partial y^2} \phi_g^m(\vec{r}) + D_g^m \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_g^m(\vec{r}) + A_g^m \phi_g^m(\vec{r}) = Q_g^m(\vec{r})$$

Ecuación 2.98

Donde se ha considerado que $g \in (1, G)$ y se han asumido las relaciones y operadores definidos en la Ecuación 2.99.

$$(\vec{r}) \equiv (x, y, z) \in V^m = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \equiv \text{Volumen del nodo } m$$

$$A_g^m = \Sigma_{tg}^m - \Sigma_{sgg}^m - \frac{\chi_g^m}{k_{eff}} \nu_g \Sigma_{fg}^m$$

Ecuación 2.99

$$Q_g^m(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g}^G Q_{gg'}^m \phi_{g'}^m(\vec{r}) = \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sgg}^m \phi_{g'}^m(\vec{r}) + \frac{\chi_g^m}{k_{eff}} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^m \phi_{g'}^m(\vec{r})$$

Por simplicidad, en los casos donde las ecuaciones sean redundantes en las tres direcciones, se muestra únicamente las de la dirección x de manera ilustrativa. Utilizando la Ley de Fick, en la dirección x , puede calcularse la corriente neutrónica J_{gx}^m según la ecuación 2.100.

$$J_{gx}^m(\vec{r}) = -D_g^m \frac{\partial}{\partial x} \phi_g^m(\vec{r})$$

Ecuación 2.100

Y teniendo en cuenta la definición de corriente neutrónica en todas las direcciones, puede reescribirse la Ecuación 2.98 desarrollando los términos difusivos en forma de corrientes (Ecuación 2.101).

$$\frac{\partial}{\partial x} J_{gx}^m(\vec{r}) + \frac{\partial}{\partial y} J_{gy}^m(\vec{r}) + \frac{\partial}{\partial z} J_{gz}^m(\vec{r}) + A_g^m \phi_g^m(\vec{r}) = Q_g^m(\vec{r}) \phi_g^m$$

Ecuación 2.101

Integrando la Ecuación 2.101 sobre todo el volumen del nodo m , se obtiene una ecuación de balance neutrónico local en términos de corrientes netas promediadas en las caras y el flujo promediado en el volumen. Este balance viene dado por la Ecuación 2.102.

$$\frac{1}{h_x^m} (\bar{L}_{gx}^m) + \frac{1}{h_y^m} (\bar{L}_{gy}^m) + \frac{1}{h_z^m} (\bar{L}_{gz}^m) + A_g^m \bar{\phi}_g^m = \bar{Q}_g^m$$

Ecuación 2.102

Donde, asumiendo que el vértice más próximo al origen del nodo m se encuentra en la posición (x, y, z) , las cantidades integradas volumétricamente se definen de acuerdo a las Ecuaciones 2.103 a 2.105.

$$\bar{\phi}_g^m = \frac{1}{V^m} \int_x^{x+h_x^m} \int_y^{y+h_y^m} \int_z^{z+h_z^m} \phi_g^m(\vec{r}) \cdot dx \cdot dy \cdot dz \quad \text{Ecuación 2.103}$$

$$\bar{Q}_g^m = \frac{1}{V^m} \int_x^{x+h_x^m} \int_y^{y+h_y^m} \int_z^{z+h_z^m} Q_g^m(\vec{r}) \cdot dx \cdot dy \cdot dz \quad \text{Ecuación 2.104}$$

$$\frac{1}{h_x^m} \bar{L}_{gx}^m = \frac{1}{h_x^m} (\bar{J}_{gx+}^m - \bar{J}_{gx-}^m) = \frac{1}{V^m} \int_x^{x+h_x^m} \int_y^{y+h_y^m} \int_z^{z+h_z^m} \frac{\partial}{\partial x} J_{gx}^m(\vec{r}) \cdot dx \cdot dy \cdot dz \quad \text{Ecuación 2.105}$$

Donde $\bar{J}_{gx\pm}^m$ son las corrientes netas promedio en la dirección x en las caras del nodo en x y $x + h_x^m$. La Ecuación 2.103 es conocida como ecuación de balance nodal. Ahora, una vez que se ha escrito la ecuación de la difusión en función de las corrientes netas promedio en cara y el flujo promedio en el nodo, debe extraerse cierta relación entre el flujo y las corrientes. Como se ha mencionado con anterioridad, NEM utiliza el método de integración transversal, en el que la ecuación tridimensional de la difusión se integra a través de las dos direcciones transversales a cada eje. Por tanto, este proceso de integración genera otras tres ecuaciones unidimensionales, que para la dirección x tiene la forma de la Ecuación 2.106.

$$\frac{d}{dx} J_{gx}^m(x) + A_g^m \bar{\phi}_{gx}^m(x) = \bar{Q}_{gx}^m(x) - \frac{1}{h_y^m} \bar{L}_{gy}^m(x) - \frac{1}{h_z^m} \bar{L}_{gz}^m(x) \quad \text{Ecuación 2.106}$$

Donde $\bar{L}_{gy}^m(x)$ es el término de fuga transversal promediado en la dirección y dado por la Ecuación 2.107 y $\bar{L}_{gz}^m(x)$ es el término de fuga transversal promediado en la dirección z dado por la Ecuación 2.108.

$$\bar{L}_{gy}^m(x) = \frac{1}{h_z^m} \int_z^{z+h_z^m} \int_y^{y+h_y^m} \frac{\partial}{\partial y} J_{gy}^m(\vec{r}) \cdot dy \cdot dz \quad \text{Ecuación 2.107}$$

$$\bar{L}_{gz}^m(x) = \frac{1}{h_y^m} \int_y^{y+h_y^m} \int_z^{z+h_z^m} \frac{\partial}{\partial z} J_{gz}^m(\vec{r}) \cdot dz \cdot dy \quad \text{Ecuación 2.108}$$

Como se ha mencionado con anterioridad, la característica principal del método NEM es que el flujo promediado unidimensionalmente que aparece en la ecuación de la difusión nodal, se expande utilizando aproximaciones polinómicas, que se pueden escribir de forma general según la Ecuación 2.109.

$$\bar{\phi}_{gx}^m(x) = \bar{\phi}_g^m + \sum_{n=1}^N a_{gxn}^m \cdot f_n(x) \quad \text{Ecuación 2.109}$$

Donde $\bar{\phi}_g^m$ es el flujo promedio en el nodo. Esto implica, que para satisfacer la Ecuación 2.109, se deben escoger las funciones $f_n(x)$ en base a que se cumpla la relación de la Ecuación 2.110.

$$\int_x^{x+h_x^m} f_n(x) dx = 0 \quad \text{para } n = 1, 2, \dots, N \quad \text{Ecuación 2.110}$$

En función del orden de la expansión polinómica seleccionada se tendrán una serie de polinomios que deben cumplir la Ecuación 2.110. Por ejemplo, para el caso típico de NEM cuadrático, la expansión llegará hasta polinomios de grado 4 ($N=4$). Las primeras cuatro funciones polinómicas en NEM pueden expresarse por ejemplo como las propuestas en la Ecuación 2.111.

$$f_1 = \frac{x}{h_x^m} \quad f_2 = 3\left(\frac{x}{h_x^m}\right)^2 - \frac{1}{4} \quad \text{Ecuación 2.111}$$

$$f_3 = \left(\frac{x}{h_x^m}\right)^3 - \frac{1}{4}\left(\frac{x}{h_x^m}\right) \quad f_4 = \left(\frac{x}{h_x^m}\right)^4 - \frac{3}{10}\left(\frac{x}{h_x^m}\right)^2 + \frac{1}{80}$$

Si se realiza un recuento del número de ecuaciones e incógnitas que se tiene este punto. Para un elemento m de la malla cartesiana tridimensional, se tienen como incógnitas el flujo promedio nodal y los N coeficientes de expansión en cada dirección para cada grupo de energía, esto implica que se necesitan $3N+1$ ecuaciones. Si analizamos el número de ecuaciones disponibles, se tiene la ecuación de balance nodal y las ecuaciones de las corrientes y continuidad de flujo que proporcionan 6 ecuaciones más para cada grupo de energía. De modo que para $N=2$ (expansión cuadrática), existen el mismo número de ecuaciones que de incógnitas sin realizar ningún otro desarrollo. Sin embargo, para $N>2$, se deben introducir nuevas ecuaciones para cada dirección y grupo energético. Esto normalmente se realiza utilizando esquema de residuos pesados (*weighted residual scheme*) aplicados a los términos de fugas, que en esencia proporcionan las ecuaciones adicionales necesarias. Éstas generalmente son denominadas como momentos o ecuaciones de momento (Ecuación 2.112).

$$\langle \omega_n(x), \frac{d}{dx} J_{gx}^m(x) \rangle + A_g^m \bar{\phi}_{gxn}^m = \bar{Q}_{gxn}^m - \frac{1}{h_y^m} \bar{L}_{gyxn}^m - \frac{1}{h_z^m} \bar{L}_{gzxn}^m \quad \text{Ecuación 2.112}$$

Donde las funciones de pesado se suelen elegir análogas a las funciones polinómicas utilizadas en la expansión del flujo unidimensional, es decir $\omega_n(x) = f_n(x)$.

Antes de resolver el sistema deben resolverse los términos de fuga transversales que aparecen en el lado derecho de la ecuación. Como su dependencia espacial es desconocida, éstas deben aproximarse al igual que en el ANM. De nuevo los métodos más utilizados para resolver dicha dependencia espacial es utilizar aproximaciones cuadráticas. Por ejemplo, para la dirección espacial x , la dependencia del término de fugas transversal en la dirección y se aproxima por la Ecuación 2.113.

$$\bar{L}_{gy}^m(x) \cong \bar{L}_{gy}^m + \rho_{gy1}^m f_1^m(x) + \rho_{gy2}^m f_2^m(x) \quad \text{Ecuación 2.113}$$

Donde \bar{L}_{gy}^m es el término de fugas promedio en la dirección y para el nodo m , y los coeficientes ρ_{gy1}^m y ρ_{gy2}^m pueden expresarse en función de las fugas promedio en la dirección y y de los dos nodos vecinos a los largo de la dirección x (nodos $m-1$ y $m+1$) de forma que se conserven las fugas promedio de estos tres nodos. De modo que estos coeficientes podrían escribirse según las Ecuaciones 2.114 y 2.115.

$$\rho_{gy1}^m = g^m(h_x^m) \left[\begin{array}{l} (\bar{L}_g^{m+1} - \bar{L}_g^m)(h_x^m + 2h_x^{m-1})(h_x^m + h_x^{m-1}) + \\ (\bar{L}_{gy}^m - \bar{L}_{gy}^{m-1})(h_x^m + 2h_x^{m+1})(h_x^m + h_x^{m+1}) \end{array} \right] \quad \text{Ecuación 2.114}$$

$$\rho_{gy2}^m = g^m(h_x^m)^2 \left[\begin{array}{l} (\bar{L}_{gy}^{m+1} - \bar{L}_{gy}^m)(h_x^m + h_x^{m-1}) + \\ (\bar{L}_{gy}^{m-1} - \bar{L}_{gy}^m)(h_x^m + h_x^{m+1}) \end{array} \right] \quad \text{Ecuación 2.115}$$

Donde la función g^m viene dada por la Ecuación 2.116.

$$g^m = \left[(h_x^m + h_x^{m+1})(h_x^m + h_x^{m-1})(h_x^{m-1} + h_x^m + h_x^{m+1}) \right] \quad \text{Ecuación 2.116}$$

La forma más habitual de resolver el sistema matricial asociado con el NEM es la formulación de la matriz respuesta. A su vez, PARCS emplea de nuevo la estrategia basada en métodos iterativos no lineales para resolver dicha matriz empleando bajos tiempos de ejecución y requisitos de memoria. La aplicación de estas técnicas fue desarrollada en los años 80 [36] [37] [38] e implementada, además de en PARCS, en los códigos de Studsvik QPANDA y SIMULATE.

2.2.5. Reconstrucción de potencia a nivel de varilla

La información de la potencia a nivel de varilla es importante en los análisis de seguridad del núcleo del reactor ya que resulta de capital importancia para la determinación del flujo lineal de calor máximo (MLHR) y los parámetros *Departure from Nucleate Boiling Ratio* (DNBR) y *Critical Power Ratio* (CPR). En este apartado se presentan los métodos utilizados por los códigos neutrónicos nodales para obtener la información de la potencia a nivel de varilla a partir de la solución general del núcleo. Este proceso es conocido como reconstrucción de la potencia a nivel de varilla (*Pin Power Reconstruction*, PPR) o proceso de deshomogenización de flujos.

El proceso de reconstrucción de la potencia de las varillas implica una suposición fundamental: las distribuciones de flujo dentro del propio combustible pueden ser estimadas mediante el producto de la distribución de flujo intranodal global y una función de forma heterogénea local. La función de forma tiene en cuenta las heterogeneidades causadas por el propio diseño del combustible: barras de agua, varillas con absorbentes neutrónicos, zonas de diferente enriquecimiento, etc. Dichas funciones deben generarse para cada tipo de elemento de combustible por un código de transporte en malla fina al mismo tiempo que se generan secciones eficaces nodales.

La suposición de la separabilidad flujo intranodal global y la función de forma local es utilizada por varios métodos de reconstrucción de potencia que han sido ampliamente investigados en las últimas décadas [39] [40]. Esta suposición se ha demostrado válida, ya que dichos métodos de reconstrucción se utilizan regularmente para cálculos de mejor estimación en análisis de seguridad de reactores nucleares comerciales.

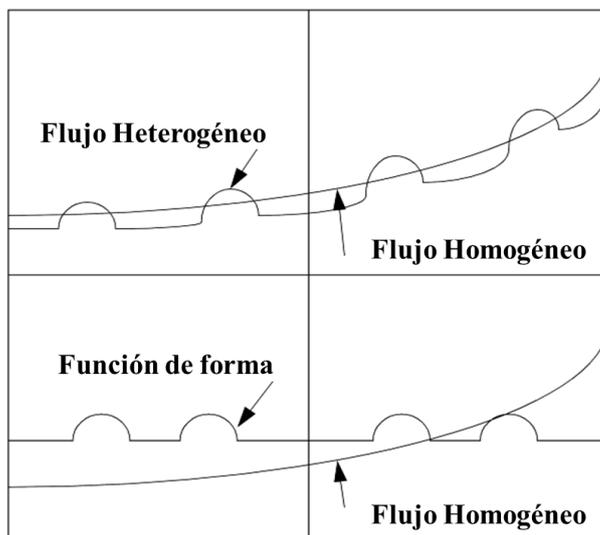


Figura 2.8 Forma de los flujos homogéneos y heterogéneos intranodales.

Como puede observarse en la Figura 2.8 inferior, a partir flujo homogéneo y la función de forma intranodal, puede reconstruirse el flujo heterogéneo (Figura 2.8 superior). Aplicando la aproximación de la separabilidad de flujos se pueden obtener distribuciones detalladas de los flujos heterogéneos dentro de cada nodo (combustible) mediante el producto de la distribución global homogénea (flujos nodales) y las funciones de forma heterogéneas (Ecuación 2.117).

$$\phi_g(x, y)_{\text{het}} = \phi_g(x, y)_{\text{hom}} \cdot \phi_g(x, y)_{\text{fun.forma}} \quad \text{Ecuación 2.117}$$

Las funciones de forma deben tener en cuenta las heterogeneidades en el flujo debidas al propio diseño del combustible: barras de agua, pastillas con venenos neutrónicos, variación de enriquecimientos, etc. Sin embargo, en los modelos nodales, las únicas distribuciones de flujo intranodales directamente disponibles son las distribuciones espaciales de flujo unidimensionales en cada una de las tres direcciones obtenidas del procedimiento de integración transversal utilizado. Si los flujos intranodales se aproximan asumiendo la separabilidad del flujo en cada dirección y utilizando los flujos unidimensionales disponibles, la predicción obtenida será inexacta. Por tanto, será necesario el desarrollo de metodologías alternativas para obtener los flujos intranodales.

Uno de los primeros métodos desarrollados para obtener de manera correcta las distribuciones de flujo intranodal asume que las formas de flujo intranodal pueden aproximarse mediante expansiones de polinomios no-separables [41]. Estas formas polinomiales del flujo modelan adecuadamente el comportamiento del flujo dentro del combustible. No obstante, polinomios de bajo orden no podrán modelar adecuadamente los grandes gradientes locales en el flujo térmico debidos a las interacciones espectrales en las interfaces de los combustibles (discontinuidades de flujo). Esta dificultad puede superarse definiendo funciones de forma del flujo heterogéneo a partir de cálculos de conjuntos de elementos combustibles (*colorsets*). En esta aproximación, cualquier inexactitud en las formas de flujo intranodal en las interfaces entre combustibles será absorbida por las funciones de forma que se definen de acuerdo a la Ecuación 2.118.

$$\phi_g(x, y)_{\text{fun.forma}} \equiv \frac{\phi_g(x, y)_{\text{colorset}}}{\phi_g(x, y)_{\text{colorset intranodal}}} \quad \text{Ecuación 2.118}$$

Cuando se utilizan funciones de forma en los *colorsets* [41] [42] [43] en la Ecuación 2.117, se obtienen buenas predicciones del flujo heterogéneo debido a que los errores en las formas de flujo intranodal se cancelan si la interface entre cada combustible ha sido correctamente caracterizada mediante el cálculo de un *colorset*. Pero este método presenta como gran desventaja los costes computacionales de realizar los cálculos de los *colorset*, ya que debe tenerse en cuenta que solamente se obtendrán potencias por varilla adecuadamente reconstruidas si se realizan cálculos de quemado en los *colorset* para todas las combinaciones de combustibles, cálculos que deben realizarse con códigos de transporte, usualmente en 2-D.

Por todo lo comentado anteriormente, las aproximaciones utilizadas por los códigos nodales suelen utilizar métodos que solamente requieran funciones de forma de combustibles aislados y en un punto de quemado concreto. En lo subsiguiente se presentará uno de los métodos utilizados para calcular las distribuciones de potencia a nivel de varilla basado en expansiones polinómicas de los flujos intranodales y en funciones de forma de combustibles aislados [44].

En los subsiguientes apartados se presentan los métodos de cálculo generalmente utilizados para la obtención de las funciones de forma de la potencia total y la solución homogénea del flujo internodal, necesarias como se ha planteado en la Ecuación 2.102 para obtener la función espacial del flujo heterogéneo dentro del nodo.

2.2.5.1 Funciones de forma de la potencia total

El método de reconstrucción aquí presentado parte de dos premisas: 1) si las distribuciones de potencia intranodal pueden ser modeladas con gran exactitud es posible calcular una correcta distribución de potencia a nivel de varilla utilizando funciones de forma calculadas para un solo combustible con condiciones de contorno de flujo nulo, y 2) debido a que las variaciones de flujo rápido dentro del combustible son relativamente suaves, es posible utilizar funciones de forma para la potencia total (no dependientes del grupo de energía). De esta forma se pueden escribir las funciones de forma según la Ecuación 2.119.

$$P(x, y)_{\text{reactor}} = P(x, y)_{\text{intranodal}} \cdot P(x, y)_{\text{fun.forma}} \quad \text{Ecuación 2.119}$$

Donde las distribuciones de potencia intranodal se calculan a partir de la sección eficaz de fisión nodal (homogeneizada) y las distribuciones de flujo para cada grupo de energía (Ecuación 2.120).

$$P(x, y)_{\text{intranodal}} = \sum_{f1} (x, y) \cdot \phi_1(x, y) + \sum_{f2} (x, y) \cdot \phi_2(x, y) \quad \text{Ecuación 2.120}$$

2.2.5.2 Distribuciones de flujo intranodal

Los trabajos de [41] demostraron que la distribución de flujo rápido intranodal puede aproximarse con exactitud utilizando expansiones de polinomios no separables según la forma presentada en la Ecuación 2.121.

$$\phi_1(x, y) = \sum_{i,j=0}^4 a_{i,j} \cdot x^i \cdot y^j \quad \text{Ecuación 2.121}$$

Las formas polinomiales del flujo presentadas en la Ecuación 2.121 no pueden utilizarse para los límites (interfaces) de los elementos combustibles debido a los grandes gradientes locales de flujo. Sin embargo, [45] demostró que el cociente entre el flujo rápido y el térmico presenta menos variación espacial que el flujo térmico, y que este valor puede ser modelado con precisión utilizando expansiones con senos y cosenos hiperbólicos.

Este comportamiento puede extrapolarse a las distribuciones de flujo térmico intranodal, de forma que éstas se aproximen utilizando funciones compuestas de un término asintótico y un término de transición superficial, tal y como refleja la Ecuación 2.122.

$$\phi_2(x, y) = \phi_1(x, y) \cdot c_{oo} + \sum_{\substack{i,j=0 \\ i \neq j \neq 0}}^4 c_{i,j} \cdot F_i(x) \cdot F_j(y) \quad \text{Ecuación 2.122}$$

Donde las funciones espaciales en cada dirección están descritas en la Ecuación 2.123.

$$\begin{aligned} F_0(u) &= 0 \\ F_1(u) &= \sinh(\kappa u) \quad F_2(u) = \cosh(\kappa u) \\ F_3(u) &= \sinh(2\kappa u) \quad F_4(u) = \cosh(2\kappa u) \end{aligned} \quad \text{Ecuación 2.123}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{h^2 \Sigma_{a2}}{D_2}} \quad h \equiv \text{anchura nodo}$$

$u = x, y, z$ direcciones espaciales

Otro método más general para obtener la distribución de flujo intranodal es utilizar expansiones polinómicas para representar la variación de las secciones eficaces en el interior del nodo. Partiendo de la ecuación estacionaria de la difusión multigrupo, en notación de operadores matriciales (Ecuación 2.58), planteada para ser resuelta en un nodo de malla cartesiana m análogo al anteriormente representado en la Figura 2.7.

Si se asume que las secciones eficaces pueden variar de forma suave dentro del propio nodo en las direcciones x e y (asumiendo despreciables las variaciones en la dirección z) y, además, se asume que el coeficiente de difusión es uniforme en todo el nodo, la ecuación estacionaria de la difusión para el nodo puede reescribirse según la Ecuación 2.124.

$$-D_g^m \nabla^2 \phi_g^m = \Sigma_g^m(r) \phi_g^m(r) \quad \text{Ecuación 2.124}$$

Donde Σ_g^m es la matriz de secciones eficaces que puede variar espacialmente dentro del nodo alrededor de su valor medio (Ecuación 2.125).

$$\Sigma_g(r) = \bar{\Sigma}_g + \Delta \Sigma_g(r) \quad \text{Ecuación 2.125}$$

Queda claro que la variación intranodal de las secciones eficaces se debe a que la distribución de quemados no es constante (plana). El término $\Delta \Sigma_g(r)$ puede calcularse a partir de expansiones polinomiales de Legendre. El procedimiento de homogeneización de las secciones eficaces en el nodo m produce una actualización, en función de la composición isotópica del nodo, de la sección eficaz.

$$\tilde{\Sigma}_g^m = \bar{\Sigma}_g^m + \Delta\Sigma_g^m \quad \text{Ecuación 2.126}$$

Teniendo en cuenta que se debe cumplir la Ecuación 2.127.

$$\Delta\Sigma_g = \frac{\int \Delta\Sigma_g(r) \cdot \phi_g(r) \cdot dV}{\int \phi_g(r) \cdot dV} \quad \text{Ecuación 2.127}$$

Por lo tanto, reescribiendo la Ecuación 2.124 en función de la relación presentada en la Ecuación 2.127, se llega a la Ecuación 2.128.

$$-D_g^m \nabla^2 \phi_g^m = \tilde{\Sigma}_g^m \phi_g^m - S(r) \quad \text{Ecuación 2.128}$$

Donde el término fuente $S(r)$, que se define en la Ecuación 2.128, tiene en cuenta las no uniformidades dentro del nodo.

$$S(r) = \left(\Delta\Sigma_g^m - \Delta\Sigma_g^m(r) \right) \phi_g^m(r) \quad \text{Ecuación 2.129}$$

La forma espacial del término fuente puede aproximarse utilizando por ejemplo expansiones polinomiales de Legendre de segundo orden en las direcciones x e y (Ecuación 2.130).

$$S(r) = \sum_{k=0}^2 \sum_{l=0}^2 a_{kl} \cdot P_k(x) \cdot P_l(y) \quad \text{Ecuación 2.130}$$

En cualquier caso, las condiciones de contorno para el nodo m para el problema de reconstrucción son el flujo promedio (o, alternativamente, las corrientes) en cada una de las seis caras del nodo, y el flujo promedio (o las corrientes) en cada una de las cuatro esquinas verticales del nodo.

Los seis flujos promedio y corrientes están disponibles a partir de la solución global (nodal). Sin embargo, la solución global no proporciona los cuatro flujos o corrientes en los puntos esquina. Por tanto, estas últimas deben ser calculadas por el proceso de reconstrucción, que puede realizarse como un subproceso dentro de la propia solución global.

Una vez obtenidas las restricciones necesarias, a partir de la ecuación de balance neutrónico se puede construir un sistema de ecuaciones diferenciales lineales en toda la malla y resolverse utilizando los métodos numéricos clásicos para este tipo de problemas lineales.

2.2.5.3 Procedimiento de interpolación del flujo en la esquina

La solución nodal proporciona los flujos promedio nodales, flujos promedio superficiales, y corrientes promedio superficiales que pueden ser utilizados como restricciones

para el desarrollo del flujo. Ahora bien, si a los desarrollos del flujo de las Ecuaciones 2.120 y 2.121 se le aplican únicamente como restricciones cantidades promediadas en el nodo y las superficies del mismo, la expansión no contendrá términos cruzados (es decir xy, x^2y^2 , etc.). Puede demostrarse que tal desarrollo del flujo no es preciso. Por esta razón, se requieren restricciones adicionales para determinar las estimaciones de los términos cruzados en estas dos ecuaciones. Las restricciones adicionales se obtienen obligando a la expansión del flujo a preservar los flujos en puntos de esquina nodales, y las estimaciones de los flujos de puntos de esquina se obtienen mediante un procedimiento de interpolación.

El primer método desarrollado con éxito para determinar los flujos en las esquinas fue introducido por [41]. Este método asume que la distribución del flujo es bicuadrática (x^2y^2) en cada uno de los cuatro nodos que rodean un punto de esquina. Estos desarrollos son necesarios para preservar flujos promediados por nodos, y los flujos y corrientes promediados en las caras. Condiciones adicionales de flujo y continuidad de corriente (así como condición de ausencia de fuente neta para puntos singulares) se imponen para obtener un sistema de 32 ecuaciones por grupo de energía para cada punto de esquina. Aunque este método produce flujos en puntos de esquina razonablemente precisos, el procedimiento es bastante ineficiente desde el punto de vista computacional.

Con el fin de maximizar la eficiencia computacional general del método de reconstrucción de potencia, se desarrollaron maneras más eficientes de calcular los flujos en las esquinas [44].

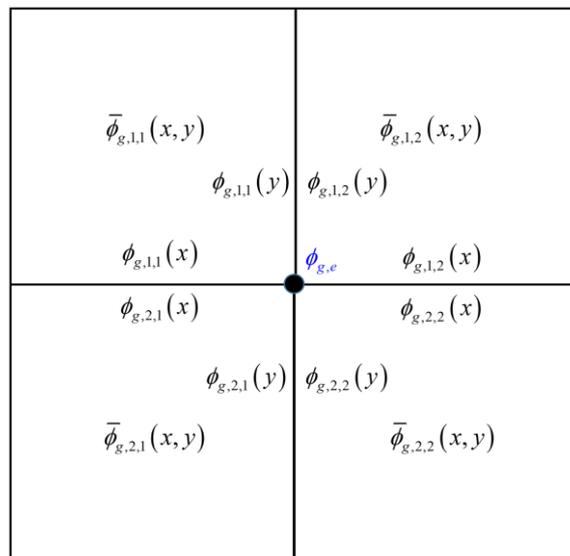


Figura 2.9 Esquema del cálculo del flujo de los puntos esquina.

Uno de los métodos más simples y utilizados para el cálculo de los flujos en los puntos esquina de los nodos asume que las distribuciones de flujo intranodal son separables, y por tanto el flujo en las esquinas puede calcularse utilizando la Ecuación 2.131.

$$\phi_{g,i,j}(x,y) = \frac{\phi_{g,i,j}(x) \cdot \phi_{g,i,j}(y)}{\overline{\phi_{g,i,j}(x,y)}} \quad \text{Ecuación 2.131}$$

Donde los flujos unidimensionales son los flujos transversalmente integrados disponibles a partir de la solución nodal. Expresiones similares se aplicaran a todos los nodos de alrededor de una esquina, como queda reflejado en el esquema de la Figura 2.9, para obtener las cuatro estimaciones del flujo en el punto esquina; y las cuatro estimaciones se promedian para obtener un solo valor para el flujo en el punto esquina (Ecuación 2.132).

$$\phi_{g,e} = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \phi_{g,i,j}(x,y) = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \frac{\phi_{g,i,j}(x) \cdot \phi_{g,i,j}(y)}{\overline{\phi_{g,i,j}(x,y)}} \quad \text{Ecuación 2.132}$$

2.2.6. Códigos y metodología

Los códigos neutrónicos los podríamos clasificar básicamente en dos grupos, los que integran la ecuación de la difusión neutrónica y los que lo hacen con la ecuación del transporte de Boltzmann. Tal y como ya se ha mencionado con anterioridad en este trabajo únicamente se analizarán los primeros.

Existen gran número de códigos que integran la ecuación de la difusión en 3-D con objeto de analizar el comportamiento neutrónico de los núcleos de los reactores nucleares. La mayor parte de los códigos suelen utilizar dos grupos de energía, neutrones rápidos y térmicos, si bien alguno de los mismos tiene capacidad para realizar análisis multi-grupo. Algunos códigos están diseñados únicamente para realizar cálculos estacionarios obteniendo los diferentes autovalores de la configuración de núcleo e incluso la forma espacial de la potencia en sus diferentes armónicos. Sin embargo, muchos poseen capacidad tanto para resolver el problema estacionario de autovalores como el transitorio.

De entre la multitud de códigos nodales desarrollados en las últimas décadas destacan herramientas como DYN-3D, NESTLE, TRIVAC, QUABOX, PARCS, QPANDA o VALKIN. Si bien, entre éstos, el código PARCS desarrollado en la *Purdue University* es el más importante desde el punto de vista de la seguridad nuclear puesto que la US NRC financia su desarrollo e integración en los códigos termohidráulicos RELAP5 y TRACE. No obstante, se hará una breve reseña de cada uno de los códigos anteriormente listados.

El código de análisis dinámico de reactores DYN-3D es una herramienta tridimensional de mejor estimación para simular estados estacionarios y transitorios de reactores de agua ligera (LWR) desarrollada en el Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR)

en Alemania. Originalmente, se desarrolló para el análisis de los transitorios y accidentes iniciados por reactividad en reactores rusos de tipo VVER y está recomendado por la IAEA como código de referencia para este tipo de reactores [46]. Su modelo dinámico comprende la solución de las ecuaciones tridimensionales de difusión de neutrones multigrupo tanto las geometrías cartesianas como hexagonales.

El sistema NESTLE, desarrollado conjuntamente en *North Carolina State University*, *Idaho National Engineering and Environmental Laboratory*, *Los Alamos National Laboratory* y *Oak Ridge National Laboratory*, resuelve la ecuación de difusión neutrónica multigrupo utilizando el método de expansión nodal (NEM) para problemas de estacionarios y transitorios. Pueden utilizarse dos o cuatro grupos de energías, y geometrías de núcleo cartesianas y hexagonales de hasta tres dimensiones [47].

El TRIVAC es un código modular desarrollado en el *Institut de Génie Énergétique* de la *Ecole Polytechnique* en Montréal que permite tanto la utilización de aproximaciones por elementos finitos como el uso de métodos nodales para la resolución de la ecuación de la difusión 3-D en geometrías cartesianas y hexagonales [48].

El sistema QUABOX-CUBBOX ha sido desarrollado en el *Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit* (GRS) alemán, que proporciona un análisis detallado del comportamiento del núcleo del reactor basado en modelos neutrónicos 3-D que resuelven las ecuaciones de difusión de neutrones para dos grupos de energía. Se basa en métodos de malla gruesa o métodos de desarrollo nodal que logran una alta precisión para nodos radiales de tamaño análogo al del elemento combustible [49].

El MODKIN y el VALKIN [50], [51] y [52] utilizan métodos modales para integrar la ecuación de difusión de neutrones en la aproximación de dos grupos de energía. Los métodos modales se basan en el supuesto de que el flujo neutrónico puede expandirse en términos de los modos Lambda asociado a la configuración estática del núcleo del reactor. Se utilizan estrategias de actualización temporal de modos durante los cálculos transitorios, lo que permite considerar el método nodal modal como cuasiestático.

Por último, PARCS, desarrollado en la *Purdue University*, es un simulador de núcleos tridimensional que resuelve, tanto en estacionario como en transitorio, la ecuación de la difusión neutrónica en multigrupos en geometrías cuadradas y hexagonales. Cuenta con la posibilidad de realizar cálculos mediante aproximaciones de bajo orden a la ecuación del transporte (como la SP3) y realizar la reconstrucción de potencia a nivel de varilla de combustible a partir de la solución nodal. PARCS está directamente acoplado con el código termohidráulico de sistema TRACE y presenta interfaz de acople con otros códigos como RELAP5 utilizando la PVM (*Parallel Virtual Machine*). Actualmente PARCS está siendo desarrollado en el *Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences* de la University of Michigan, financiado a través de la US NRC.

2.3. Comportamiento de combustible

Los códigos de simulación del comportamiento del combustible (*fuel performance codes*), también denominados termomecánicos, calculan la respuesta estacionaria (operación normal) y transitoria de las varillas de combustible de reactores de agua ligera. Estos programas informáticos calculan la temperatura, presión-deformación de la vaina, la corrosión, la producción de hidrógeno y el histórico de fallos de las varillas de combustible en función de la variación temporal de potencia y de las condiciones de contorno del refrigerante.

Estos códigos generalmente se utilizan para evaluaciones de recarga de núcleo cuasi estacionarios en las que se analiza la integridad de la varilla en función del quemado, y para obtener la respuesta de la varilla de combustible en los transitorios operacionales dispuestos en el Capítulo 15 del *Standard Review Plan* de la US NRC (eventos de la base de diseño) [53], y en otras condiciones operacionales que podrían dar lugar a fallos de combustible.

2.3.1. Fenomenología y modelos

Los fenómenos modelados por este tipo de códigos incluyen fenómenos como: a) conducción de calor a través del combustible y de la vaina, b) deformación elástica y plástica de la vaina, c) interacción mecánica combustible-vaina, d) liberación de gases de fisión, e) presión del gas del hueco de la varilla de combustible, f) transferencia de calor entre el combustible y la vaina, g) oxidación de la vaina y h) transferencia de calor de la vaina al refrigerante.

Uno de los aspectos a tener en cuenta en este tipo de códigos es cómo está implementada la variación de las propiedades de los materiales que componen la varilla de combustible. Las propiedades del dióxido de uranio/plutonio, las aleaciones de zirconio de las vainas y la mezcla de gases presentes en el hueco entre las pastillas y la vaina deben conocerse con exactitud para una correcta estimación de los parámetros anteriormente expuestos. Estas propiedades presentan múltiples dependencias y no siempre es sencilla su obtención. Por ejemplo: la conductividad térmica del combustible es función de la temperatura del combustible, la densidad del combustible y el quemado; La expansión térmica del combustible es función de la temperatura del combustible; Mientras que la relación tensión-deformación de la vaina es función de la temperatura, la velocidad de deformación, del trabajo en frío durante la fabricación, de su contenido de hidruro y de la fluencia de neutrones rápidos.

Con objeto de evitar la implementación de multitud de ecuaciones y tablas para la descripción de las propiedades físicas de los materiales, y la necesidad de validación para cada código, generalmente estos códigos utilizan propiedades del combustible, vainas y componentes del gas obtenidas a partir de librerías estandarizadas ampliamente validadas. Cuando, en ingeniería nuclear, se habla de propiedades de los materiales se suele

recurrir a la librería MATPRO. Esta librería ha sido recientemente actualizada para incluir propiedades dependientes del quemado y propiedades para aleaciones avanzadas a base de zirconio utilizadas en las vainas de las varillas [54]. Las únicas propiedades del material no incluidas en el documento actualizado de MATPRO son los productos de fisión gaseosos, la corrosión de la vaina y la liberación de hidrógeno de la vaina. Por tanto, dichas propiedades tendrán que estar descritas e implementadas en los propios códigos.

Otro aspecto a tener en cuenta antes de comenzar a exponer los modelos utilizados para describir los diferentes fenómenos es el acople entre los modelos térmicos y los mecánicos. La estrecha relación de los modelos térmicos y mecánicos se debe a la existencia de un huelgo entre el combustible y la vaina. A medida que aumenta la temperatura del combustible, las extremas tensiones generadas por los grandes gradientes de temperatura en el combustible (cabe recordar que el dióxido de uranio es un compuesto cerámico de baja conductividad térmica) hacen que el combustible se agriete y reubique. Las grietas pueden ser circunferenciales o radiales, pero son predominantemente radiales. El huelgo, que originalmente es el espacio entre el combustible y la vaina, se reestructura a medida que los fragmentos de combustible generados por el agrietamiento y abombamiento de las pastillas se mueven hacia afuera en el propio huelgo.

A medida que el combustible se calienta y se expande, va cerrando algunos de los huecos entre la propia pastilla y la vaina. Al entrar en contacto con la vaina el combustible interactúa acelerando la corrosión, y por tanto la destrucción de la misma.

El modelado del combustible fisurado y reubicado, tanto térmicamente como mecánicamente, requiere tener en cuenta el cambio del tamaño del huelgo entre el combustible y la vaina (y, por tanto, la conductividad del mismo) y el diámetro que debe presentar la pastilla de combustible para interactúe con la vaina. La reubicación de la superficie del combustible proporciona un nuevo tamaño de huelgo que a su vez será utilizado para calcular la nueva conductividad y las interacciones mecánicas. También se suele considerar el cambio en la presión interna debido a la existencia de una mayor temperatura en las grietas y el huelgo. Este último aspecto también afecta a la retroalimentación entre los cálculos mecánicos y térmicos.

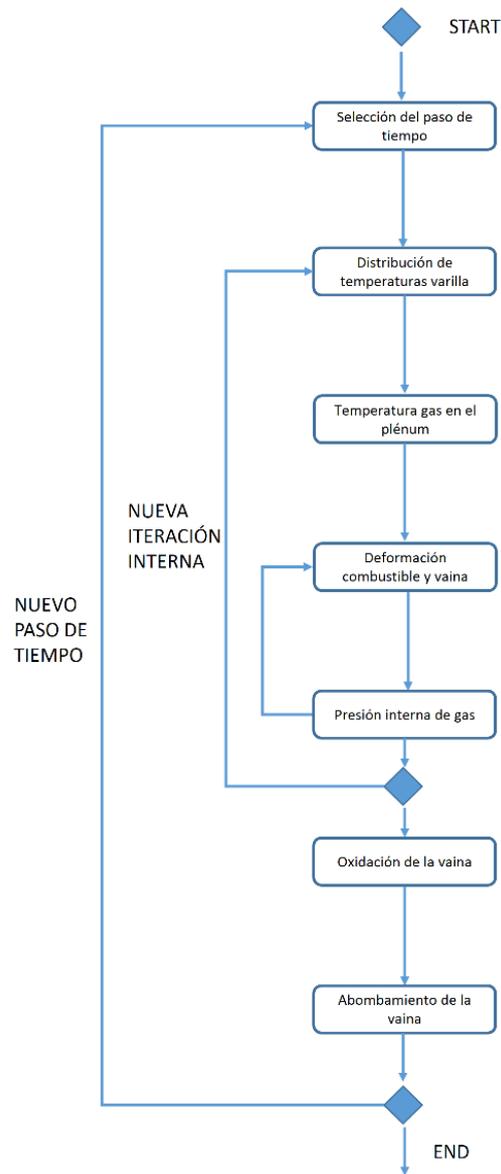


Figura 2.10 Diagrama de flujo habitual para el cálculo del comportamiento del combustible.

A continuación, se mostrará de manera ilustrativa los métodos que poseen los códigos termomecánicos para la descripción de los fenómenos físicos modelados que se presentaron con anterioridad.

2.3.1.1 Respuesta térmica: conducción de calor a través de la varilla

En general los códigos calculan la distribución de la temperatura en la varilla de combustible para cada nodo axial en el que se ha discretizado la misma. En la Figura 2.11 se presenta un esquema de la distribución radial de temperatura a través de la varilla, mientras que la Figura 2.12 presenta un diagrama de flujo simplificado del esquema de solución de dicha distribución de temperaturas.

Los modelos utilizados en los cálculos de la temperatura de la barra de combustible asumen una pastilla de combustible cilíndrica situada simétricamente dentro de una varilla de combustible cilíndrica rodeada por refrigerante. Para calcular la temperatura global del refrigerante T_b , se utiliza la entalpía de refrigerante y la tasa de generación de calor lineal del nodo axial. Posteriormente, se calcula un aumento de la temperatura en la película de suciedad y/o óxido de la vaina ΔT_f . En la superficie interior de la vaina la temperatura T_{ci} , será calculada con las propiedades de la aleación de zirconio utilizando la ley de Fourier. El aumento de la temperatura hasta la superficie del combustible se determina a partir de un modelo de conductividad de hueco anular, obteniendo la temperatura de la superficie del combustible T_{fs} . Finalmente, se calcula la distribución de la temperatura en el interior de la pastilla de combustible teniendo en cuenta los efectos del agrietamiento del combustible, utilizando como condición de contorno la temperatura de la superficie del combustible y simetría en la línea central.

Teniendo en cuenta todas las implicaciones del combustible nuclear, la forma general de la ecuación transitoria de la conducción de calor para una celda del mallado de la varilla se rige por la Ecuación 2.133.

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho \cdot C_p \cdot T \cdot dV = \oint_A \vec{n}_k \cdot \vec{Q}_k \cdot dA + \int_V Q''' \cdot dV - \oint_A Q_s \cdot dA \quad \text{Ecuación 2.133}$$

La parte izquierda de la igualdad representa el término dependiente del tiempo; siendo ρ la densidad del material, C_p la capacidad calorífica específica del material, T la temperatura del material. En la parte derecha de la igualdad, primero aparece la integral definida sobre toda la superficie que representa la energía entrante al volumen de control por conducción a través de sus caras: en dirección axial, azimutal, y radial. Donde \vec{n}_k es el vector unitario ortogonal a la superficie k , y A es el área de dicha superficie de la celda analizada. El segundo término representa la generación volumétrica de energía debido a fisión, siendo Q''' la tasa volumétrica de generación de calor y V el volumen de la celda. Finalmente, el tercer término del lado derecho de la ecuación representa el transporte de energía desde el sólido al fluido circundante (o viceversa).

Mencionar que por lógica el término de generación de calor volumétrica sólo se aplicará a la pastilla de combustible, mientras que el de transporte de energía con el fluido sólo tendrá lugar en la parte externa de la vaina.

Los modelos habitualmente utilizados en los cálculos de temperatura en la varilla realizan algunos supuestos. Los más habituales suelen ser los siguientes:

- La conducción de calor en la dirección axial en ocasiones se considera insignificante con respecto a la conducción térmica radial y se ignora debido a la gran relación longitud-diámetro.
- Algunos códigos ignoran la conducción de calor en la dirección azimutal (análisis asimétrico de la varilla).
- En general se deben mantener condiciones de contorno constantes durante cada paso de tiempo.
- Se asume flujo de calor constante para cada instante temporal.
- Se asume que la varilla de combustible es un cilindro circular rodeado de agua refrigerante.

Mencionar en este punto, que las condiciones del refrigerante: la presión, el flujo másico y la entalpía son necesarios para calcular la transmisión de calor entre la varilla y el refrigerante. Además, la presión del refrigerante también puede ser necesaria para calcular deformaciones en la vaina. En general, las condiciones del líquido refrigerante deben calcularse mediante un código termohidráulico externo y luego introducirse como condición de contorno en el código de análisis termomecánico. Sin embargo, numerosos códigos cuentan con la opción de que las propiedades del refrigerante puedan ser especificada por el usuario o calculada por el propio código que poseerá un modelo termohidráulico simplificado.

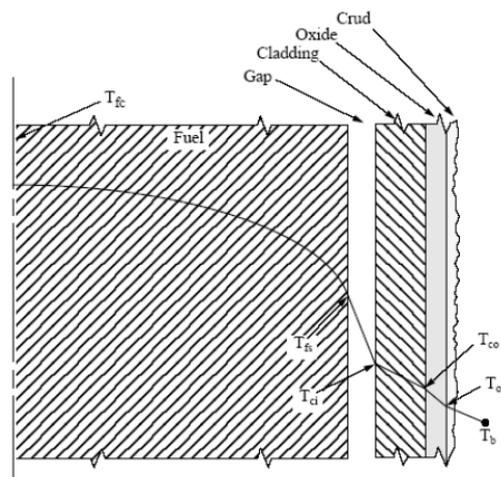


Figura 2.11 Esquema radial de la distribución de temperaturas en la varilla.

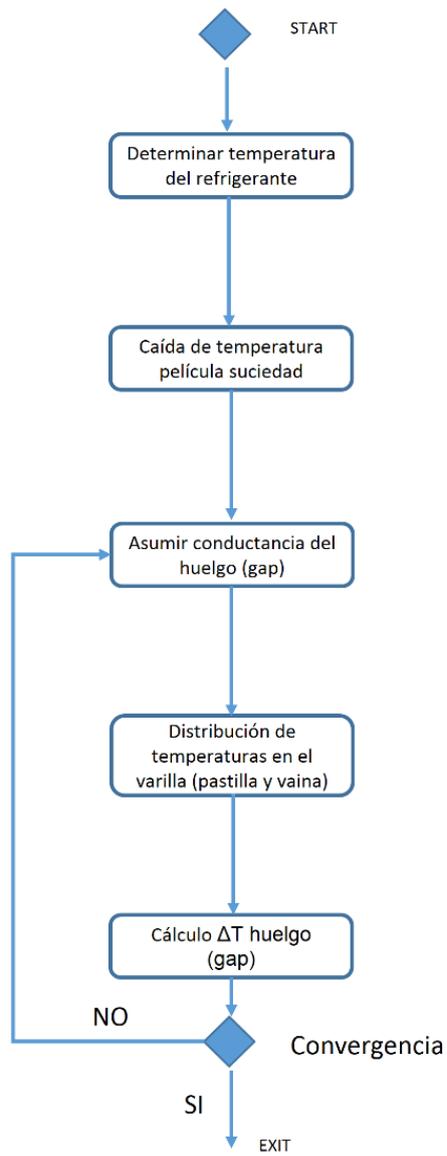


Figura 2.12 Diagrama de flujo habitual para el cálculo de temperaturas en la varilla.

2.3.1.2 Respuesta mecánica de la varilla.

En los análisis de comportamiento de combustible nuclear es necesario realizar un cálculo preciso de la deformación de combustible y la vaina debido a que el coeficiente de transferencia de calor a través del huelgo entre las pastillas de combustible y la vaina es una función tanto del tamaño del huelgo como de la presión interna del gas acumulado en el mismo. Además, se necesita un cálculo preciso de las tensiones de la vaina para calcular con precisión la deformación y el inicio del fallo de la misma (y la posterior liberación de los productos de fisión).

Al analizar la respuesta mecánica de las barras de combustible, se encuentran dos situaciones físicas. La primera situación ocurre cuando las pastillas de combustible y la vaina no están en contacto. Aquí se debe resolver el problema de una envoltura cilíndrica (la vaina) con presiones internas y externas especificadas y una distribución de temperatura también especificada. Esta situación se suele denominar como régimen de "brecha abierta". La segunda situación tiene lugar cuando las pastillas de combustible entran en contacto con la vaina. Esto ocurre como una combinación de expansión térmica diferencial entre el combustible y la vaina, el hinchamiento inducido por los productos de fisión del combustible y la deformación de la vaina. Esta situación se denomina régimen de "brecha cerrada" y da como resultado la interacción mecánica de las pastillas de combustible/vaina (*Pellet-Cladding Mechanical Interaction* (PCMI)).

El análisis de deformación incluye tensiones, tensiones y desplazamientos en el combustible y la vaina para toda la varilla de combustible. Estos análisis generalmente se basan en el supuesto de que tanto las pastillas de combustible como la vaina conservan su forma cilíndrica durante la deformación (no incluyen las deformaciones por tensiones internas, modelos rígidos). El modelo rígido debe incluir los siguientes efectos:

- Expansión térmica del combustible, hinchazón, densificación y reubicación
- Expansión térmica de la vaina, fluencia y plasticidad
- Presiones del gas de fisión y refrigerante externo

Dentro del análisis de deformación por desplazamiento pequeño, se incluye el cálculo del régimen de deformación local aplicable (brecha abierta, o cerrada). Una vez conocidas las deformaciones y el régimen aplicable se realiza los análisis de fatiga y tensiones en la vaina.

Generalmente se utiliza la teoría del análisis plástico como método para obtener las tensiones y deformaciones en las pastillas de combustible, ya que, por su rigidez, puede considerarse despreciable la deformación elástica de dichas pastillas. Por tanto, de forma general se obtendrán aplicando la Ley de Hook (Ecuación 2.134)

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + \varepsilon_p + \int \alpha_T dT$$

Ecuación 2.134

Donde ε_p es la deformación plástica, E es el módulo de elasticidad y $\int \alpha_T dT$ representa la deformación térmica.

Debido a las características de las varillas de combustible y a las condiciones a las que están sometidas durante su vida útil, resulta especialmente importante realizar el cálculo de deformaciones por *creep* o fluencia lenta (deformación dependiente del tiempo que se experimenta cuando se aplica al material una tensión constante, por ejemplo, por efectos térmicos). El método utilizado para los cálculos de plasticidad independiente del tiempo también se puede usar para cálculos de fluencia. En este contexto, el término "fluencia" se refiere a cualquier deformación permanente, y por tanto esta deformación puede ser acumulada en el tiempo. Además, generalmente la fluencia es altamente dependiente de la temperatura.

En cuanto a las tensiones y deformaciones en la vaina, hay que tener en cuenta que el modelo y los fenómenos iniciadores serán distintos en función de las dos situaciones (régimenes) que se pueden tener lugar en las varillas de combustible. En cualquiera de los casos cuando se supere el límite elástico de la vaina, se deberá tener en cuenta la deformación por hinchamiento permanente o abombamiento de la misma (*balloning*).

La deformación y las tensiones en la vaina en el régimen de brecha abierta se calcularán utilizando un modelo que considere una pared cilíndrica sometida presiones internas y externas y una temperatura uniforme.

Los cálculos para el régimen brecha cerrada se realizan usando un modelo que considere un casquillo cilíndrico sometido a una presión externa y un desplazamiento radial de la superficie interior de la vaina. El desplazamiento se obtiene de los modelos de expansión de la pastilla de combustible. Además, puesto que no se supone ningún deslizamiento cuando el combustible y la vaina están en contacto, la expansión axial del combustible se transmite directamente a la vaina.

En las varillas de combustible también deben tenerse en cuenta las deformaciones axiales de las pastillas de combustible, ya que estas provocarán una disminución del espacio libre disponible para la expansión del gas, y por consiguiente un aumento de presión en su interior. Los modelos que se utilizan para calcular el cambio de la longitud de la pila de pastillas de combustible generalmente realizan los siguientes supuestos.

- Las fuentes de deformación axial del combustible son la expansión térmica, la reubicación del combustible y el hinchamiento debido a la acumulación interna de gases.
- No se produce resistencia a la deformación axial del combustible.
- La dilatación térmica axial de la pila de combustible es igual a la dilatación térmica de una línea proyectada a través del reborde del plato de los granulos de combustible.
- No se produce deformación por fluencia.
- El combustible tiene propiedades isotrópicas en dirección axial.

De modo que la deformación axial, y por tanto el cambio de longitud de la pila de pastillas, será una función principalmente función de la temperatura media del combustible como se observa en la Ecuación 2.135.

$$\varepsilon_{ax} = \varepsilon_T(T_f) \quad \text{Ecuación 2.135}$$

Para finalizar, mencionar que las propiedades mecánicas de los materiales se encuentran también en la librería MATPRO.

2.3.1.3 Liberación de gases de fisión y presión interna.

Para calcular la presión del gas, se requiere la temperatura y el volumen del gas. Existen modelos térmicos que proporcionan la temperatura del gas almacenado en los cabezales de la varilla de combustible (*plénum* o pleno en castellano), el huelgo entre la vaina y las pastillas de combustible y los huecos entre las pastillas. Además, los modelos de deformación proporcionan información para calcular el volumen de los espacios en los que se almacena el gas: pleno, huelgo y los huecos entre pastillas.

Generalmente los modelos para el cálculo de la presión interna del gas se basan en los siguientes supuestos:

1. La ley de los gases ideales ($PV = NRT$).
2. La presión del gas es constante en toda la varilla de combustible.
3. El gas en las grietas del combustible está a la temperatura media del combustible.

Realizando estas suposiciones, la presión del gas dentro de las varillas podría obtenerse de manera simple aplicando la Ecuación 2.136.

$$P = \frac{NR}{\sum_{i=1}^{nV} \frac{V_i}{T_i}} \quad \text{Ecuación 2.136}$$

Donde N sería el número total de moles de gas, R la constante de los gases ideales, y V_i ; T_i el volumen y la temperatura del gas en cada región donde puede almacenarse en el interior de las varillas.

Por otro lado, resulta importante conocer la producción de gases de fisión para tenerlos en cuenta en el cómputo de moles totales de gases en la presión dentro de la varilla y para saber la emisión de isótopos radiactivos en caso de rotura de la vaina. Generalmente los gases de fisión considerados son el Kriptón, el Xenón, y el Helio, y la cantidad total liberada depende del volumen de combustible, de la tasa de producción de cada uno de ellos y del quemado del combustible.

2.3.1.4 Corrosión de la vaina y liberación de hidrógeno.

Existen numerosos estudios experimentales sobre la corrosión en agua de las aleaciones en base a Zirconio que se utilizan para la construcción de las vainas de combustible nuclear [55]. De estos estudios se concluye que generalmente se aplica una ley cúbica para el crecimiento del espesor de la capa de corrosión en función del tiempo hasta que se alcanza un cierto espesor del orden de unas pocas micras (espesor de transición). Una vez superado este espesor, se aplica una ley de velocidad de corrosión lineal, siendo la constante de velocidad una función de Arrhenius dependiente de la temperatura de la interfaz metal-óxido. No obstante, tanto el espesor de transición como los parámetros cinéticos de la reacción de oxidación dependen fuertemente del tipo de aleación utilizada.

Cabe mencionar que, en circunstancias normales, en las que el líquido está en contacto con la vaina y las temperaturas de la misma están dentro de los límites de operación normal, no se considera el crecimiento de la capa de óxido en transitorios cortos. Sin embargo, durante un transitorio de alta temperatura, tal como un LOCA, o situaciones en las que se produzcan fenómenos locales de *dryout* de la vaina, la temperatura de la vaina puede llegar a ser muy alta. En estos casos, podría formarse en cuestión de segundos una considerable capa de óxido, y por tanto deben tenerse en cuenta durante los cálculos.

Otro aspecto muy importante desde el punto de vista de la seguridad es la cantidad de hidrógeno liberada por la reacción de corrosión metal-agua, que también debe ser calculada por este tipo de códigos.

2.3.2. Códigos y metodología

Generalmente, el análisis del comportamiento de combustible nuclear se realiza en dos fases modelando el estado estacionario y los fenómenos transitorios por separado. La razón de este enfoque se debe principalmente a las limitaciones de recursos informáticos. Sin embargo, también se imita el procedimiento utilizado en muchos programas de pruebas experimentales en los que se realizan pruebas transitorias, muchas veces partiendo de una varilla de combustible reconstituida o instrumentada, después de un período de funcionamiento relativamente estable (cuasi-estacionario) hasta alcanzar el quemado de interés.

Aunque viable, el uso de esta metodología de análisis separada, a menudo supone restricciones significativas en el análisis de los problemas importantes de comportamiento del combustible, tanto en estacionario, como en regímenes operacionales transitorios. Este enfoque en dos etapas requiere del acoplamiento de los dos análisis, que puede ser engorroso dependiendo de la compatibilidad de los códigos utilizados y, a menudo, introduce una incertidumbre adicional en la solución global. A pesar de estos aspectos, la experiencia ha demostrado que es difícil implementar en un mismo código una única estructura de modelo que sea compatible con los dos regímenes (estacionario y transitorio) debido a las diferentes implicaciones de los modelos empleados y las ecuaciones a resolver.

Como ejemplo del enfoque de código independiente, la *Nuclear Regulatory Commission* de los Estados Unidos (US NRC) ha apoyado el desarrollo y actualmente mantiene dos códigos de análisis de combustible, FRAPCON [56] para análisis de estado estacionario y FRAPTRAN [57] para análisis transitorios. Ambos códigos integran un procedimiento de realimentación externa mediante archivos de volcado de datos. Las condiciones estáticas calculadas por FRAPCON en una simulación previa, pueden utilizarse como condiciones iniciales (a un quemado conocido) para la simulación transitoria realizada con FRAPTRAN

Del mismo modo, el *Electric Power Research Institute* (EPRI) ha apoyado dos códigos, ESCORE [58] y FREY [59], para los cálculos del estado estacionario y análisis transitorios, respectivamente. ESCORE es un código de evaluación de recarga de núcleo cuasi-estacionario basado en las diferencias finitas, licenciado por el NRC para quemados promedio de hasta 50 GWd/TU. Mientras que FREY es un programa de análisis de combustible termomecánico transitorio basado en elementos finitos usado para evaluar el comportamiento transitorio de las varillas de combustible.

Como se señaló anteriormente, la vinculación de dos programas separados para completar un estado estacionario y el análisis transitorio puede ser problemático. En el caso de ESCORE y FREY, se desarrolló un procedimiento, similar al de FRAPCON/FRAPTRAN, de interfaz entre los dos programas en el que ESCORE suministra las condiciones iniciales para FREY. El procedimiento de enlace acomoda las diferencias en las estructuras numéricas de los dos códigos, diferencias finitas versus elementos finitos, y pasa los datos de salida ESCORE que resultan relevantes a la entrada FREY proporcionando así un acoplamiento pasivo unidireccional de los dos programas.

En los últimos años, los cambios en el diseño de los combustibles comerciales y el aumento de la utilización del combustible (se alcanzan mayores quemados) han puesto de manifiesto la necesidad de una actualización tanto en la capacidad de análisis de estado estacionario como de transitorios. Por ello se han emprendido acciones para desarrollar programas informáticos que integren en una misma herramienta las capacidades de simular estacionarios y transitorios. En este aspecto, EPRI ha emprendido el desarrollo del programa informático FALCON cuyo objetivo primordial es proporcionar un código de estado estacionario y transitorio totalmente integrado que preserve y mejore las capacidades de ESCORE y FREY.

Por otra parte, en el Idaho National Laboratory se ha trabajado en el desarrollo y verificación de un avanzado código de análisis de comportamiento de combustible nuclear basado en elementos finitos aplicable gran variedad de formas de combustible nuclear denominado BISON [60]. Resuelve las ecuaciones totalmente acopladas de termomecánica y difusión de especies, ya sea para esquemas 1-D esféricos, 2-D axisimétricos o geometrías 3-D. Además, está integrado en el marco de la plataforma informática MOOSE lo que le permite resolver eficientemente problemas computacionalmente muy costosos utilizando computación de altas prestaciones. Este código incluye modelos muy detallados para describir las propiedades térmicas dependientes de la temperatura y el

quemado, la deformación y expansión del combustible por los productos de fisión, la densificación, la fluencia térmica y de irradiación, la fractura y la producción y liberación de gas de fisión. Además, posee modelos de plasticidad, deformación por irradiación y fluencia térmica para los materiales de la vaina. También dispone de modelos para simular la transferencia de calor en el huelgo entre la vaina y la pastilla de combustible, el contacto mecánico, y para la evolución de la presión en el huelgo y pleno interior de la vaina, considerando la temperatura del gas y la liberación de gas de fisión. Por lo que podría decirse que es uno de los códigos existentes en la actualidad más completos y detallados en su análisis.

El código de análisis termomecánico y químico de varillas de combustible PEREGRINE es el incluido dentro del proyecto de reactor virtual desarrollado por el consorcio CASL [61]. Este código permite capacidades tridimensionales para varillas únicas o múltiples, con objeto de evaluar los márgenes de seguridad y el impacto de la operación de la planta y el diseño de la varilla en su comportamiento.

Desde el punto de vista de los análisis de seguridad nuclear, de entre todos los códigos presentados, destacan la dupla FRAPCON/FRAPTRAN. Estos códigos soportados por la US NRC se utilizan comúnmente en la industria nuclear para realizar cálculos de licenciamiento y recarga de combustible. Al igual que la mayoría de códigos aquí presentados incluyen modelos para la conducción de calor a través del combustible y de la vaina, la deformación elástica y plástica de las pastillas de combustible y la vaina, la interacción mecánica combustible-vaina, la liberación de gases de fisión, la determinación de la presión del gas del huelgo de la varilla de combustible, la oxidación de la vaina y transferencia de calor entre la vaina y refrigerante. Además, FRAPCON/FRAPTRAN contienen las propiedades de los materiales en función de la temperatura y el quemado, las propiedades del refrigerante (tablas de vapor) y correlaciones de transferencia de calor en los distintos regímenes de transferencia que pueden darse en los reactores PWR y BWR.

Capítulo 3

Diseño de la plataforma multifísica

3.1. Aspectos generales de la plataforma multifísica

En el presente capítulo se abordan los detalles relativos a los acoples realizados entre los diferentes códigos seleccionados y la implementación final de todo el conjunto en una plataforma informática común con objeto de realizar análisis integrales de seguridad nuclear representando las diferentes físicas que intervienen. En primer lugar, en esta sección se presentan los códigos seleccionados para formar parte de la plataforma y se razonan los acoples necesarios para tener en cuenta las realimentaciones existentes entre los fenómenos físicos modelados con cada uno de ellos. Posteriormente se describen los acoples implementados entre los códigos y la optimización del código termohidráulico de subcanal mediante el uso de técnicas de paralelización. Para finalizar este capítulo se presenta el diseño final de la plataforma informática que incluye la descripción del proyecto de compilación, los archivos de entrada y de salida y control de simulación.

3.1.1. Selección de códigos y acoplamientos

A la hora de seleccionar los códigos se han tenido en cuenta diversos detalles entre los que destaca la posibilidad del autor de acceder a los códigos fuentes de los mismos. También se ha intentado seleccionar códigos vivos, es decir códigos actuales, con mantenimiento y que sean referencia de la industria nuclear para los campos analizados. Otro aspecto que se ha tenido en cuenta es que los códigos puedan llegar al nivel de detalle deseado en cada una de las físicas analizadas y en un tiempo de computación aceptable.

Otro requisito no menos importante en la selección de códigos es que estén ampliamente validados o que actualmente se siga trabajando en su validación. Este aspecto, junto con la documentación de las mismos, resulta de gran importancia desde el punto de vista de la aceptación de los cálculos de seguridad nuclear por parte de los reguladores nucleares

nacionales e internacionales. Por los motivos expuestos se han intentado seleccionar códigos que se adapten a los estándares internacionales, generalmente basados en las normativas y recomendaciones dictadas por la US NRC.

3.1.1.1 Códigos termohidráulicos

De entre los códigos disponibles para el análisis de los fluidos calientes que circulan a través del sistema de refrigeración y el núcleo de los LWR se han seleccionado los códigos termohidráulico de sistema TRACE y de subcanal CTF. Ambos códigos se complementan a la perfección a la hora de simular tanto el comportamiento global de la planta con TRACE, como los detalles necesarios de los elementos combustibles que conforman el núcleo del reactor utilizando las capacidades de CTF.

Como se apuntó con anterioridad durante el repaso al estado del arte de los códigos de simulación termohidráulica, TRACE es el código de referencia de la US NRC para realizar análisis termohidráulicos. El código es capaz de analizar eventos de pérdida de refrigeración (LOCAs) causados por roturas tanto grandes como pequeñas y analizar transitorios, tanto en reactores de agua a presión como en reactores de agua en ebullición (PWRs y BWRs). Actualmente existe capacidad de modelar fenómenos termohidráulicos tanto de manera unidimensional (1-D) como tridimensional (3-D) utilizando los distintos componentes básicos disponibles en el código.

Los modelos utilizados en TRACE incluyen flujo multidimensional de dos fases, termodinámica de no-equilibrio, transferencia de calor generalizada, reflujo, seguimiento de nivel y cinética del reactor. También se proporcionan capacidades automáticas de salvado/reinicio de estados estacionarios y transitorios. Las ecuaciones diferenciales parciales que describen el flujo de dos fases y la transferencia de calor se resuelven utilizando métodos numéricos de volúmenes finitos. Las ecuaciones de transferencia de calor se evalúan utilizando una técnica de diferenciación temporal semi-implícitas.

Las ecuaciones de dinámica de fluidos en los componentes espaciales de TRACE unidimensionales (1-D) y tridimensionales (3-D) utilizan por defecto un procedimiento de diferenciación temporal de varios pasos que permite superar la condición de *límite de Courant material (método SETS)*. También está disponible un método de *diferenciación de tiempo semi-implícito* más directo, si el usuario lo solicita en el archivo de entrada. Las ecuaciones diferenciales que definen los fenómenos hidrodinámicos forman un sistema de ecuaciones no lineales acopladas que se resuelven mediante el *método de iteración de Newton-Raphson*. Las ecuaciones linealizadas resultantes se resuelven mediante *inversión directa de la matriz*. Para la matriz de red 1-D, esto se realiza mediante un solucionador directo de matriz completa. Para la matriz de resultante de componentes *vessel* 3-D, TRACE utiliza el *capacitance-matrix method* utilizando un solucionador directo para la matriz de banda resultante en este tipo de componentes.

Como también se apuntó en los apartados de estado del arte, COBRA-TF (CTF) es un código de simulación termohidráulica de subcanal diseñado para el análisis con alto nivel

de detalle de núcleos y elementos combustibles de LWR. Utiliza dos fases, con tres campos (película de líquido, gotas de líquido y vapor) como aproximación al fluido bifásico. Las ecuaciones de conservación se resuelven bien para coordenadas de subcanal como para una malla ortogonal 3-D. El código, originalmente desarrollado por el *Pacific Northwest Laboratory* en los 80 ha sido utilizado y modificado por numerosas instituciones en las últimas décadas hasta el punto de existir una familia de códigos que derivan del COBRA original.

Los modelos utilizados en CTF incluyen flujo multidimensional de dos fases y tres campos con un total de 8 ecuaciones de conservación (se utiliza una única ecuación de conservación de la energía del líquido continuo y disperso), termodinámica de no-equilibrio, transferencia de calor generalizada, modelos simplificados de rejillas espaciadoras y conducción térmica 3-D en los sólidos. Las ecuaciones diferenciales parciales que describen el comportamiento del fluido bifásico y la transferencia de calor se resuelven utilizando métodos numéricos de volúmenes finitos y se evalúan utilizando técnicas de diferenciación temporal semi-implícitas.

Las ecuaciones diferenciales que definen los fenómenos hidrodinámicos forman un sistema de ecuaciones no lineales acopladas que se resuelven, al igual que TRACE, mediante el método de iteración de Newton-Raphson. Finalmente, las ecuaciones lineales resultantes se resuelven mediante técnicas iterativas basadas en subespacios de Krylov.

Antes de finalizar este apartado hay que hacer hincapié en dos aspectos que pueden afectar posteriormente a la hora de acoplar los códigos termohidráulicos TRACE y CTF. En primer lugar, ambos códigos pueden discretizar las ecuaciones de conservación de manera análoga utilizando volúmenes finitos y métodos semi-implícitos para las diferenciaciones espaciales y temporales respectivamente. Además, ambos códigos utilizan el método de iteración de Newton-Raphson para formar las matrices con los términos diferenciales de celda y montar la matriz de presiones de todo el dominio simulado. Que utilicen métodos numéricos comunes conlleva analogías en los coeficientes de la matriz de presiones y por tanto es positivo para la implementación del acoplamiento termohidráulico. El aspecto negativo viene dado por el hecho de que actualmente TRACE utiliza 6 ecuaciones de conservación para la descripción del fluido bifásico mientras que CTF utiliza 8 ecuaciones, ya que realiza seguimiento del líquido disperso en gotas en ciertos regímenes de ebullición. Cuando existan estos regímenes en los que el líquido disperso está presente podrían necesitarse correlaciones o suposiciones adicionales durante el acople.

3.1.1.2 Código neutrónico

Como herramienta neutrónica en la plataforma desarrollada se ha seleccionado el código de difusión neutrónica 3-D PARCS. PARCS es un simulador de núcleos tridimensional (3-D) que resuelve, tanto en estacionario como en transitorio, la ecuación de la difusión en multigrupos en geometrías cartesianas rectangular y hexagonal. Además, PARCS también cuenta con la posibilidad de realizar cálculos mediante aproximaciones de bajo orden angular a la ecuación del transporte (SP3) y realizar la reconstrucción de potencia a nivel de varilla de combustible a partir de la solución nodal. PARCS está directamente acoplado con el código termohidráulico de sistema TRACE y presenta interfaz de acople con otros códigos como RELAP5 utilizando la PVM (Parallel Virtual Machine). El código está siendo desarrollado en el *Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences de la Universidad de Michigan*, financiado y mantenido a través de la US NRC

3.1.1.3 Códigos termomecánicos

La plataforma se completa con los códigos de análisis termomecánicos de combustible FRAPCON/FRAPTRAN, que proporcionan valores del comportamiento del combustible tanto en casos pseudo-estacionarios (en función del quemado adquirido durante el periodo que permanece el combustible en el núcleo), como durante los análisis transitorios rápidos. Los valores calculados por estos códigos termomecánicos pueden ser utilizados tanto para calcular parámetros limitantes de seguridad durante transitorios de seguridad nuclear, como para realimentar las estructuras que representan las varillas de combustible en el código termohidráulico con variables calculadas con mayor exactitud.

3.1.2. Acoplamiento y optimización de los códigos de la plataforma

En este apartado se presentan brevemente los acoples y optimizaciones realizadas en los códigos que componen la plataforma multifísica desarrollada en el presente trabajo. En primer lugar, se aborda el procedimiento de acople entre los códigos termohidráulicos de sistema TRACE y de subcanal CTF (acople TH-TH). En segundo lugar, se presenta el acople entre el código termohidráulico de subcanal CTF y el neutrónico PARCS (acople TH-NK3D). Por último, se detalla el acople realizado entre el código termohidráulico de subcanal CTF y el código termomecánico FRAPTRAN. Para acabar el presente apartado se detalla la paralelización mediante MPI del código CTF.

Se han realizado dos tipos de acople interno entre ambos códigos termohidráulicos: un *acople semi-implícito completo* y un *acople semi-implícito por solapamiento de dominios*. El primero de ellos, acople semi-implícito completo, se basa en la sustitución en el modelo de TRACE del núcleo del reactor por el dominio simulado por CTF existiendo realimentación a tiempo real entre ambos códigos. Por el contrario, en el acople por solapamiento de dominios el núcleo se modela tanto con TRACE como con CTF y únicamente hay intercambio unidireccional de información desde TRACE a CTF.

3.2. Acople TH-TH semi-implícito TRACE/CTF

El objetivo perseguido mediante el acople semi-implícito es la sustitución del núcleo del reactor del modelo de TRACE por el dominio simulado por CTF. La idea es utilizar el sistema de comunicación y acople basado en los componentes tipo *exterior* desarrollados en TRACE para mantener la sincronización necesaria entre ambos códigos.

3.2.1. Los componentes tipo ‘exterior’ de TRACE

Los componentes tipo *exterior* fueron inicialmente implementados para facilitar el desarrollo de modelos diseñados para explotar las características de ejecución en paralelo de TRACE. Esta capacidad de TRACE viene facilitada a través del *Exterior Communications Interface* (ECI).

Cuando se utiliza más de un proceso para modelar el dominio fluido, debe mantenerse algún modo de acople implícito entre los procesos para evitar inestabilidades numéricas. Si se siguen adecuadamente los convenios de nombres de variables y signos, TRACE puede acoplar correctamente la solución del método numérico, ya sea el semi-implícito o SETS (*Stability-Enhancing Two-Steps*), sobre todos los procesos que contribuyen a la simulación del dominio fluido.

La solución de las ecuaciones que rigen el fluido está basada en la concordancia de las denominadas *variables exterior*. En las tareas cuyo dominio coincide en el lugar donde se definen los componentes tipo *exterior* deben comunicarse dichas variables. Las variables comunicadas se utilizan para realizar una reducción en dos etapas de las ecuaciones como se ilustra en el presente ejemplo. La Figura 3.1 ilustra la asignación de las variables del exterior centradas en celda (malla de conservación/continuidad) para un simple lazo formado por dos dominios unidimensionales.

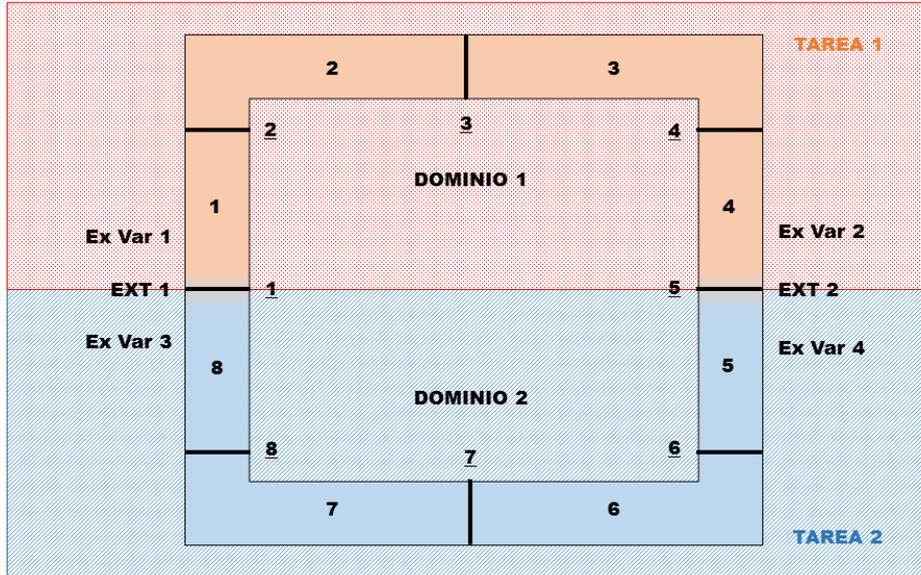


Figura 3.1 Esquema de acople entre procesos a través de componentes exterior.

Como se observa en la Figura 3.1 las celdas 1-4 pertenecen al dominio 1 y residen en la tarea 1, mientras que las celdas 5-8 corresponden al dominio 2 y estarán incluidas en la tarea 2. Se asigna una variable ligada al componente exterior en cada cara de la unión entre dominios (*exterior junctions: Ex Var 1-4*).

Si todo el dominio fuera simulado por un solo proceso. La ecuación matricial de la presión de TRACE para el método semi-implícito sería de la forma que aparece en la Ecuación 3.1.

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{1,8} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{5,4} & a_{5,5} & a_{5,6} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_{6,5} & a_{6,6} & a_{6,7} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{7,6} & a_{7,7} & a_{7,8} \\ a_{8,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{8,7} & a_{8,8} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ dp_3 \\ dp_4 \\ dp_5 \\ dp_6 \\ dp_7 \\ dp_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.1}$$

Como el dominio se divide en dos tareas computacionales distintas, se debe realizar un proceso de corrección de presiones, en función de la solución obtenida en la otra tarea. Esto se debe a que, como se aprecia en las Ecuaciones 3.2 y 3.3, no existen términos de

acople entre dominios en las matrices de presiones de cada uno de ellos. Es decir, no existen los coeficientes $a_{4,5}$, $a_{5,4}$, $a_{1,8}$ y $a_{8,1}$.

$$A \cdot dp = b \equiv \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & 0 \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} \\ 0 & 0 & a_{4,3} & a_{4,4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ dp_3 \\ dp_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.2}$$

$$A \cdot dp = b \equiv \begin{bmatrix} a_{5,5} & a_{5,6} & 0 & 0 \\ a_{6,5} & a_{6,6} & a_{6,7} & 0 \\ 0 & a_{7,6} & a_{7,7} & a_{7,8} \\ 0 & 0 & a_{8,7} & a_{8,8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp_5 \\ dp_6 \\ dp_7 \\ dp_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.3}$$

Para la resolución de la ecuación de la presión de manera semi-implícita utilizando las variables del *exterior*, se puede observar que los términos definidos como *Ex Var* en la Figura 3.1 corresponden directamente con la solución de las variables dp en los volúmenes con índices absolutos 1, 4, 8 y 5. Estos términos se definen como dp_{Ext1} , dp_{Ext2} , dp_{Ext3} , y dp_{Ext4} en lo subsiguiente y se sustituyen en las Ecuaciones 3.2 y 3.3.

La primera parte de la solución planteada es local para cada proceso, y viene seguida con el procedimiento habitual de solución de TRACE con la adición de términos en la parte derecha de cada ecuación para computar los efectos desconocidos de las variables en los procesos adyacentes. Por tanto, de forma general el sistema de ecuaciones de la presión para un dominio que cuenta con componentes *exterior* tendría la forma de la Ecuación 3.4.

$$A \cdot dp = b - \sum_{i=1}^{nExt} a_{Ext_i} \cdot dp_{Ext_i} \quad \text{Ecuación 3.4}$$

Si la Ecuación general 3.4, se escribe para la tarea 1 del ejemplo de la Figura 3.1, el sistema de ecuaciones de presión podría escribirse según la Ecuación 3.5. Mientas que para la tarea 2 se escribiría en función de los componentes *exterior* 1 y 2 (Ecuación 3.6).

$$A \cdot dp = b - a_{Ext3} \cdot dp_{Ext3} - a_{Ext4} \cdot dp_{Ext4} \quad \text{Ecuación 3.5}$$

$$A \cdot dp = b - a_{Ext1} \cdot dp_{Ext1} - a_{Ext2} \cdot dp_{Ext2} \quad \text{Ecuación 3.6}$$

Por lo que una vez resuelto el sistema $Adp = b$ vinculado a cada tarea (cuyo vector solución nos dará los dp_i^0), la corrección de presión que realizan los componentes *exterior* podría escribirse para la tarea 1 y 2 según las Ecuaciones 3.7 y 3.8 respectivamente.

$$dp_i = dp_i^0 - a_{i,3} \cdot dp_{Ext3} - a_{i,4} \cdot dp_{Ext4} \quad \text{Ecuación 3.7}$$

$$dp_i = dp_i^0 - a_{i,1} \cdot dp_{Ext1} - a_{i,2} \cdot dp_{Ext2} \quad \text{Ecuación 3.8}$$

Esta primera parte de la solución local consiste en añadir unos términos correctores dentro de la solución de la matriz de presiones del dominio simulado por cada tarea. Una vez se obtenga la solución de la ecuación de los componentes *exterior*, que realiza únicamente el proceso principal, se pueden utilizar dichos términos para corregir las presiones de todas las celdas de los dominios simulados.

La segunda parte de la solución, las ecuaciones reducidas a cada conexión adyacente (Ecuación 3.9) a cada sub-proceso (tarea) son generadas en el proceso asignado para su resolución (proceso principal).

$$\begin{aligned} dp_1 &= dp_1^0 - a_{1,3} \cdot dp_{Ext3} - a_{1,4} \cdot dp_{Ext4} \\ dp_4 &= dp_4^0 - a_{4,3} \cdot dp_{Ext3} - a_{4,4} \cdot dp_{Ext4} \\ dp_8 &= dp_8^0 - a_{8,1} \cdot dp_{Ext1} - a_{8,2} \cdot dp_{Ext2} \\ dp_5 &= dp_5^0 - a_{5,1} \cdot dp_{Ext1} - a_{5,2} \cdot dp_{Ext2} \end{aligned} \quad \text{Ecuación 3.9}$$

Reconociendo las idénticas relaciones entre las variables locales y las variables asociadas al exterior, y reorganizando las incógnitas en la parte izquierda de la ecuación se llega a la Ecuación 3.10.

$$\begin{aligned} dp_{Ext1} + a_{1,3} \cdot dp_{Ext3} + a_{1,4} \cdot dp_{Ext4} &= dp_{Ext1}^0 \\ dp_{Ext2} + a_{2,3} \cdot dp_{Ext3} + a_{2,4} \cdot dp_{Ext4} &= dp_{Ext2}^0 \\ dp_{Ext3} + a_{3,1} \cdot dp_{Ext1} + a_{3,2} \cdot dp_{Ext2} &= dp_{Ext3}^0 \\ dp_{Ext4} + a_{4,1} \cdot dp_{Ext1} + a_{4,2} \cdot dp_{Ext2} &= dp_{Ext4}^0 \end{aligned} \quad \text{Ecuación 3.10}$$

El sistema de Ecuación 3.10 se resuelve en el proceso principal, y los valores finales de las variables del *exterior* se transmiten de nuevo a cada una de las tareas donde una última etapa de sustitución genera todos los valores (de celda) de variación de presión local.

En forma matricial, el sistema de ecuaciones vinculadas al exterior que resuelve el proceso principal viene dado por la Ecuación 3.11, donde las únicas incógnitas son los términos de presión vinculados a los *exterior* dp_{Ext_i} , ya que $dp_{Ext_i}^0 \equiv dp_i^0$, son conocidas gracias a la solución general de la matriz de presiones asociada a cada dominio.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & a_{1,3} & a_{1,4} \\ 0 & 1 & a_{2,3} & a_{2,4} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & 1 & 0 \\ a_{4,1} & a_{4,2} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp_{Ext1} \\ dp_{Ext2} \\ dp_{Ext3} \\ dp_{Ext4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} dp_{Ext1}^0 \\ dp_{Ext2}^0 \\ dp_{Ext3}^0 \\ dp_{Ext4}^0 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.11}$$

Una serie similar de operaciones algebraicas es utilizada para todas las ecuaciones asociadas con el método SETS, pero no se analizará en más detalle porque dicho método no se utiliza para el código acoplado TRACE/CTF.

3.2.2. Aplicación de los componentes 'exterior' al acople TRACE/CTF

La metodología de los componentes *exterior* de TRACE presentada anteriormente puede extenderse para realizar el acople de TRACE con otros códigos termohidráulicos. En este trabajo se han utilizado los componentes tipo *exterior* para el acople semi-implícito en subdominios de los códigos TRACE y CTF.

Para implementar este acople se han realizado las siguientes suposiciones:

- Se define a TRACE como proceso principal, y por tanto siempre es el encargado de resolver el sistema de ecuaciones asociados a los componentes exterior (Ecuación 3.11).
- Se asume que CTF siempre se utiliza para simular el núcleo del reactor (o partes radiales del mismo que comprendan uno o varios elementos combustibles).
- Se asume que todo el dominio simulado por CTF está conectado con TRACE a través de dos componentes tipo *exterior* con conexiones múltiples. Por tanto, el dominio simulado por CTF se puede asimilar a un solo componente en vasija cartesiana TRACE conectado axialmente con la vasija cilíndrica del propio TRACE.

La primera suposición implica que CTF no es el código encargado de resolver el sistema de los componentes *exterior*. No obstante, tendrá que comunicar a TRACE tanto las presiones como los coeficientes asociados a las uniones de tipo *exterior* que existen en su dominio y por tanto habrá que implementar modificaciones para ello en CTF.

La segunda suposición implica que el dominio de CTF se debe agrupar en uno (un combustible o todo el núcleo conectados entre dos puntos a la vasija de TRACE) o varios componentes (varias fracciones del núcleo conectadas a distintos puntos en la vasija de TRACE) definiendo las conexiones tipo *exterior* de forma adecuada en su dominio. Como CTF no posee componentes tipo *exterior*, la definición de los mismos debe realizarse vía archivo de entrada.

La tercera suposición parte del hecho de que todo el dominio simulado en CTF y conectado vía componentes *exterior* con TRACE se asimilar a un solo componente unidimensional. Por ello, todas las variables del dominio CTF deben promediarse tanto en la salida

como en la entrada. Además, la ecuación de la presión para los componentes *exterior* en el dominio simulado con CTF debe reconstruirse mediante estas variables promediadas.

A parte de estas tres suposiciones, queda claro que para realizar adecuadamente la resolución del sistema formado por la unión de los dominios simulados en TRACE y CTF, es necesario implementar un esquema de comunicación entre códigos. En este esquema deben comunicarse las variables necesarias para que la simulación esté sincronizada: tiempo, paso de tiempo actual, variables lógicas para indicar convergencia o necesidad de *backup*, etc. También resulta necesario el intercambio de las variables de estado del fluido y del sólido para reconstruir las ecuaciones de conservación de las celdas contiguas de distintos procesos: variables geométricas, velocidades/caudales, temperaturas, densidades, fracciones de fase, etc.

3.2.3. Esquema de acople

Para poder utilizar el esquema de acople semi-implícito que ofrecen los componentes tipo *exterior* se ha introducido implementar un acople interno. Para ello el código CTF se ha compilado como librería estática que le enlaza al ejecutable del proyecto principal de TRACE. Una vez confeccionado el proyecto de compilación conjunto, se han programado todas las subrutinas y funciones necesarias para que CTF pueda comunicarse internamente con TRACE, intercambiando la información necesaria en cada etapa del proceso del proceso interno de acople. En la

Figura 3.2 se presenta un esquema de la estructura interna del código acoplado TRACE/CTF.

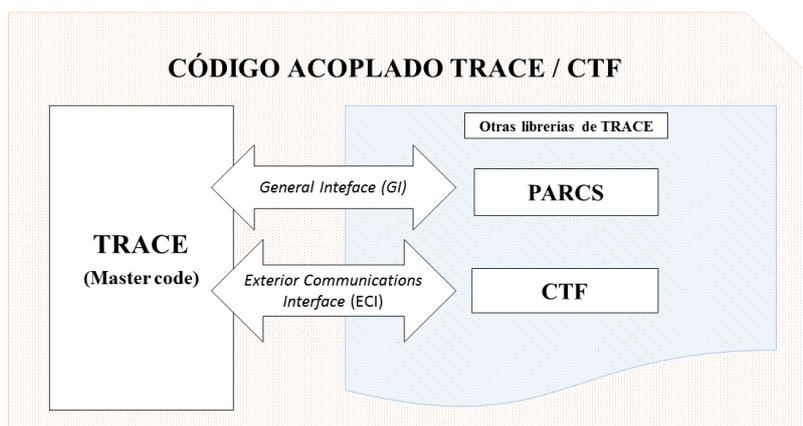


Figura 3.2 Esquema del código acoplado TRACE/CTF.

En el presente apartado se detalla el esquema de acople entre los códigos termohidráulicos TRACE y CTF a través de los componentes *exterior*. También se detallan los puntos de intercambio de información y sincronización entre códigos y las modificaciones introducidas en el archivo de entrada para proporcionar información sobre los componentes *exterior* virtualmente implementados en CTF.

Pasando momentáneamente del plano computacional al plano geométrico o práctico, en la Figura 3.3 se presenta un esquema del acople entre los dominios modelados mediante los códigos termohidráulicos TRACE y CTF. Como puede deducirse de la Figura 3.3, para la ejecución del código acoplado deben construirse dos archivos de entrada, uno para cada código, que representen los dos dominios representados. El dominio modelado con el código TRACE representa todo el sistema que se quiere simular con la excepción del/los componentes/s que se desean analizar con mayor detalle utilizando el código de subcanal CTF, que generalmente será el núcleo del reactor. Ambos dominios están acoplados a través de los componentes *exterior* definidos en ambos códigos, en TRACE dentro del mismo archivo de entrada y en CTF a través del archivo de acople que se detallará en posteriores apartados.

Como puede observarse en la Figura 3.3, físicamente ambos modelos comparten una serie de conexiones especiales denominadas *exterior junctions* sobre las que TRACE resuelve el sistema de Ecuaciones 3.11 planteado anteriormente.

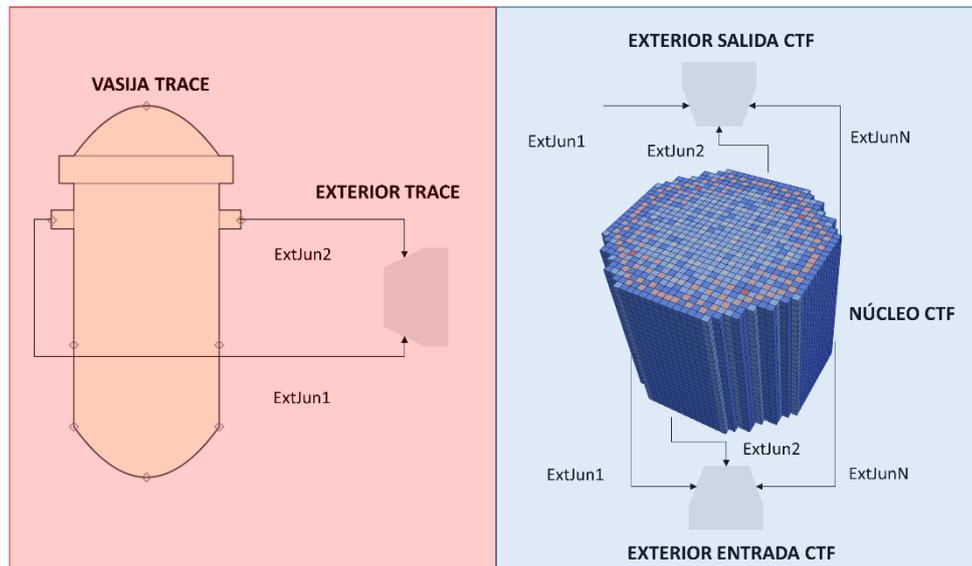


Figura 3.3 Dominios simulados por TRACE y CTF para la metodología desarrollada.

3.2.4. Comunicación y control de ejecución del código acoplado

En este apartado se presenta el esquema de sincronización y comunicación entre los códigos acoplados TRACE y CTF que se ha implementado siguiendo la lógica de los componentes *exterior* en el código TRACE. La lógica de comunicación de los componentes *exterior* dentro del esquema interno de TRACE, junto con los puntos de sincronización entre códigos, se muestran esquemáticamente en la Figura 3.4.

En cada uno de estos puntos de sincronización entre códigos presentados en la Figura 3.4 se ha implementado un intercambio de datos entre TRACE y CTF. Además, gracias al acople interno TRACE puede controlar el avance de CTF posibilitando el avance conjunto de ambos códigos a través de su esquema de resolución de las ecuaciones del fluido para realimentarse adecuadamente.

Todo el intercambio de información y control de avance se realiza a través de un nuevo módulo de rutinas y funciones implementado en CTF. Este módulo de acople también contiene funciones especiales para la promediación de variables. La promediación y pesado de variables resulta necesaria para poder transmitir información entre la malla fina de CTF y la gruesa de TRACE en los puntos de convergencia de ambas. Otro aspecto en el que se ha trabajado es en la programación de funciones para reconstruir variables dependientes no declaradas en cualquiera de los códigos, pero necesarias en el intercambio de información. Por ejemplo, como TRACE trabaja con velocidades y CTF con caudales máscicos, se ha automatizado la conversión entre caudal y velocidad utilizando este tipo de funciones. Igualmente se realiza la conversión de entalpía a temperatura entre ambos códigos utilizando las variables disponibles y las tablas de vapor.

Otro aspecto en el que se ha tenido que trabajar para conseguir que ambos códigos se ejecuten de manera sincronizada es en la modificación del esquema de avance de CTF. Para ello se ha subdividido el esquema interno del código en diferentes módulos que se ejecutan en función del punto de sincronización dictado por el código director TRACE. En la Figura 3.4 se muestra el esquema de avance del código acoplado TRACE/CTF, en este esquema puede apreciarse como ambos códigos avanzan al ritmo marcado por las llamadas vinculadas a los componentes exterior (*ExTransfer*).

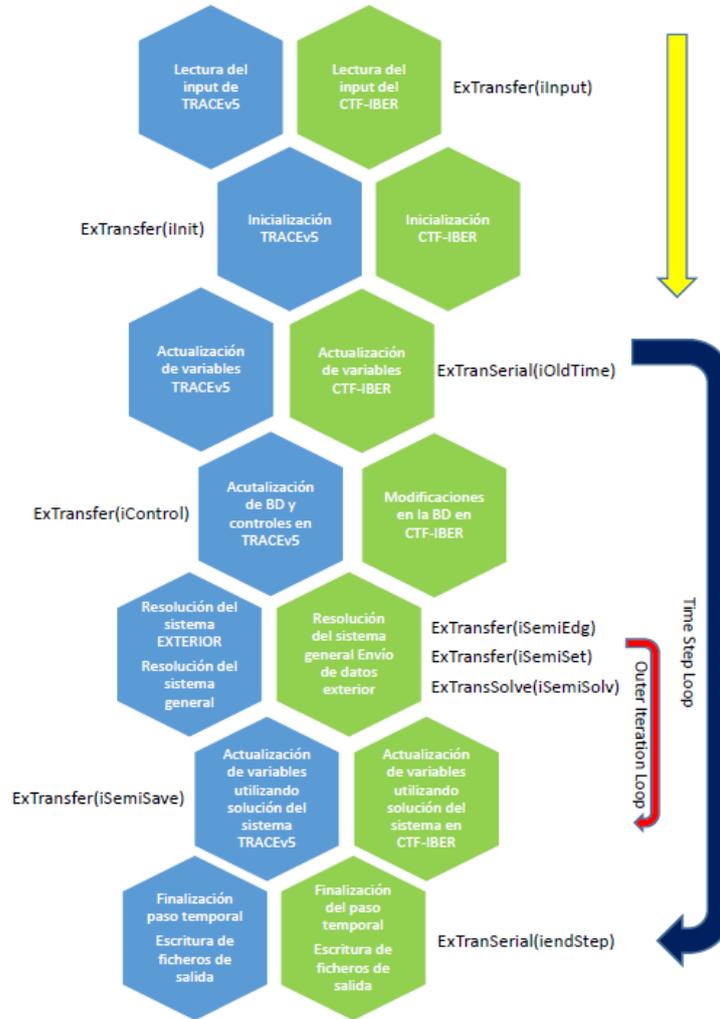


Figura 3.4 Esquema de comunicación y resolución del código acoplado TRACE/CTF.

3.2.5. Intercambio de información entre códigos

En este apartado se analizan las variables intercambiadas para cada unión tipo *exterior* definida en ambos códigos en los diferentes puntos de sincronización e intercambio de datos detallados en el apartado anterior. Por simplicidad se omiten las variables lógicas intercambiadas relativas a señales que intercambian los procesos TRACE cuando funcionan en paralelo. Muchas de estas variables no tienen sentido en este acople con CTF.

3.2.5.1 Punto de sincronización *iInput*

El intercambio de información en el punto de sincronización *iInput* se realiza una sola vez al comienzo de la ejecución. En este punto, una vez finalizada la lectura del archivo de entrada por parte de TRACE, se intercambian información geométrica y valores iniciales relativos a las celdas conectadas mediante uniones tipo exterior en ambos dominios. En la Tabla 3.1 se presenta el intercambio bidireccional de variables entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iInput*.

Tabla 3.1 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iInput*

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
elev	Longitud vertical celda	elev	Longitud vertical celda
dx	Longitud total celda	dx	Longitud total celda
vol	Volumen celda	vol	Volumen celda
fa	Área celda	fa	Área celda
dh	Diámetro hidráulico celda	dh	Diámetro hidráulico celda
type	Tipo de componente	type	Tipo de componente
pn	Presión nominal de referencia	pn	Presión nominal de referencia
grav	Signo de la aceleración gravitacional	grav	Signo de la aceleración gravitacional
---	---	vl	Velocidad inicial líquido
---	---	vv	Velocidad inicial vapor

Como puede observarse en la Tabla 3.1, este punto de sincronización se utiliza para comunicar las dimensiones geométricas de las celdas de la interfaz de los dominios simulados por ambos códigos. Además, CTF solicita las velocidades a TRACE para inicializar ciertos parámetros internos.

3.2.5.2 Punto de sincronización *iInit*

El punto de sincronización *iInit* se realiza una sola vez al comienzo de la ejecución del código acoplado. En este punto se transfieren las variables de estado de ambos subdominios para la inicialización del sistema. En el caso de la transferencia de información de TRACE a CTF, todo el subdominio de CTF se inicializa a las condiciones proporcionadas por TRACE, incluidos los caudales/velocidades, ya que este se encuentra dentro del dominio de TRACE. En la Tabla 3.2 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iInit*.

Tabla 3.2 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iUnit*.

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
alp	Fracción de huecos	alp	Fracción de huecos
alpo	Fracción de huecos tiempo anterior	alpo	Fracción de huecos tiempo anterior
alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo	alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo
rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo	rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo
roln	Densidad del líquido tiempo nuevo	roln	Densidad del líquido tiempo nuevo
pn	Presión tiempo nuevo	pn	Presión tiempo nuevo
tgn	Temperatura vapor tiempo nuevo	tgn	Temperatura vapor tiempo nuevo
tln	Temperatura líquido tiempo nuevo	tln	Temperatura líquido tiempo nuevo
eln	Energía interna del líquido nuevo	eln	Energía interna del líquido nuevo
egn	Energía interna del vapor tiempo nuevo	egn	Energía interna del vapor tiempo nuevo
arvn	Producto densidad por fracción de vapor tiempo nuevo	arvn	Producto densidad por fracción de vapor tiempo nuevo
arln	Producto densidad por fracción de líquido tiempo nuevo	arln	Producto densidad por fracción de líquido tiempo nuevo
areln	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo nuevo	areln	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo nuevo
arevn	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo nuevo	arevn	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo nuevo
aran	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables	aran	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables
concn	Concentración de boro tiempo nuevo	concn	Concentración de boro tiempo nuevo
xgn	Fracción de especies incondensables tiempo nuevo	xgn	Fracción de especies incondensables tiempo nuevo
dpx	Derivada de la velocidad respecto a la longitud de la celda	dpx	Derivada de la velocidad respecto a la longitud de la celda
---	---	vln	Velocidad del líquido tiempo nuevo
---	---	vvn	Velocidad del vapor tiempo nuevo

Este punto de sincronización se utiliza para comunicar las variables generales del fluido, que serán utilizadas para inicializar los valores en las caras de las celdas interconectadas de ambos dominios y variables promediadas entre celdas adyacentes. Además, CTF solicita las velocidades a TRACE para inicializar su propio campo de velocidades al valor definido en TRACE.

3.2.5.3 Punto de sincronización *iOldTime*

El punto de sincronización *iOldTime* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.3 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iOldTime*.

Tabla 3.3 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iOldTime*.

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
rom	Densidad de la mezcla, pesada con las fracciones de líquido y vapor.	rom	Densidad de la mezcla, pesada con las fracciones de líquido y vapor.
alp	Fracción de huecos tiempo anterior	alp	Fracción de huecos tiempo anterior
rog	Densidad del vapor tiempo anterior	rog	Densidad del vapor tiempo anterior
rol	Densidad del líquido tiempo anterior	rol	Densidad del líquido tiempo anterior
p	Presión tiempo anterior	p	Presión tiempo anterior
sig	Tensión superficial	sig	Tensión superficial
visv	Viscosidad del vapor tiempo anterior	visv	Viscosidad del vapor tiempo anterior
visl	Viscosidad del líquido tiempo anterior	visl	Viscosidad del líquido tiempo anterior
roa	Densidad de los incondensables	roa	Densidad de los incondensables
arv	Producto densidad por fracción de vapor tiempo anterior	arv	Producto densidad por fracción de vapor tiempo anterior
arl	Producto densidad por fracción de líquido tiempo anterior	arl	Producto densidad por fracción de líquido tiempo anterior
arev	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo anterior	arev	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo anterior
arel	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo anterior	arel	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo anterior

alpo	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo anterior	alpo	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo anterior
ara	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables tiempo anterior	ara	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables tiempo anterior
pa	Presión parcial incondensables tiempo anterior	pa	Presión parcial incondensables tiempo anterior
cl	Conductividad del líquido tiempo anterior	cl	Conductividad del líquido tiempo anterior
cv	Conductividad del vapor tiempo anterior	cv	Conductividad del vapor tiempo anterior
gam	Tasa de generación de vapor tiempo anterior	gam	Tasa de generación de vapor tiempo anterior
rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo	rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo
roln	Densidad del líquido tiempo nuevo	roln	Densidad del líquido tiempo nuevo
alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo	alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo
pn	Presión tiempo nuevo	pn	Presión tiempo nuevo
xg	Fracción de especies incondensables tiempo anterior	xg	Fracción de especies incondensables tiempo anterior
tgn	Temperatura vapor tiempo nuevo	tgn	Temperatura vapor tiempo nuevo
tln	Temperatura líquido tiempo nuevo	tln	Temperatura líquido tiempo nuevo
hgam	Transferencia de calor asociada a la evaporación/condensación	hgam	Transferencia de calor asociada a la evaporación/condensación
hls	Entalpía del líquido a temperatura de saturación	hls	Entalpía del líquido a temperatura de saturación
hvs	Entalpía del vapor a temperatura de saturación	hvs	Entalpía del vapor a temperatura de saturación
vlto	Velocidad tentativa del líquido (linealización Ecuación Momento)	vlto	Velocidad tentativa del líquido (linealización Ecuación Momento)
vvto	Velocidad tentativa del vapor (linealización Ecuación Momento)	vvto	Velocidad tentativa del vapor (linealización Ecuación Momento)
vl	Velocidad del vapor tiempo anterior	vl	Velocidad del vapor tiempo anterior

vv	Velocidad del vapor tiempo anterior	vv	Velocidad del vapor tiempo anterior
delt	Tamaño de paso de tiempo seleccionado en CTF	deltCentral	Tamaño de paso de tiempo finalmente adoptado.

Como puede observarse en la Tabla 3.3, en este punto de sincronización se comunican la mayor parte de las variables tanto en tiempo nuevo como tiempo anterior. Estas variables comunicadas se utilizan para realizar la linealización de la ecuación del momento, así como la construcción de la matriz Jacobiana de celda.

3.2.5.4 Punto de sincronización *iControl*

El punto de sincronización *iControl* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.4 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iControl*.

Tabla 3.4 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iControl*.

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
vlto	Velocidad tentativa del líquido (linealización Ecuación Momento)	vlto	Velocidad tentativa del líquido (linealización Ecuación Momento)
vvto	Velocidad tentativa del vapor (linealización Ecuación Momento)	vvto	Velocidad tentativa del vapor (linealización Ecuación Momento)

Este punto de sincronización se utiliza como control de los términos tentativos de velocidad (o caudal) calculados a partir de la corrección de presiones realizadas, es decir, el valor de la velocidad sustituyendo el valor tentativo de presión utilizado (presión inicial/referencia para el primer paso de tiempo o presión del paso de tiempo anterior para el resto de pasos de tiempo).

3.2.5.5 Punto de sincronización *iSemiEdg*

El punto de sincronización *iSemiEdg* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.5 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iSemiEdg*.

Tabla 3.5 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iSemiEdg*.

Desde TRACE a CTF	
vvn	Velocidad del líquido tiempo nuevo
vln	Velocidad del vapor tiempo nuevo
dfldp	Derivada del caudal de líquido respecto de la presión
dfvdp	Derivada del caudal de vapor respecto de la presión

Este punto de sincronización se utiliza para corregir en CTF las velocidades una vez resuelto el sistema de presiones y corregida la presión en la celda según el dp calculado por TRACE.

3.2.5.6 Punto de sincronización *iSemiSolv*

El punto de sincronización *iSemiSolv* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.6 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iSemiSolv*.

Tabla 3.6 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iSemiSolv*.

Desde CTF a TRACE	
dpS	dp_{iCTF} de cada unión tipo exterior de CTF. Valor calculado corrector de la presión para el componente exterior en el subdominio de CTF.
dpCoef	$a_{iCTF,1}$ asociado a cada unión tipo exterior incluida en el componente tipo exterior inferior del dominio de CTF. Valor del coeficiente asociado al cálculo del factor de corrección de la presión del componente exterior inferior de CTF.
dpCoef	$a_{iCTF,2}$ asociado a cada unión tipo exterior incluida en el componente tipo exterior superior del dominio de CTF. Valor del coeficiente asociado al cálculo del factor de corrección de la presión del componente exterior superior de CTF.

En este punto de sincronización se envían a TRACE las variaciones de presión en las uniones tipo *exterior* calculadas por CTF y los coeficientes de la matriz asociados a las celdas que presentan estas uniones. Con estas variables TRACE puede resolver el sistema de ecuaciones general de los componentes exterior y corregir sus propias presiones.

3.2.5.7 Punto de sincronización *iSemiSave*

El punto de sincronización *iSemiSave* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.7 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iSemiSave*.

Tabla 3.7 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iSemiSave*.

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo	alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo
rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo	rogn	Densidad del vapor tiempo nuevo
roln	Densidad del líquido tiempo nuevo	roln	Densidad del líquido tiempo nuevo
pn	Presión tiempo nuevo	pn	Presión tiempo nuevo
tgn	Temperatura del vapor tiempo nuevo	tgn	Temperatura del vapor tiempo nuevo
tlm	Temperatura del líquido tiempo nuevo	tlm	Temperatura del líquido tiempo nuevo
eln	Energía interna del líquido tiempo nuevo	eln	Energía interna del líquido tiempo nuevo
egn	Energía interna del vapor tiempo nuevo	egn	Energía interna del vapor tiempo nuevo
---	---	vvn	Velocidad del vapor tiempo nuevo
---	---	vln	Velocidad del vapor tiempo nuevo

En este punto de sincronización, TRACE vuelve a actualizar las principales variables del sistema con los términos correctores asociados a los componentes tipo *exterior*, y envía a CTF las variables en el paso de tiempo actual para que actualice sus ecuaciones generales.

3.2.5.8 Punto de sincronización *iConduct*

El punto de sincronización *iConduct* se efectúa cada paso de tiempo. En la Tabla 3.8 se presentan las variables intercambiadas entre los códigos TRACE y CTF para el punto de sincronización *iConduct*.

Tabla 3.8 Variables intercambiadas en TRACE/CTF en el punto de sincronización *iConduct*.

Desde CTF a TRACE		Desde TRACE a CTF	
alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo	alpn	Fracción de huecos tiempo nuevo
arvn	Producto densidad por fracción de vapor tiempo nuevo	arvn	Producto densidad por fracción de vapor tiempo nuevo
arln	Producto densidad por fracción de líquido tiempo nuevo	arln	Producto densidad por fracción de líquido tiempo nuevo
areln	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo nuevo	areln	Producto densidad, fracción y energía interna del líquido tiempo nuevo
arevn	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo nuevo	arevn	Producto densidad, fracción y energía interna del vapor tiempo nuevo
aran	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables	aran	Producto densidad, fracción y energía interna incondensables
concn	Concentración de boro tiempo nuevo	concn	Concentración de boro tiempo nuevo
xgn	Fracciones de gases incondensables tiempo nuevo	xgn	Fracciones de gases incondensables tiempo nuevo

Como puede observarse en la Tabla 3.8, en este punto de sincronización se comunican las variables relativas a la solución de la ecuación de conservación de la energía y el transporte de boro y gases incondensables.

3.2.6. Resolución de las ecuaciones acopladas del fluido

En este apartado se desarrollan las ecuaciones de acople entre ambos códigos termohidráulicos y su resolución siguiendo el método semi-implícito de los componentes *exterior* de TRACE. En anteriores apartados se ha comentado la naturaleza de cada código respecto a las ecuaciones que utilizan para resolver las ecuaciones de conservación del fluido. En este apartado se profundiza respecto de la discretización de dichas ecuaciones y la formación de la matriz de presión en el subdominio simulado por cada código.

Antes de comenzar a plantear las ecuaciones de conservación del fluido en los nodos del mallado donde se solapan las mallas de TRACE y CTF, hay que plantear el tipo de situaciones que se pueden dar en el acople de los mencionados subdominios. Lo habitual es que el código CTF simule un subdominio compuesto por elementos combustibles nucleares contando con la posibilidad de incluir el bypass del núcleo cuando se modela un reactor tipo PWR. El núcleo modelado por CTF se debe conectar axialmente al componente *vessel* cilíndrica de TRACE, y esta conexión se hace de manera directa o a través de componentes *pipe* que sirven de puente entre el núcleo de CTF y la vasija de TRACE.

Estas tuberías intermedias son utilizadas para modelar las placas superior e inferior del núcleo.

En cualquier caso, tanto si se conecta directamente o a través de tuberías intermedias, la malla utilizada para la discretización del dominio de CTF es más fina (o al menos igual) que la utilizada en dicho punto de conexión por TRACE. En las Figura 3.5 se presenta, de forma esquemática, el solapamiento entre la mallas de continuidad (escalar) y cantidad de movimiento (vectorial) en el caso de que las mallas de ambos códigos sean axialmente equivalentes. Por el contrario, en la Figura 3.6 se presenta un esquema de las mallas cuando la equivalencia axial es 1:n entre la malla de TRACE y la de CTF. Cabe notar que los esquemas presentados representan el acople a la salida del núcleo, ya que el dominio simulado por TRACE está sobre el de CTF. En la entrada del núcleo el esquema sería el contrario (girar 180° sobre el eje saliente del papel), el dominio de CTF quedaría por encima del de TRACE.

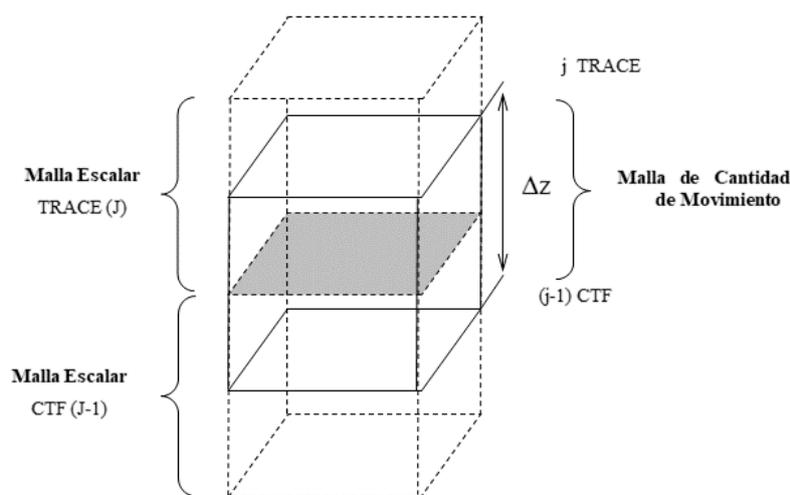


Figura 3.5 Esquema del mallado 1:1 entre subdominios de TRACE y CTF

Como se observa en la Figura 3.5 y Figura 3.6 las mallas de ambos códigos se solapan en el centro de una celda de la malla de cantidad de movimiento de ambos códigos (y por tanto entre las caras de la malla de conservación). El transporte de variables y cantidades a través de la interfaz de las mallas de ambos códigos se realiza a través de las uniones tipo *exterior* definidas dentro de los componentes *exterior* conectados en este punto de la malla. Para que el acople funcione correctamente debe asegurarse la conservación de masa, momento y energía en los puntos de interconexión de mallas.

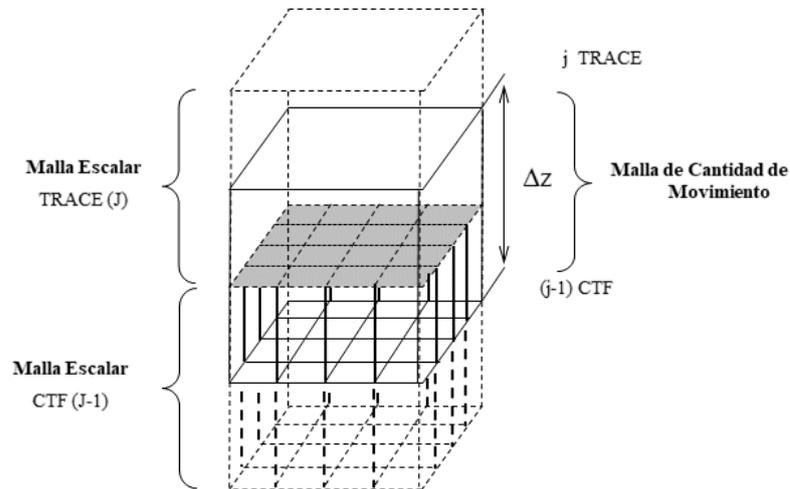


Figura 3.6 Esquema del mado 1:16 entre subdominios de TRACE y CTF

Una vez analizadas las distintas situaciones que se pueden dar en el acople entre TRACE y CTF, se realiza una resolución de las ecuaciones de acople para un caso de ejemplo. En el ejemplo desarrollado la malla de CTF es 4 veces más fina que la de TRACE. Como se ha mencionado con anterioridad el acople se realiza en la dirección axial del fluido (eje z). Se plantea un acople análogo al de la Figura 3.7, en el que el dominio simulado por CTF (azul) está conectado por encima y abajo con el dominio de TRACE (naranja).

Por simplicidad en los desarrollos matemáticos se realiza el acople para fluido monofásico. No obstante, los desarrollos aquí planteados pueden extenderse a fluidos multifásicos. Además, se considera que el dominio de CTF es tridimensional y el de TRACE es unidimensional en el punto de acople, por lo que no hay transmisión de momento entre los subdominios por velocidades transversales.

En el desarrollo presentado se hace referencia a los puntos de sincronización en los que se efectúan los intercambios de información durante la resolución conjunta de las ecuaciones de conservación del fluido. Hay que tener en cuenta que el problema ejemplo resuelto en el presente apartado debe ilustrar el funcionamiento del código acoplado.

En el desarrollo presentado se parte del comienzo de la iteración externa del código acoplado. Con anterioridad al punto de sincronización *iControl* ambos códigos calculan las velocidades/caudales máxicos tentativos utilizando el campo de presiones tentativo en las ecuaciones de conservación de la cantidad de movimiento. En este punto los códigos intercambian valores de velocidad tentativa y comienzan la solución del sistema no lineal

acoplado mediante la iteración por el método de Newton-Raphson. Para, una vez sustituidos los valores tentativos de caudal (o velocidad), comenzar la derivación las ecuaciones de conservación de la masa y energía en función de cada una de las variables independientes.

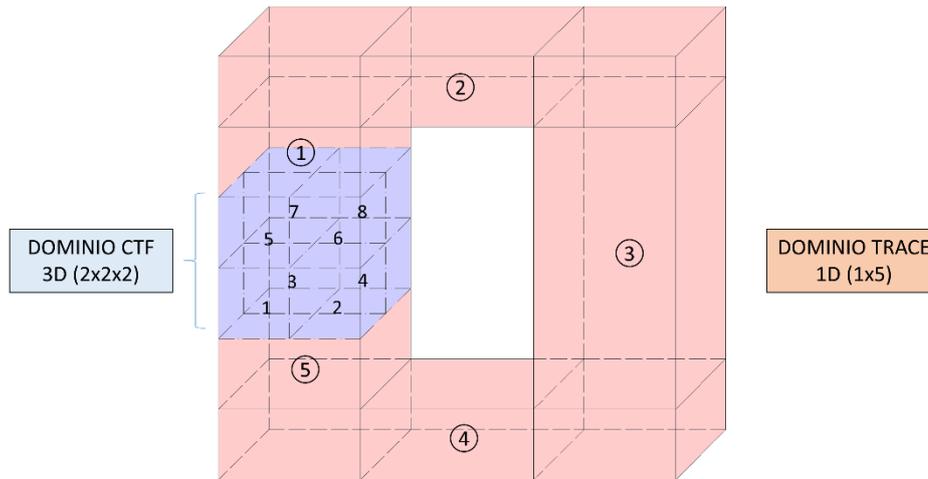


Figura 3.7 Nodalización TRACE/CTF en el ejemplo de acople desarrollado.

En el ejemplo analizado se comienza planteando las *ecuaciones de conservación de la masa para el líquido* para cada uno de los elementos de la malla del dominio simulado en CTF. Por claridad en los desarrollos se escribe la ecuación de conservación de la masa para cada celda en forma de función de las variables independientes. En el dominio de CTF se obtiene un sistema de ecuaciones de masa como el representado en la Ecuación 3.12.

$$\begin{aligned}
 M_{1,l}(\alpha_{1,l}, \alpha_{1,l}h_{1,l}, p_{C1}, p_{C2}, p_{C3}, p_{C5}, p_{T5}) &= 0 \\
 M_{2,l}(\alpha_{2,l}, \alpha_{2,l}h_{2,l}, p_{C2}, p_{C1}, p_{C4}, p_{C6}, p_{T5}) &= 0 \\
 M_{3,l}(\alpha_{3,l}, \alpha_{3,l}h_{3,l}, p_{C3}, p_{C1}, p_{C4}, p_{C7}, p_{T5}) &= 0 \\
 M_{4,l}(\alpha_{4,l}, \alpha_{4,l}h_{4,l}, p_{C4}, p_{C2}, p_{C3}, p_{C8}, p_{T5}) &= 0 \\
 M_{5,l}(\alpha_{5,l}, \alpha_{5,l}h_{5,l}, p_{C5}, p_{C1}, p_{C6}, p_{C7}, p_{T1}) &= 0 \\
 M_{6,l}(\alpha_{6,l}, \alpha_{6,l}h_{6,l}, p_{C6}, p_{C2}, p_{C5}, p_{C8}, p_{T1}) &= 0 \\
 M_{7,l}(\alpha_{7,l}, \alpha_{7,l}h_{7,l}, p_{C7}, p_{C3}, p_{C5}, p_{C8}, p_{T1}) &= 0 \\
 M_{8,l}(\alpha_{8,l}, \alpha_{8,l}h_{8,l}, p_{C8}, p_{C4}, p_{C6}, p_{C7}, p_{T1}) &= 0
 \end{aligned}$$

Ecuación 3.12

Los términos de presión resaltados en rojo p_{Ci} corresponden a la presión en las celdas vecinas del dominio de CTF, mientras que la resaltada en azul p_{Ti} corresponden con la presión de la celda vecina de dominio de TRACE. Resulta evidente la relación existente entre los términos coloreados en azul y los componentes tipo *exterior*.

De manera análoga se realiza el mismo procedimiento con la *ecuación de conservación de la energía para el líquido* (Ecuación 3.13).

$$\begin{aligned}
 E_{1,l}(\alpha_{1,l}, \alpha_{1,l}h_{1,l}, p_{C1}, p_{C2}, p_{C3}, p_{C5}, p_{T5}) &= 0 \\
 E_{2,l}(\alpha_{2,l}, \alpha_{2,l}h_{2,l}, p_{C2}, p_{C1}, p_{C4}, p_{C6}, p_{T5}) &= 0 \\
 E_{3,l}(\alpha_{3,l}, \alpha_{3,l}h_{3,l}, p_{C3}, p_{C1}, p_{C4}, p_{C7}, p_{T5}) &= 0 \\
 E_{4,l}(\alpha_{4,l}, \alpha_{4,l}h_{4,l}, p_{C4}, p_{C2}, p_{C3}, p_{C8}, p_{T5}) &= 0 \\
 E_{5,l}(\alpha_{5,l}, \alpha_{5,l}h_{5,l}, p_{C5}, p_{C1}, p_{C6}, p_{C7}, p_{T1}) &= 0 \\
 E_{6,l}(\alpha_{6,l}, \alpha_{6,l}h_{6,l}, p_{C6}, p_{C2}, p_{C5}, p_{C8}, p_{T1}) &= 0 \\
 E_{7,l}(\alpha_{7,l}, \alpha_{7,l}h_{7,l}, p_{C7}, p_{C3}, p_{C5}, p_{C8}, p_{T1}) &= 0 \\
 E_{8,l}(\alpha_{8,l}, \alpha_{8,l}h_{8,l}, p_{C8}, p_{C4}, p_{C6}, p_{C7}, p_{T1}) &= 0
 \end{aligned}$$

Ecuación 3.13

Análogamente, los términos de presión que se resaltan en rojo p_{Ci} corresponden a la presión en las celdas vecinas del dominio de CTF, mientras que la resaltada en azul p_{Ti} corresponden con la presión de la celda vecina de dominio de TRACE.

Con cada par de ecuaciones (masa y energía) y para cada una de las celdas $i = 1, \dots, 8$ del dominio simulado por CTF se puede construir la matriz Jacobiana de celda mediante la derivación de dichas ecuaciones en función de cada una de las variables independientes. De forma general para el ejemplo presentado y para una celda i , la matriz Jacobiana viene dada por la Ecuación 3.14.

$$D\vec{f}(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial M_i}{\partial \alpha_i} & \frac{\partial M_i}{\partial \alpha_i h_i} & \frac{\partial M_i}{\partial p_i} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_1}} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_2}} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_3}} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_4}} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_5}} & \frac{\partial M_i}{\partial p_{nc_6}} \\ \frac{\partial E_i}{\partial \alpha_i} & \frac{\partial E_i}{\partial \alpha_i h_i} & \frac{\partial E_i}{\partial p_i} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_1}} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_2}} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_3}} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_4}} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_5}} & \frac{\partial E_i}{\partial p_{nc_6}} \end{bmatrix}$$

Ecuación 3.14

Los subíndices nc_i representan cada una de las caras del volumen de control. En este caso por ser un hexaedro son 6 caras. Sin embargo, como en el caso analizado es posible que alguna de ellas sea frontera del dominio y por tanto no esté conectada a otro elemento de la malla.

Por ejemplo, si se aplican las derivadas parciales a la celda 1, se obtiene su matriz Jacobiana de dicha celda en la Ecuación 3.15.

$$D\vec{f}_1(\vec{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial M_1}{\partial \alpha_1 h_1} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c1}} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c2}} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c3}} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{c5}} & \frac{\partial M_1}{\partial p_{T5}} \\ \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_1} & \frac{\partial E_1}{\partial \alpha_1 h_1} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c1}} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c2}} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c3}} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{c5}} & \frac{\partial E_1}{\partial p_{T5}} \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.15}$$

En este punto del cálculo se realiza la reducción de la matriz, si las filas de ésta no son completas respecto a los términos de presión. Una vez reducida se toma la fila inferior de cada una de ellas obteniendo un conjunto de ecuaciones algebraicas de la forma presentada en la Ecuación 3.16.

$$a_{i,i} dp_{Ci} = b_i + \sum_{c=1}^{nc} a_{i,i+c} dp_c \quad \text{Ecuación 3.16}$$

Donde dp_c representa los incrementos de presión en las caras, pudiendo pertenecer tanto al dominio de CTF como al de TRACE. De nuevo como ejemplo, aplicando este razonamiento a la celda 1, se obtiene la ecuación algebraica escrita en la Ecuación 3.17.

$$a_{1,1} dp_1 = b_1 + a_{1,2} dp_2 + a_{1,3} dp_3 + a_{1,5} dp_5 + a_{1,T5} dp_{T5} \quad \text{Ecuación 3.17}$$

Análogamente se obtienen las demás ecuaciones algebraicas para cada celda a partir de la última fila del Jacobiano reducido. Con las ecuaciones algebraicas de todas las celdas se puede formar la matriz de presiones del dominio simulado por CTF (Ecuación 3.18). Pero como puede apreciarse en la Ecuación 3.18, la matriz de presiones del CTF no tiene espacio para incluir los términos que dependen de los volúmenes colindantes del dominio de TRACE, estos son $a_{1,T5} dp_{T5}$, $a_{2,T5} dp_{T5}$, $a_{3,T5} dp_{T5}$, $a_{4,T5} dp_{T5}$ por la parte inferior y $a_{5,T1} dp_{T1}$, $a_{6,T1} dp_{T1}$, $a_{7,T1} dp_{T7}$, $a_{8,T1} dp_{T8}$ por la parte superior.

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & 0 & a_{1,5} & 0 & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & 0 & a_{2,4} & 0 & a_{2,6} & 0 & 0 \\ a_{3,1} & 0 & a_{3,3} & a_{3,4} & 0 & 0 & a_{3,7} & 0 \\ 0 & a_{4,2} & a_{4,3} & a_{4,4} & 0 & 0 & 0 & a_{4,8} \\ a_{5,1} & 0 & 0 & 0 & a_{5,5} & a_{5,6} & a_{5,7} & 0 \\ 0 & a_{6,2} & 0 & 0 & a_{6,5} & a_{6,6} & 0 & a_{6,8} \\ 0 & 0 & a_{7,3} & 0 & a_{7,5} & 0 & a_{7,7} & a_{7,8} \\ 0 & 0 & 0 & a_{8,4} & 0 & a_{8,6} & a_{8,7} & a_{8,8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ dp_3 \\ dp_4 \\ dp_5 \\ dp_6 \\ dp_7 \\ dp_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \\ b_7 \\ b_8 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.18}$$

Este aspecto se solventa aplicando la Ecuación 3.4, presentada con anterioridad durante la exposición general del método de los componentes exterior desarrollado en TRACE. Si se asimila el sistema matricial de la Ecuación a la ecuación matricial $A \cdot dp = b$. Se

puede escribir en función de las conexiones inferior y superior al dominio de TRACE la Ecuación 3.19.

$$A_C \cdot dp_C = b_C - \sum_{T=1}^{nt} a_{i,Tnt} \cdot dp_T \quad \text{Ecuación 3.19}$$

Donde nt representa el número total de conexiones entre CTF y TRACE, el coeficiente $a_{i,Tnt}$ es el término que acompaña a dp_T en la ecuación algebraica de la última fila del Jacobiano reducido de la celda i en el dominio de CTF. Realizando el desarrollo en el esquema de la Figura 3.7 tomada como ejemplo se llega a la Ecuación 3.20.

$$A_C \cdot dp_C = b_C - \left(a_{1,T5} \cdot dp_{T5} + a_{2,T5} \cdot dp_{T5} + a_{3,T5} \cdot dp_{T5} + a_{4,T5} \cdot dp_{T5} \right) - \left(a_{5,T1} \cdot dp_{T1} + a_{6,T1} \cdot dp_{T1} + a_{7,T1} \cdot dp_{T1} + a_{8,T1} \cdot dp_{T1} \right) \quad \text{Ecuación 3.20}$$

En la Ecuación 3.20 coeficientes $a_{i,T5}$ y $a_{i,T1}$ representan los coeficientes obtenidos durante la derivación de las celdas i del dominio de CTF ($i=1, \dots, 8$) y que a su vez dependen de la presión de la celda limitante en el dominio de TRACE (ver Ecuaciones 3.17 y 3.18). Los subíndices $T1$ y $T5$ corresponden con las celdas 1 y 5 utilizando la numeración local del dominio de TRACE.

Realizando un desarrollo análogo en el dominio de TRACE se plantea la matriz de presiones local de dicho dominio. Como puede apreciarse, no existe espacio para la interconexión de ambos dominios en la matriz obtenida (Ecuación 3.21).

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & 0 \\ 0 & 0 & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ 0 & 0 & 0 & a_{5,4} & a_{5,5} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} dp_1 \\ dp_2 \\ dp_3 \\ dp_4 \\ dp_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \end{bmatrix} \quad \text{Ecuación 3.21}$$

En el dominio de TRACE se debe tener el mismo número de términos correctores de presiones que los que había en CTF. Este número corresponde con el número de uniones tipo exterior que se deben definir en el archivo de entrada del código. En este caso se denomina como dp_{Ci} a los términos de presión del dominio de CTF adyacente a TRACE, y $a_{i,Cnc}$ a los coeficientes asociados a los términos de presión obtenidos durante la construcción del Jacobiano de celda de TRACE.

Aplicando esta nomenclatura se tienen en la entrada al dominio de TRACE (celda 1) los pares $a_{1,C5} dp_{C5}$, $a_{1,C6} dp_{C6}$, $a_{1,C7} dp_{C7}$ y $a_{1,C8} dp_{C8}$ y en la salida de TRACE (celda 5), en la parte inferior del esquema de la Figura 3.7, los términos $a_{5,C1} dp_{C1}$, $a_{5,C2} dp_{C2}$, $a_{5,C3} dp_{C3}$ y $a_{5,C4} dp_{C4}$.

Por tanto, presentando la ecuación de la presión en forma algebraica y sustrayendo los términos correctores de presión se llega a la Ecuación 3.22.

$$A_T \cdot dp_T = b_T - \left(a_{1,C5} \cdot dp_{C5} + a_{1,C6} \cdot dp_{C6} + a_{1,C7} \cdot dp_{C7} + a_{1,C8} \cdot dp_{C8} \right) - \left(a_{5,C1} \cdot dp_{C1} + a_{5,C2} \cdot dp_{C2} + a_{5,C3} \cdot dp_{C3} + a_{5,C4} \cdot dp_{C4} \right) \quad \text{Ecuación 3.22}$$

En este punto del algoritmo de acople, los sistemas lineales que conforman la matriz de presiones (sin términos correctores) de CTF $A_C \cdot dp_C = b_C$ y de TRACE $A_T \cdot dp_T = b_T$ se resuelven obteniendo los valores de dp_i^0 para todo el dominio local de ambos códigos. Una vez obtenida la solución local, cada código forma las ecuaciones correctoras de presión en función de las uniones de ambos dominios vía los componentes *exterior*. La Ecuación 3.23 es la planteada en CTF para corregir los valores locales de presión en función de la presión en las celdas adyacentes de TRACE y la Ecuación 3.24 representa lo propio en TRACE.

$$dp_{Ci} = dp_{Ci}^0 - \left(a_{1,T5} + a_{2,T5} + a_{3,T5} + a_{4,T5} \right) \cdot dp_{T5} - \left(a_{5,T1} + a_{6,T1} + a_{7,T1} + a_{8,T1} \right) \cdot dp_{T1} \quad \text{Ecuación 3.23}$$

$$dp_{Ti} = dp_{Ti}^0 - \left(a_{1,C5} \cdot dp_{C5} + a_{1,C6} \cdot dp_{C6} + a_{1,C7} \cdot dp_{C7} + a_{1,C8} \cdot dp_{C8} \right) - \left(a_{5,C1} \cdot dp_{C1} + a_{5,C2} \cdot dp_{C2} + a_{5,C3} \cdot dp_{C3} + a_{5,C4} \cdot dp_{C4} \right) \quad \text{Ecuación 3.24}$$

Llega el momento de realizar el procedimiento de resolución conjunta de los términos correctores en las uniones tipo *exterior*. Para ello los valores dp_{Ci}^0 y $a_{i,Tnc}$ que ha calculado CTF se comunican a TRACE en el punto de sincronización *iSemiSolv*. Como se ha comentado anteriormente TRACE es el código encargado de resolver la ecuación de los componentes *exterior* para obtener los términos correctores de presiones (dp_{Ci} y dp_{Ti}).

En la segunda parte del proceso, que tiene lugar en TRACE, se generan las ecuaciones reducidas a cada conexión adyacente de cada subdominio para su resolución de forma conjunta. En el caso del dominio de CTF hay 8 ecuaciones algebraicas (Ecuación 3.25) que relacionan las presiones de celdas de nodos vecinos de TRACE, ya que existen 8 celdas que limitan con el dominio de TRACE. En el caso del dominio de TRACE, por el mismo motivo existen 2 ecuaciones algebraicas (Ecuación 3.26). En este punto cabe mencionar que las ecuaciones algebraicas del dominio tridimensional de CTF se construyen como si fueran subcanales axiales independientes y no se tiene en cuenta en las mismas las interconexiones que pueden existir (Ecuación 3.25). Es decir, la ecuación algebraica del subcanal formado por la celda 1 y 5 del dominio de CTF se escriben únicamente en función de los coeficientes $a_{1,T5}$ y $a_{5,T5}$ de estas celdas.

$$\begin{aligned}
dp_{C1} &= dp_{C1}^0 - a_{1,T5} \cdot dp_{T5} - a_{5,T1} \cdot dp_{T1} \\
dp_{C2} &= dp_{C2}^0 - a_{2,T5} \cdot dp_{T5} - a_{6,T1} \cdot dp_{T1} \\
dp_{C3} &= dp_{C3}^0 - a_{3,T5} \cdot dp_{T5} - a_{7,T1} \cdot dp_{T1} \\
dp_{C4} &= dp_{C4}^0 - a_{4,T5} \cdot dp_{T5} - a_{8,T1} \cdot dp_{T1} \\
dp_{C5} &= dp_{C5}^0 - a_{5,T1} \cdot dp_{T1} - a_{1,T5} \cdot dp_{T5} \\
dp_{C6} &= dp_{C6}^0 - a_{6,T1} \cdot dp_{T1} - a_{2,T5} \cdot dp_{T5} \\
dp_{C7} &= dp_{C7}^0 - a_{7,T1} \cdot dp_{T1} - a_{3,T5} \cdot dp_{T5} \\
dp_{C8} &= dp_{C8}^0 - a_{8,T1} \cdot dp_{T1} - a_{4,T5} \cdot dp_{T5}
\end{aligned}$$

Ecuación 3.25

Por el contrario, la ecuación de la presión en las uniones tipo exterior en TRACE se escribe en función de todas las celdas de interconexión entre ambos dominios (Ecuación 3.26).

$$\begin{aligned}
dp_{T1} &= dp_{T1}^0 - (a_{1,C5} \cdot dp_{C5} + a_{1,C6} \cdot dp_{C6} + a_{1,C7} \cdot dp_{C7} + a_{1,C8} \cdot dp_{C8}) \\
&\quad - (a_{5,C1} \cdot dp_{C1} + a_{5,C2} \cdot dp_{C2} + a_{5,C3} \cdot dp_{C3} + a_{5,C4} \cdot dp_{C4}) \\
dp_{T5} &= dp_{T5}^0 - (a_{1,C5} \cdot dp_{C5} + a_{1,C6} \cdot dp_{C6} + a_{1,C7} \cdot dp_{C7} + a_{1,C8} \cdot dp_{C8}) \\
&\quad - (a_{5,C1} \cdot dp_{C1} + a_{5,C2} \cdot dp_{C2} + a_{5,C3} \cdot dp_{C3} + a_{5,C4} \cdot dp_{C4})
\end{aligned}$$

Ecuación 3.26

El sistema de ecuaciones vinculadas con los elementos de la malla de los dominios adyacentes en el código acoplado (Ecuación 3.25 y Ecuación 3.26) puede escribirse en forma matricial. Donde las únicas incógnitas son los términos de presión vinculados a los dominios de CTF (dp_{C_i}) y TRACE (dp_{T_i}). Los valores de $dp_{C_i}^0$ y $dp_{T_i}^0$ son conocidos gracias a la solución general de la matriz de presiones asociada a cada dominio por separado.

$$\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{5,T1} & a_{1,T5} \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{6,T1} & a_{2,T5} \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{7,T1} & a_{3,T5} \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{8,T1} & a_{4,T5} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & a_{5,T1} & a_{1,T5} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & a_{6,T1} & a_{2,T5} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & a_{7,T1} & a_{3,T5} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & a_{8,T1} & a_{4,T5} \\
a_{5,C1} & a_{5,C2} & a_{5,C3} & a_{5,C4} & a_{1,C5} & a_{1,C6} & a_{1,C7} & a_{1,C8} & 1 & 0 \\
a_{5,C1} & a_{5,C2} & a_{5,C3} & a_{5,C4} & a_{1,C5} & a_{1,C6} & a_{1,C7} & a_{1,C8} & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
dp_{C1} \\
dp_{C2} \\
dp_{C3} \\
dp_{C4} \\
dp_{C5} \\
dp_{C6} \\
dp_{C7} \\
dp_{C8} \\
dp_{T1} \\
dp_{T5}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
dp_{C1}^0 \\
dp_{C2}^0 \\
dp_{C3}^0 \\
dp_{C4}^0 \\
dp_{C5}^0 \\
dp_{C6}^0 \\
dp_{C7}^0 \\
dp_{C8}^0 \\
dp_{T1}^0 \\
dp_{T5}^0
\end{bmatrix}$$

Ecuación 3.27

El sistema de Ecuación 3.27 se resuelve en el proceso principal, y los valores finales de los términos correctores de presiones de CTF dp_{C_i} se transmiten de nuevo a dicho código en el punto de comunicación *iSemiSave*. En una última etapa de sustitución, ambos códigos generan todos los valores (de celda) de variación de presión local utilizando funciones de la forma dada en las Ecuaciones 3.28 y 3.29.

$$dp_{C_i} = dp_{C_i}^0 - \sum_{c=1}^{nc} a_{i,Tc} \cdot dp_{Tc} \quad \text{Ecuación 3.28}$$

$$dp_{T_i} = dp_{T_i}^0 - \sum_{c=1}^{nc} a_{i,Cc} \cdot dp_{Cc} \quad \text{Ecuación 3.29}$$

3.2.7. El archivo de acople

El archivo de acople proporciona la información necesaria sobre el lugar donde convergen geoméricamente las mallas de TRACE y CTF. Este archivo de externo es leído por el código CTF e incluye la información necesaria sobre los *componentes virtuales exterior* implementados en dicho código. En este apartado se detalla la información requerida por el archivo de acople incluyendo una breve descripción de los parámetros que debe incluir dicho archivo.

- *Number of missing components*: este parámetro representa el número de componentes de TRACE a los que se conecta el dominio de CTF. Por ejemplo: si el núcleo se conecta a un componente *vessel*, este parámetro es igual a uno. Sin embargo, si el núcleo está conectado mediante componentes *pipes* este parámetro es igual al número de dichos componentes empleados.
- *ID of missing components*: este parámetro representa el número identificativo que aparece en el archivo de entrada de TRACE de componentes a los que se conecta el dominio de CTF. Por ejemplo: el número identificativo (ID) del componente *vessel* o los IDs de los componentes *pipes* donde se conecta el núcleo.
- *Number of components searched by TRACE*: este parámetro representa el número de componentes de CTF que se conectarían al subdominio de TRACE. Es decir, este parámetro es igual al número de canales de CTF que representan el núcleo del reactor o elemento combustible modelado.
- *CTF components basic information*: este bloque contiene la información necesaria de cada canal que define el dominio de CTF. Los diferentes parámetros que contiene el bloque se detallan por separado
 - *CompNum*: parámetro que representa el número de componente del dominio modelado por CTF. Sirve cualquier ID numérico siempre y cuando dicho ID no se encuentre en el archivo de entrada de TRACE.

-
- *SolControl*: parámetro que representa si dicho proceso (en este caso CTF) posee el control de la solución del sistema semi-implícito del *exterior*. Las posibles opciones son 0 y 1. (Siempre deber ser igual a 0, ya que la solución del sistema de los componentes *exterior* la realiza TRACE).
 - *ModelType*: parámetro que representa el tipo de dominio simulado por CTF y representado por sus componentes *exterior virtuales*. Las posibles opciones son '**fluid1-D**', '**fluid3-D**' y '**heat2-D**'. Para el tipo de acople que se ha diseñado siempre se seleccionará '**fluid1-D**' o '**fluid3-D**'.
 - *MeshType*: parámetro que representa el tipo de mallado del dominio simulado por CTF. Para el tipo de acople que se ha diseñado siempre se seleccionará la opción 'fixed'.
 - *numMethod*: parámetro que representa el esquema empleado por el CTF para resolver las ecuaciones del fluido. Las opciones disponibles son 'SETS' y 'semi-imp'. Siempre se seleccionará la opción 'semi-imp' ya que CTF únicamente resuelve por método semi-implícito.
 - *Number of exterior junctions in CTF*: este parámetro representa el número de conexiones de tipo *exterior* que existen en CTF. Debe existir una conexión tipo *exterior* por cada componente al que se desea conectar el dominio simulado en CTF.
 - *Exterior junctions basic information*: este bloque contiene la información de las conexiones tipo *exterior* que conectan el dominio de CTF con el dominio simulado por TRACE. Los parámetros de este bloque se detallan por separado:
 - **JunNum**: número de la conexión tipo *exterior*. Este ID numérico debe coincidir con el ID de la unión definida en el componente donde se conecta el subdominio de CTF en el archivo de entrada de TRACE.
 - **vOutSign**: signo (+/-1) de la conexión tipo *exterior* siguiendo el convenio de TRACE (negativo entrante en el componente y positivo saliente del componente).
 - **MomEval**: parámetro para activar (1) /desactivar (0) el cálculo de la ecuación de momento o cantidad de movimiento en conexión tipo *exterior*. Siempre activo en CTF porque el semi-implícito es el único método disponible y sólo se puede desconectar cuando TRACE trabaje con el método SETS.
 - **iVarC**: parámetro que representa el nodo axial (centro de nodo en la malla de continuidad) en el modelo de CTF para las variables adyacentes a la conexión tipo *exterior*.

- **iVarE**: parámetro que representa el índice de cara (cara de la malla de continuidad) adyacente a la conexión tipo *exterior* en el dominio de TRACE.
- **JunIndex**: índice numérico de la conexión tipo *exterior* según el convenio de TRACE. En este caso sería JunIndex=1 entrante y JunIndex=2 saliente de un componente.
- **method**: parámetro que representa el esquema empleado por CTF para resolver las ecuaciones del fluido en la conexión tipo *exterior*. Las opciones disponibles son ‘SETS’ y ‘semi-imp’. Siempre se selecciona la opción ‘semi-imp’ ya que CTF únicamente resuelve por método semi-implícito.
- **nSubchan**: número de subcanales del modelo de CTF agrupados en una misma conexión tipo *exterior*. En caso de que esté representado todo el modelo en una misma conexión, el parámetro ‘nSubchan’ puede igualarse a cero (nSubchan=0).
- **Subchan list**: listado de ID de los subcanales del dominio de CTF conectados a la conexión tipo *exterior* JunNum.

3.2.8. Otros aspectos destacados

En este apartado se detallan otros aspectos a tener en cuenta durante la elaboración del acople. Estos aspectos destacables son el control de paso de tiempo, la convergencia y el *backup*, aparte de la solución del sistema de ecuaciones de los componentes tipo *exterior* que ya se ha analizado en apartados precedentes.

3.2.8.1 Control de paso de tiempo

El control real del paso de tiempo se realiza en el código líder (*master code*) que en este caso es TRACE. Ambos códigos utilizan métodos semi-implícitos para la discretización temporal y su paso de tiempo seleccionado debe cumplir con el límite de Courant para asegurar la estabilidad numérica. Es obvio que el paso de tiempo del código acoplado debe ser único. Por tanto, el más restrictivo de los códigos es el que marca el tamaño de paso de tiempo en cada avance temporal.

El control del paso de tiempo aplicado en el acople es muy sencillo. En primer lugar, tanto el código TRACE como CTF calculan su paso de tiempo en función de los parámetros característicos de su dominio y sus propios límites internos. Posteriormente, en el punto de sincronización *iOldTime* CTF envía a TRACE el paso de tiempo propio Δt_{CTF} . En este punto del esquema de simulación, TRACE compara su propio paso de tiempo Δt_{TRACE} con el de CTF y selecciona el menor de ellos. Este procedimiento se plasma en la Ecuación 3.30.

$$\Delta t_{TRACE-CTF} = \text{mín}(\Delta t_{TRACE}, \Delta t_{CTF}) \quad \text{Ecuación 3.30}$$

Por último, TRACE envía el paso de tiempo del código acoplado a CTF, dentro del propio punto de sincronización *iOldTime*. Siendo finalmente este valor ($\Delta t_{TRACE-CTF}$) el paso de tiempo adoptado en los términos temporales de las ecuaciones de conservación de ambos códigos.

3.2.8.2 Convergencia y backup

Un *backup* en el ámbito de los códigos de simulación es el proceso de actualización de las variables que se lleva a cabo cuando no converge la solución del mismo con el tamaño de tiempo seleccionado. Todas las variables se actualizan de nuevo a los valores del tiempo del paso anteriormente simulado, y se procede a realizar una disminución del tamaño de paso de tiempo.

Cada uno de los códigos posee su propio control de convergencia adecuado a las características de los elementos modelados con el código, la física que contiene y los criterios implementados por los desarrolladores del código. Por este motivo, si la solución en cierto paso de tiempo de cualquiera de los códigos no converge y dicho código debe realizar un *backup*, esta incidencia se comunica al otro código para que ambos realicen la misma actualización de variables a los valores antiguos, manteniéndose la sincronización temporal. Todas las comunicaciones relativas a la convergencia y *backup* se realizan dentro del punto de sincronización *iEndStep*.

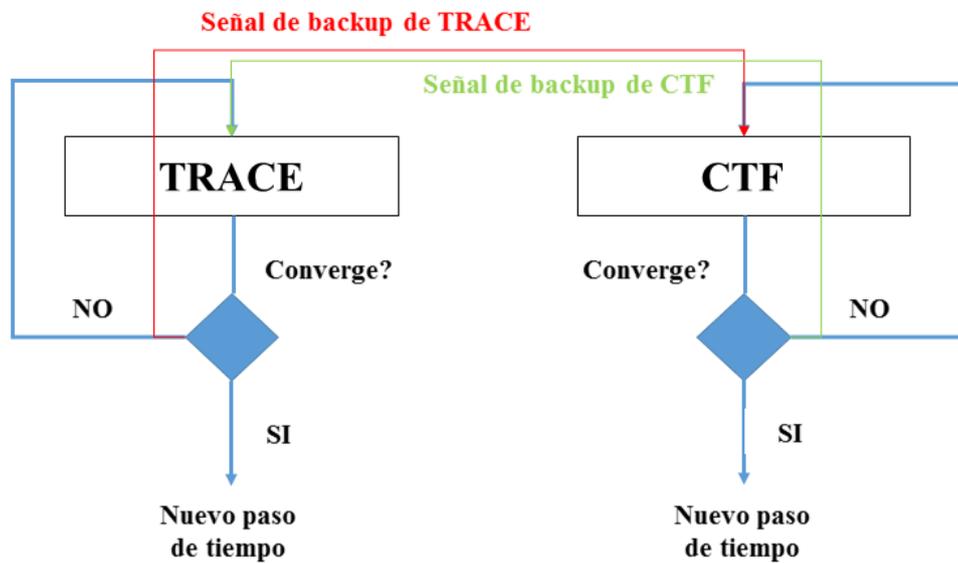


Figura 3.8 Esquema del procedimiento de *backup* del código acoplado.

3.3. Acople semi-implícito TRACE/CTF por solapamiento de dominios

El acople por solapamiento de dominios realizado tiene como objetivo posibilitar la comunicación entre TRACE y CTF de forma que el primero proporcione las condiciones de contorno del núcleo a CTF de forma activa durante una simulación conjunta. La diferencia radica en que CTF no devuelve datos a TRACE, por lo que el dominio representado en TRACE debe ser completo.

Se parte de la premisa, al igual que en el acople semi-implícito general, de utilizar el sistema de comunicación basado en los componentes *exterior* de TRACE. En este tipo de acople no interesa la resolución de las ecuaciones de los componentes *exterior*. Para la comunicación de variables de TRACE a CTF se utiliza la lógica del exterior implementada anteriormente para el acople interno. La comunicación realizada es unidireccional, únicamente se busca la actualización de variables en CTF, y por tanto la comunicación inversa desde CTF a TRACE está inhabilitada con excepción de la necesaria para mantener el sincronismo de los códigos.

Este tipo de acople resulta de gran utilidad cuando se desea analizar aspectos de seguridad nuclear o una fenomenología determinada con gran nivel de detalle. Para ello se pueden utilizar modelos en gran detalle de núcleo (o de algún elemento combustible concreto) utilizando las características de CTF. El nivel de detalle utilizado depende del fenómeno que se va a analizar o de las variables que se desean calcular. Por ejemplo, puede ser que se quiera obtener algún parámetro de seguridad a nivel de varilla de combustible. Para ello se puede utilizar un modelo de CTF para analizar paralelamente a los cálculos de TRACE el elemento de combustible más desfavorable a nivel de detalle de varillas de combustible.

El acople desarrollado mediante el proceso de solapamiento de dominios resulta de alguna manera equiparable a utilizar ambos códigos por separado para analizar un determinado transitorio. Sin embargo, utilizar este tipo de acople presenta una serie de ventajas. Se elimina la necesidad de realizar la correspondiente lectura y escritura de datos para definir las condiciones de contorno entre el código de sistema y el de subcanal. Este tipo de acople garantiza un tratamiento temporal semi-implícito, debido a que las variables se comunican en el momento adecuado para no perder el esquema de resolución del código de subcanal. Además de las variables independientes comunicadas en los respectivos niveles axiales donde aplican las condiciones de contorno, CTF utiliza como condiciones de contorno de velocidad a la entrada y presión a la salida los valores tentativos de TRACE. El análisis de convergencia y *backup* de la solución se realiza de forma conjunta tal y como se ha presentado anteriormente. Estos dos procesos de comunicación de valores tentativos y convergencia conjunta garantizan que se mantiene el grado de implícitud (respecto a TRACE) en la solución de CTF.

3.4. Acople TH-NK3D CTF/PARCS

Se ha desarrollado un acople entre el código de subcanal CTF y el código de difusión neutrónica tridimensional PARCS en su versión v3.2 (PARCSv3.2). El acople está basado en el intercambio interno de datos sin necesidad de utilizar interfaces de comunicación externa entre ambos códigos. Esto evita los problemas asociados al uso de la *Parallel Virtual Machine* (PVM) históricamente empleada para los acoples TH-NK3D.

El objetivo de este acople es incluir una cinética tridimensional en CTF para realimentación al código con la potencia obtenida a partir de dicha neutrónica. Está ampliamente demostrado que los códigos acoplados TH-NK3D son los más apropiados para la simulación de transitorios asimétricos en los que el comportamiento cinético del núcleo resulta de capital importancia. Organismos reguladores como la US NRC recomienda el uso estos códigos acoplados para la simulación de algunos de los transitorios base de diseño de reactores tipo PWR y sobre todo BWR.

En el desarrollo del código acoplado se ha planteado como meta realizar las mínimas modificaciones posibles en el código fuente de PARCS. Este aspecto responde a la necesidad de facilitar las migraciones entre las diferentes versiones liberadas de PARCS. Respetando esta limitación, el grueso de las modificaciones necesarias se realizan en CTF. Además, se ha respetado todo el esquema de acople existente en PARCS para su acople con otros códigos termohidráulicos como TRACE o RELAP5.

3.4.1. Esquema de acople

Se ha utilizado un esquema de acople explícito interno similar al actualmente existente entre PARCS y TRACE. El acople es temporalmente explícito porque las ecuaciones neutrónicas y termohidráulicas no se resuelven a la vez, utilizando un esquema conjunto. Los códigos únicamente intercambian los valores necesarios para proporcionarse condiciones de contorno mutuamente en cada paso de tiempo. Cada código resuelve su sistema de ecuaciones y se asegura la convergencia de ambos para cada paso de tiempo mediante el esquema de control de avance del acople. Temporalmente equivale al típico esquema de acople explícito en un sistema de códigos líder/seguidor (*master/slave*) como el de la Figura 3.9.

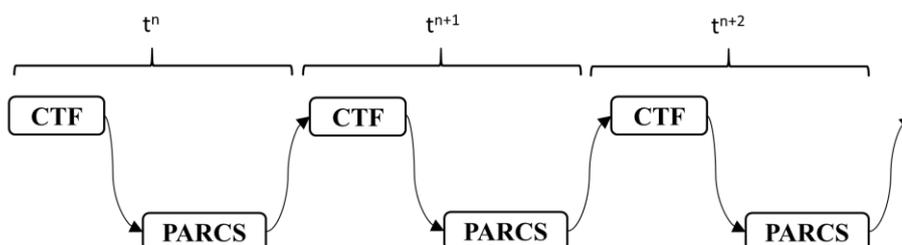


Figura 3.9 Esquema explícito de acople CTF/PARCS.

La transferencia de información entre códigos se realiza mediante comunicación interna. Esto es posible cuando ambos códigos se incluyen en un mismo proyecto de compilación, gracias a esto se habilita la posibilidad de traspaso mutuo de información dentro de una misma ejecución conjunta. Es decir, uno está embebido en el otro. Como puede apreciarse en el esquema de acople de la Figura 3.10, CTF proporciona a PARCS los valores termohidráulicos del núcleo. Estos valores deben corresponderse a la parametrización realizada de las tablas de las secciones eficaces. Generalmente son la temperatura *Doppler* del combustible, la densidad del moderador y la concentración de boro. Utilizando estas condiciones de contorno y las tablas de secciones eficaces, PARCS resuelve la ecuación de la difusión en los nodos de la malla tridimensional que representa al núcleo del reactor.

La potencia nodal (o a nivel de varilla si se utiliza la capacidad de reconstrucción de este tipo de potencia) obtenida por PARCS es comunicada a CTF. Estos valores de potencia se utilizan como condición de contorno térmica en las estructuras de calor que representan a las varillas de combustible en el código termohidráulico.

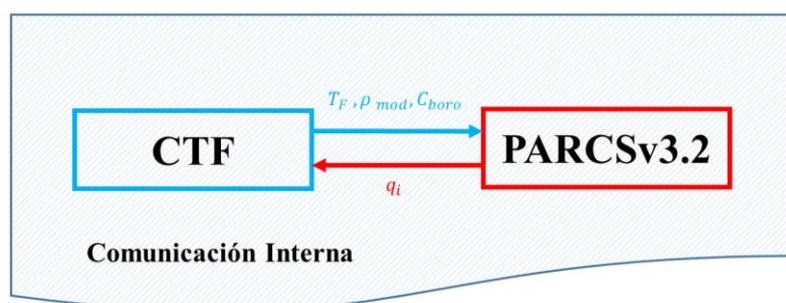


Figura 3.10 Esquema general del código acoplado CTF/PARCSv3.2.

Queda demostrado que existe, por tanto, traspaso bidireccional de datos entre los códigos. Es necesario implementar una comunicación efectiva para el correcto funcionamiento del código acoplado. Como se ha mencionado anteriormente, se ha optado por

una comunicación interna, evitando la necesidad de utilizar librerías y protocolos externos adicionales para la comunicación. Este tipo de comunicación implica que ambos códigos deban estar englobados en un único proyecto de compilación y se obtenga un único ejecutable en el que el código acoplado esté integrado.

En el acoplamiento CTF/PARCS desarrollado, como suele ser habitual, el código termohidráulico actúa como director. Este rol implica que CTF es el encargado de realizar las llamadas a PARCS para que este complete parte (o la totalidad) de su esquema de cálculo. Las condiciones iniciales de potencia (calor) en CTF se leen del archivo de entrada, y generalmente vienen proporcionadas por los perfiles de potencia calculados mediante una ejecución de un estacionario con PARCS en solitario. Con lo que respecta a la necesidad de condiciones de contorno por parte de las ecuaciones de conservación del fluido el acople únicamente necesita un punto de comunicación. Este punto de comunicación es bidireccional como se puede apreciar en la Figura 3.10. CTF tiene que proporcionar a PARCS los valores térmicos e hidráulicos necesarios para que a su vez este calcule las potencias que CTF incluye como restricción en sus estructuras de calor.

El solapamiento entre las diferentes físicas modeladas con ambos códigos tiene lugar a la hora de calcular el término de transferencia de calor con la pared. En reactores nucleares, la energía se genera en el interior de las varillas sólidas de combustible nuclear, debido a las fisiones, y se transfiere al refrigerante que circula por su exterior. La vinculación existente entre la potencia aplicada a la estructura de calor y la temperatura de la pared se propaga a través de la *ecuación de conducción de calor* en un medio sólido (Ecuación 3.31).

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(k \nabla T) + Q''' \quad \text{Ecuación 3.31}$$

La energía se transfiere de la estructura térmica al fluido por una condición de contorno de flujo de calor. La energía se deposita en el combustible por el código de cinética de neutrones a través de la tasa de generación de calor por unidad de volumen Q''' .

Finalmente, el cálculo de temperaturas en el interior del sólido acaba teniendo consecuencias en el término de *transferencia de calor con la pared* incluido en la *ecuación de conservación de la energía* para cada fase del fluido. Este término se corresponde con la Ecuación 2.36 del capítulo 2.

$$q_{w,k}^{n+1} = h_{w,k}^n A_w (T_w^{n+1} - T_k^{n+1})$$

Originalmente se ha presentado esta ecuación de cierre como semi-implícita diciendo que el coeficiente de transferencia de calor con la pared $h_{w,k}^n$, se calcula referido al paso de tiempo antiguo n , mientras que las temperaturas T_w^{n+1} y T_k^{n+1} se calculan utilizando las presiones y condiciones de la pared del paso de tiempo actual $n+1$. Sin embargo, cuando se acopla con PARCS el cálculo de la temperatura de la pared ya no es implícito.

Esto se debe a que para el cálculo de la conducción térmica a través del sólido se utiliza la tasa de generación de calor por unidad de volumen q'''^n calculada por PARCS. Esta tasa de generación de calor debido a las fisiones se ha calculado empleando variables termohidráulicas del paso de tiempo antiguo (T_F^n , $\bar{\rho}_{mod}^n$ y C_{boro}^n), y por tanto es temporalmente explícita. En conclusión, la ecuación de transferencia de calor entre el fluido y la pared se reescribe en caso de cálculos acoplados con PARCS como la Ecuación 3.32.

$$q_{w,k}^{n+1} = h_{w,k}^n A_w (T_w^n - T_k^{n+1}) \quad \text{Ecuación 3.32}$$

Finalmente, el término de cierre de *transferencia de calor con la pared* incluido en la *ecuación de conservación de la energía* calcula todos sus términos referidos al tiempo antiguo a excepción de la temperatura de la fase del fluido en contacto con la pared.

3.4.2. Comunicación y control de ejecución del código acoplado

En este apartado se presentan los esquemas de comunicación y ejecución del código acoplado. Los esquemas expuestos se basan en la comunicación líder/seguidor entre CTF y PARCS. Como se mencionó con anterioridad, CTF actúa como código líder en el acople, y por tanto es el encargado de controlar el avance de la simulación conjunta y realizar las llamadas necesarias a PARCS ordenándole que realice un tipo determinado de cálculo u operación.

En el esquema de la Figura 3.11 se presenta el avance de la simulación acoplada durante la fase de lectura de archivos de entrada, inicialización de variables y finalización de simulación. A través de la rutina principal de CTF se realizan las llamadas a PARCS con los argumentos adecuados al tipo de tarea que este último debe realizar dentro de su esquema de simulación. Mencionar que una vez realizado el proceso de inicialización del código acoplado, se realiza la llamada a la rutina *trans* de CTF, encargada de coordinar el avance de la simulación. Este punto enlaza la parte I del esquema de comunicación de la Figura 3.11 con la parte II presentada en la Figura 3.12.

Una vez CTF ha leído su archivo de entrada, inicializado las variables geométricas y copiado en memoria accesible por PARCS las condiciones iniciales necesarias para el cálculo neutrónico, se efectúa la llamada a PARCS para la lectura de archivos de entrada e inicialización (argumento 0 en la llamada). Inmediatamente después, se vuelve a llamar a PARCS para que este realice un primer cálculo estacionario (argumento 1 en la llamada). Este cálculo es necesario para la inicialización de potencias en CTF y el cálculo de autovalor (k_{eff}) que necesita el propio PARCS previo a una simulación transitoria.

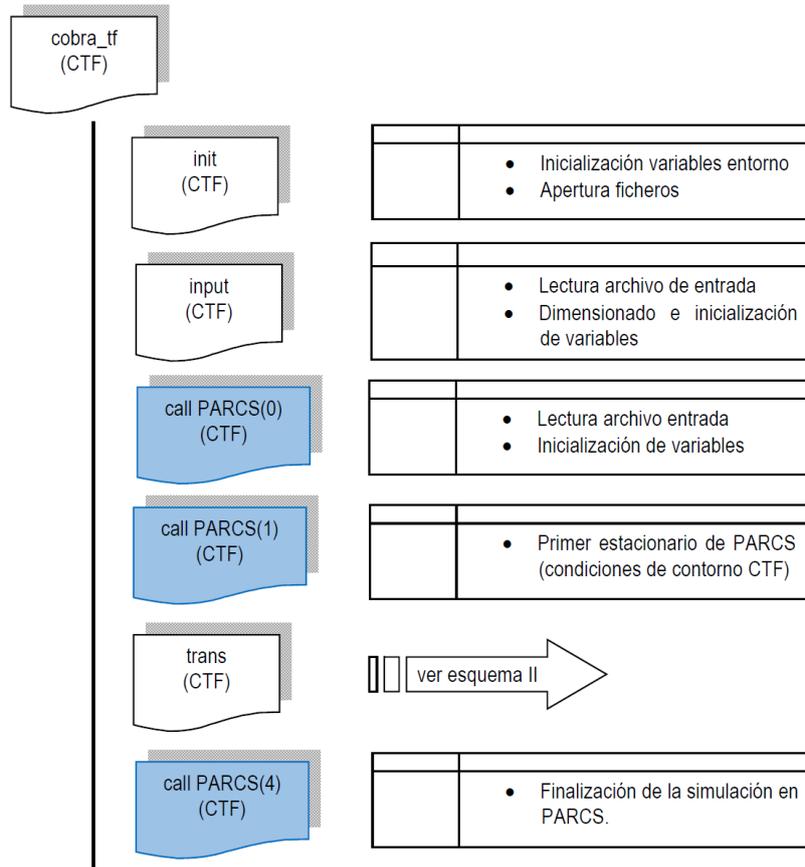


Figura 3.11 Parte I del esquema de comunicación CTF/PARCS.

Una vez finalice la simulación cuyo avance está controlado por la rutina *trans* de CTF, se realiza la llamada a PARCS para la finalización de su simulación y escritura de ficheros de salida (argumento 4 en la llamada a PARCS). Una vez finalice PARCS, CTF realiza lo propio y concluye la simulación acoplada.

En el esquema de la Figura 3.12 se analiza la comunicación y control de avance entre códigos desde el punto de vista del código líder CTF. Dentro del bucle que controla el avance de la simulación (*time step loop*), existen dos puntos de llamada a PARCS con tres opciones diferentes. El primer punto de llamada, se encuentra nada más finalizar el bucle de iteración externa (*outer iteration*), y se encarga de comunicar a PARCS la no convergencia de la misma con objeto de que ambos códigos realicen el *backup* al unísono. En este caso el argumento de llama a PARCS es 5.

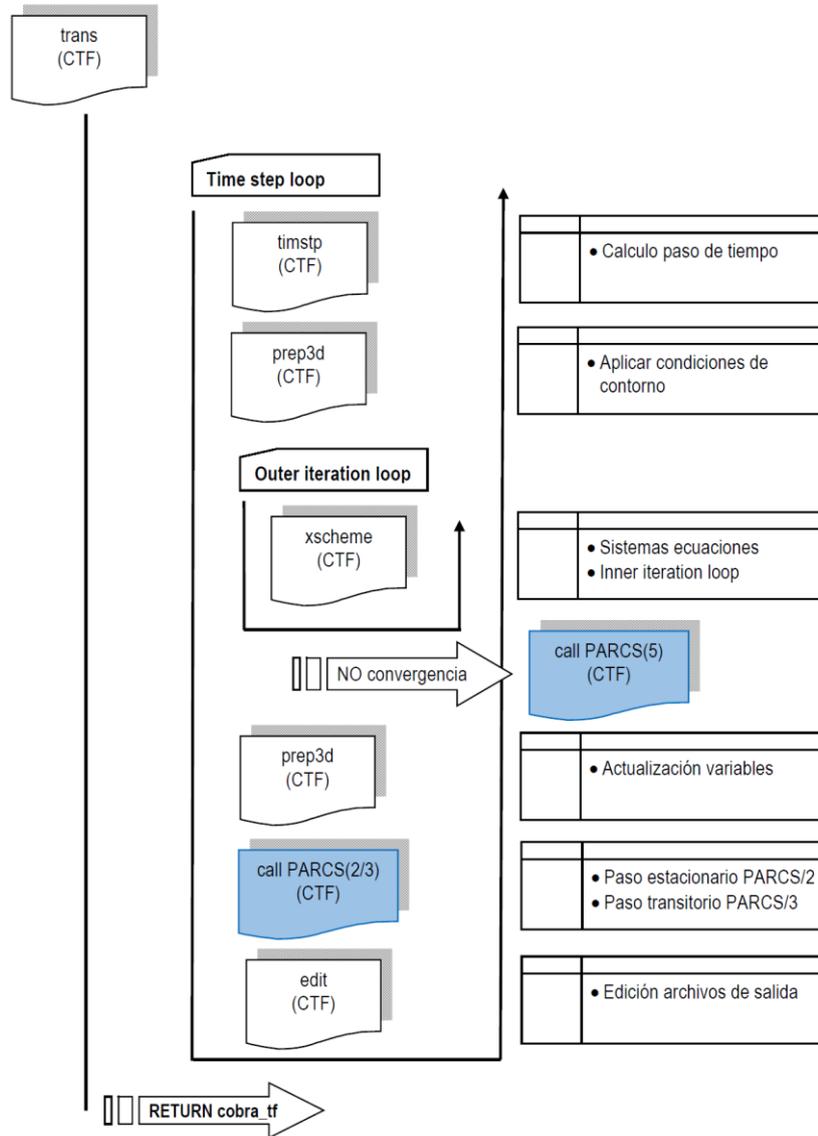


Figura 3.12 Parte II del esquema de comunicación CTF/PARCS.

El restante punto de llamada se efectúa justamente después de la actualización de variables a los valores del paso actual ($n+1$). Esta es la llamada a PARCS para que dicho código efectúe un avance iterativo en caso estacionario (argumento igual a 2) o un paso temporal en simulaciones transitorias (argumento igual a 3). Cabe dejar constancia de

que con anterioridad a las llamadas de avance a PARCS, CTF escribe las variables termohidráulicas de realimentación de PARCS en posiciones de memoria compartida por ambos códigos. Igualmente, PARCS escribe la potencia nodal y por varilla una vez finalizados sus cálculos en la memoria compartida.

En este punto se analiza el procedimiento de simulación realizado por el código *seguidor* PARCS en función del argumento que emplee en su llamada el código *líder* CTF. En la etapa de lectura del archivo de entrada e inicialización de variables, PARCS realiza los procesos documentados en el esquema de la Figura 3.13.

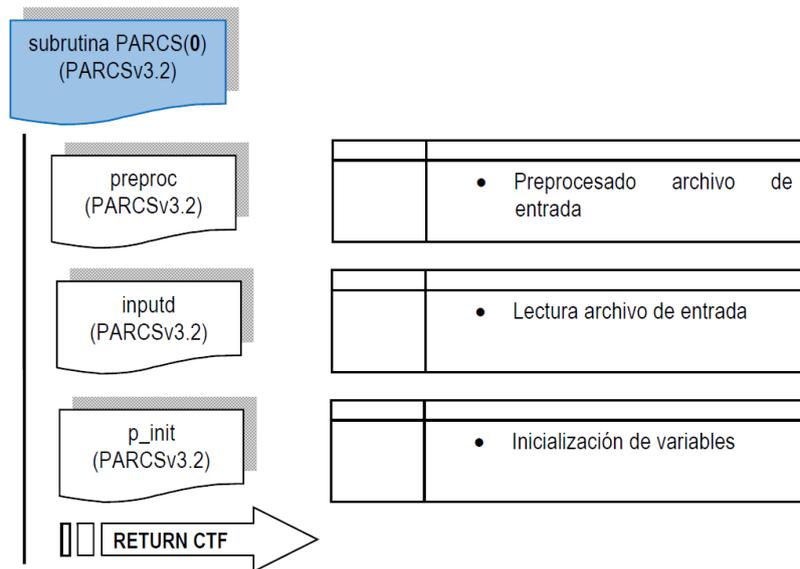


Figura 3.13 Esquema de ejecución PARCS caso 0.

En las llamadas a PARCS con argumento 1 y 2 el código realiza procedimientos análogos de resolución estacionaria de la ecuación de la difusión como se observa en el diagrama de la Figura 3.14. Dentro del procedimiento interno de PARCS para simulaciones acopladas TH-NK3D se efectúa la primera comunicación efectiva entre códigos. Durante esta comunicación PARCS tiene accesibles posiciones de memoria de CTF y puede copiar datos desde CTF a su propia memoria. Esto se hace a través de los nuevos módulos y subrutinas implementados en CTF para el acople con PARCS. Todo el proceso está coordinado por el módulo CDMR que sirve de enlace entre la *General Interface* (GI) de acople de PARCS y la interfaz de acople desarrollada en CTF.

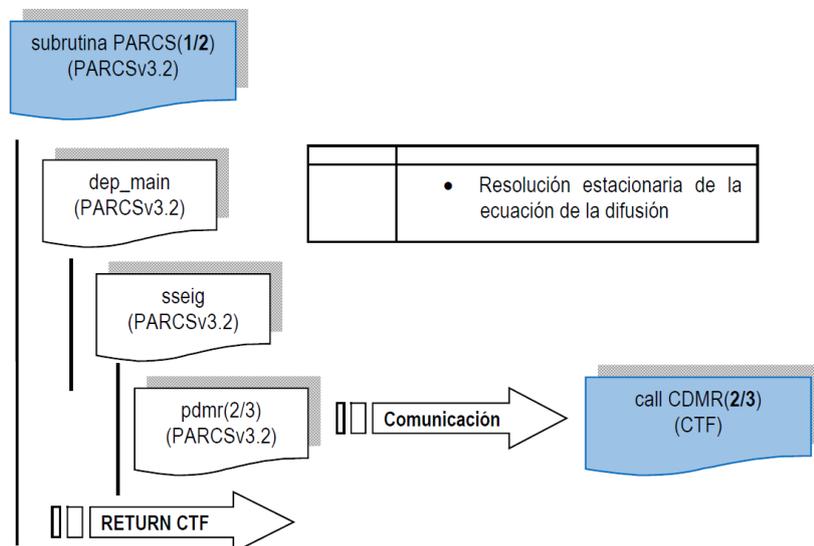


Figura 3.14 Esquema de ejecución PARCS caso 1 y 2.

Cuando PARCS accede a CDMR con argumento 2, se produce la comunicación en sentido CTF-PARCS. Es decir, PARCS copia en sus estructuras de datos la realimentación termohidráulica procedente de CTF. Alimentado con estos datos termohidráulicos efectúa el cálculo neutrónico accediendo finalmente a CDMR, pero en este caso con argumento 3 para copiar la potencia nodal en la memoria compartida a la que posteriormente tendrá acceso CTF. Por último, PARCS finaliza su proceso interno y devuelve las riendas de la simulación a CTF.

Este procedimiento es análogo cuando se efectúa una simulación transitoria como se puede ver en el grafo de la Figura 3.15. En este caso se utiliza el argumento 3 en la llamada a PARCS. Durante su proceso interno de cálculo de un paso de tiempo PARCS efectúa las oportunas comunicaciones con CTF a través del módulo CDMR.

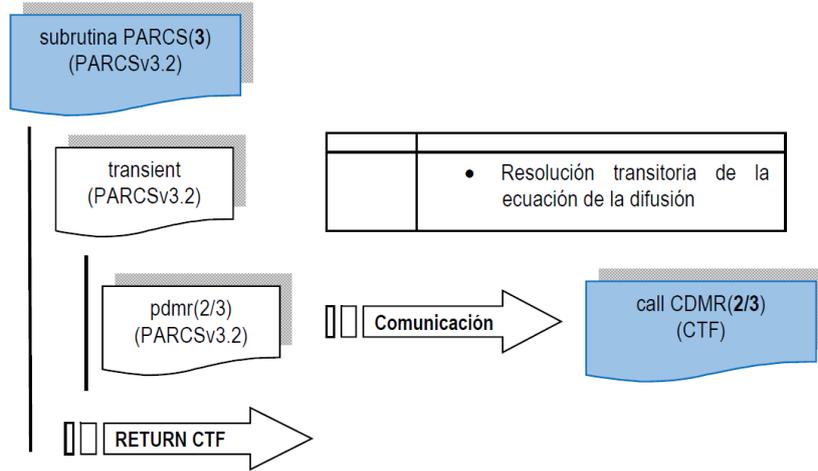


Figura 3.15 Esquema de ejecución PARCS caso 3.

En último lugar, una vez finalizada la simulación, según el criterio definido en el archivo de entrada de CTF, se llama a PARCS con argumento 4. En este caso se realiza un último paso transitorio o iteración y se finaliza la simulación escribiendo los archivos de salida. Este procedimiento se refleja en el esquema de la Figura 3.16.

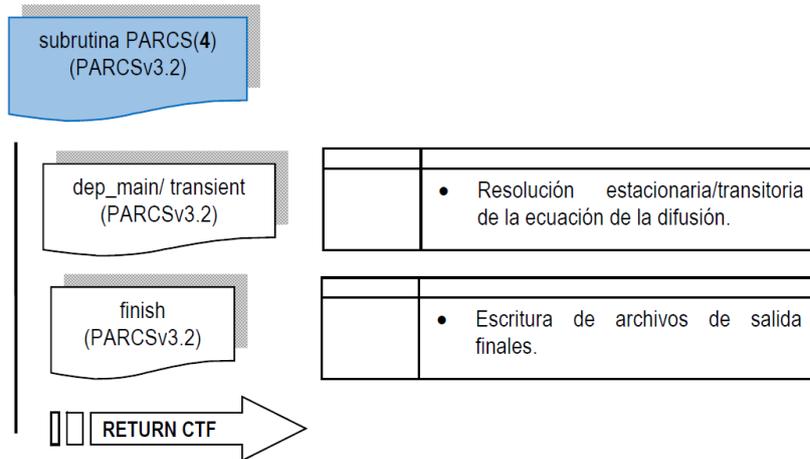


Figura 3.16 Esquema de ejecución PARCS caso 4.

3.4.3. Modificaciones introducidas en los códigos

Se han realizado importantes modificaciones en el código fuente de CTF para realizar este acople. No obstante, la mayor parte de ellas se ha incluido en un conjunto de módulos encargados de las tareas fundamentales en el acople. Los archivos de entrada necesarios son los habituales.

3.4.4. Otros aspectos destacados

3.4.4.1 Control de paso de tiempo y backup

El control del paso de tiempo en el esquema de acople explícito es muy sencillo, el código líder (*master code*) que en este caso es CTF impone el paso de tiempo de simulación al código neutrónico PARCS. Si el paso de tiempo es demasiado grande para el código neutrónico y su solución no converge (cosa que no suele ocurrir), PARCS comunicaría la no convergencia a CTF a través del bloque de datos de control.

Cada uno de los códigos posee su propio control de convergencia. Si por algún motivo la solución de cualquiera de los códigos no converge y dicho código debe realizar un *backup*, esta incidencia se comunica al otro código. Todas las variables se actualizan de nuevo a los valores del paso de tiempo anteriormente simulado, y se procede a realizar una disminución del tamaño de paso de tiempo.

3.4.4.2 Capacidad de realizar reconstrucciones de potencia a nivel de varilla

Con objeto de alimentar a CTF con potencias a nivel de varillas de combustible se ha modificado el código PARCS para habilitar los cálculos de reconstrucción de potencia a nivel de varilla en simulaciones acopladas CTF/PARCS. Esta capacidad resulta de gran importancia para el cálculo de los parámetros limitantes en los transitorios de seguridad nuclear. Los cálculos acoplados TH-NK3D a nivel de varilla son innovadores respecto a las capacidades actuales de los códigos de planta utilizados para los análisis de mejor estimación.

Originalmente, PARCS poseía la capacidad de realizar la reconstrucción de la potencia a nivel de varilla utilizando la solución nodal y las funciones de forma por grupo de energía introducidas en su propio archivo de entrada. La capacidad se extiende a todos los elementos combustibles seleccionados por el usuario en el archivo de entrada. Los cálculos se realizaban al final de la simulación estacionaria o en intervalos de tiempo seleccionados por el usuario en casos transitorios.

Estas capacidades han sido ampliadas para permitir la realimentación de potencia a nivel de varilla por parte de CTF durante toda la simulación. No obstante, también se pueden seleccionar intervalos de tiempo para dicho cálculo utilizando las características originales del código. Si se selecciona esta opción, los perfiles de potencia a nivel de varilla mantienen la forma espacial del último cálculo de reconstrucción y siendo pesados globalmente con la solución nodal.

Para habilitar estas características se han implementado subrutinas avanzadas en CTF para facilitar la promediación espacial entre las diferentes nodalizaciones termohidráulica y neutrónica. El fichero en el que se define la correspondencia entre las nodalizaciones de los dos códigos sigue siendo externo, se utiliza el archivo *MAPTAB* como archivo de entrada de PARCS. Este archivo no incluye información adicional respecto al problema con solución únicamente nodal.

Análogamente se han implementado funciones de renormalización de perfiles de potencia a nivel de varilla. Estas funciones tienen como fin adaptar la normalización por plano y elemento combustible que realiza internamente PARCS en las potencias a nivel de varilla a los requisitos de las estructuras de calor de CTF. Para realizar la correcta conversión es necesario tanto la potencia a nivel de varilla como la distribución nodal de potencia.

3.5. Acople TH-TM CTF/FRAPTRAN

Se ha desarrollado un acople entre el código de subcanal CTF y el código de análisis de comportamiento de combustible nuclear FRAPTRAN. El acople está basado en el intercambio interno de datos. No son necesarias interfaces de comunicación externa entre ambos códigos. El acople implementado es temporalmente explícito. Esto significa que no existe acople real entre las ecuaciones de ambos códigos, por lo que únicamente se realimentan con las condiciones de contorno generadas por el otro código. El acople actual tiene como limitación que se puede efectuar el análisis de una única varilla por proceso computacional.

El objetivo de este acople es incluir un módulo termomecánico para el estudio del comportamiento e integridad de las varillas de combustible nuclear en simulaciones termohidráulicas realizadas mediante el código de subcanal CTF. Esta característica habilita el cálculo de márgenes de seguridad e integridad de vaina durante los transitorios simulados con la herramienta finalmente generada. Es importante poder incluir un código informático como FRAPTRAN, propuesto por la US NRC como código de referencia para el análisis de accidentes base diseño y para transitorios en los que se analice el comportamiento de una sola varilla de combustible en condiciones de operación del reactor accidentales.

Como meta práctica en el desarrollo del código acoplado se ha planteado realizar las mínimas modificaciones posibles en ambos códigos. Si bien debido al empleo de lenguajes de programación antiguos en FRAPTRAN han tenido que realizarse más modificaciones que las inicialmente deseadas. También debe mencionarse que el acople debe mantener la estructura adecuada de llamadas para conservar todas las características anteriormente implementados con los acoples de CTF con TRACE y PARCS respectivamente.

3.5.1. Esquema de acople

En este caso se ha vuelto a utilizar el esquema de acople explícito interno entre los códigos CTF y FRAPTRAN. El acople es temporalmente explícito porque no hay ningún tipo de interacción entre las ecuaciones hidráulicas de CTF y las termomecánicas de FRAPTRAN, simplemente se limitan al intercambio de información relativa a sus condiciones de contorno entre los distintos pasos de tiempo.

La transferencia de información entre códigos se realiza mediante comunicación interna, lo que obliga a que ambos códigos estén incluidos en un mismo proyecto de compilación. En la Figura 3.17 se presenta un esquema del acople e intercambio de información entre CTF y FRAPTRAN. Existen dos opciones de acople según la información proporcionada por CTF como condición de contorno para los cálculos termomecánicos de las varillas de combustible.

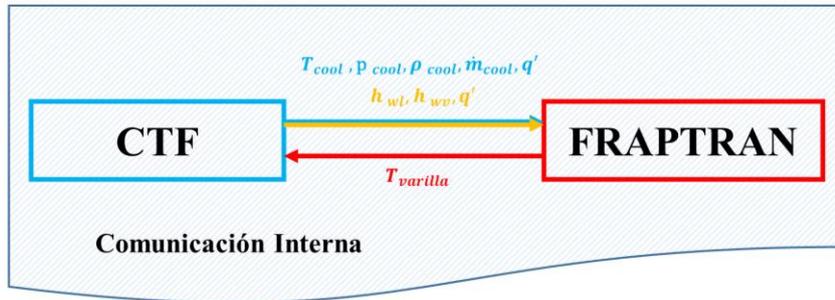


Figura 3.17 Esquema general del código acoplado CTF/FRAPTRAN.

En la primera opción CTF envía a FRAPTRAN los valores termohidráulicos del subcanal (o subcanales) que rodean la varilla que se quiere analizar y la potencia lineal que aplica a cada nodo axial de dicha varilla. Estos valores se utilizan como condición de contorno de fluido en el cálculo térmico y mecánico del medio sólido modelado en FRAPTRAN. Cuando se utiliza esta opción de cálculo acoplado se omite el módulo hidráulico de FRAPTRAN, que sin embargo sí calcula los coeficientes de transferencia de calor entre el fluido y la superficie de la varilla utilizando sus regímenes de transferencia de calor.

En la segunda opción, CTF envía directamente los coeficientes de transferencia de calor entre el fluido y la superficie sólida de la varilla a FRAPTRAN. Esta opción es un poco más invasiva debido a que los mapas de regímenes de transferencia de calor adoptados por el código acoplado son los de CTF, limitando a FRAPTRAN a los cálculos de comportamiento del combustible. Cuando se activa esta opción de cálculo acoplado FRAPTRAN omite tanto los cálculos relativos a su módulo hidráulico como su lógica de selección de regímenes de transferencia de calor.

En ambas opciones de acople FRAPTRAN devuelve a CTF el perfil de temperaturas de la varilla que se adapta a la nodalización de la misma realizada en la estructura de calor equivalente en CTF. Notar que no siempre CTF actualiza los datos de la varilla con las temperaturas provenientes de FRAPTRAN, es una opción que debe seleccionar el usuario en el archivo de entrada.

Analizando el acoplamiento real entre la física resuelta por ambos códigos, al igual que ocurre con CTF/PARCS, los fenómenos físicos se acoplan en el término de *transferencia de calor con la pared* incluido en la *ecuación de conservación de la energía* del fluido tanto en FRAPTRAN como en CTF (Ecuación 2.36 del capítulo 2).

$$q_{w,k}^{n+1} = h_{w,k}^n A_w (T_w^{n+1} - T_k^{n+1})$$

Analizando dicha ecuación de cierre se ve que independientemente del método de acople utilizado, el coeficiente de transferencia de calor con la pared $h_{w,k}^n$ (o la temperatura de fluido T_k^{n+1}) son proporcionadas por CTF a FRAPTRAN. Además de este valor hay que recordar que CTF también envía a FRAPTRAN el flujo lineal de potencia por nodo axial q' que después de dividir por el área de generación de calor (pastilla de combustible) se utiliza en el cálculo del término fuente de la ecuación de la conducción de calor (Ecuación 3.32).

Después de realizar el cálculo térmico, FRAPTRAN devuelve a CTF el perfil de temperaturas de la varilla, y CTF lo utiliza también en el cálculo el término de *transferencia de calor con la pared* de su ecuación de la energía. En este supuesto, no es necesario que CTF realice la ecuación de la conducción de calor en la varilla acoplada con FRAPTRAN.

En caso de simulaciones acopladas TH-NK3D, existe un triple intercambio de información. Esto se debe a que el flujo de calor (o potencia lineal) comunicada a FRAPTRAN por CTF procede a su vez del cálculo de la potencia neutrónica de PARCS, si bien resulta evidente que FRAPTRAN no devuelve información a PARCS. Los tres códigos están acoplados explícitamente y utilizan un esquema de comunicación temporal equivale al de la Figura 3.18.

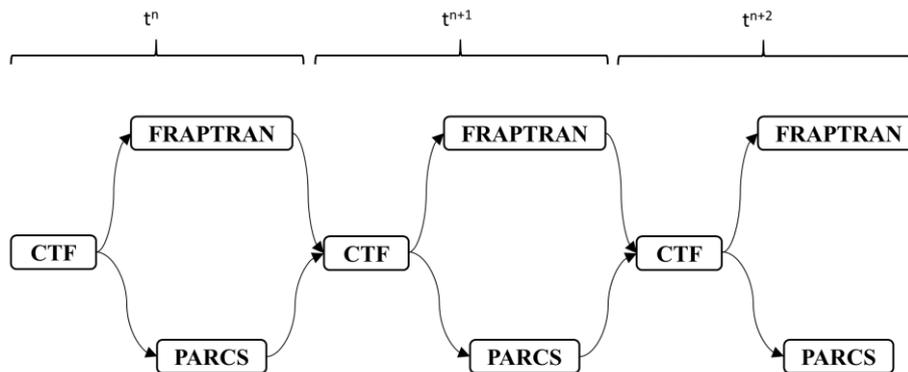


Figura 3.18 Esquema explícito de acople CTF/PARCS/FRAPTRAN.

3.5.2. Comunicación y control de ejecución del código acoplado

En este apartado se presentan los esquemas de comunicación y ejecución del código acoplado. En este caso, los esquemas expuestos se basan en la comunicación líder/seguidor entre CTF, PARCS y FRAPTRAN, ya que no puede obviarse ninguno de los códigos en este acople. En el esquema de la Figura 3.18 queda claro que CTF actúa como código líder en el acople, y por tanto es el encargado de controlar el avance de la simulación conjunta de los tres códigos. Se van a analizar las llamadas efectuadas por CTF a FRAPTRAN para realizar los cálculos de análisis de comportamiento de una única varilla de combustible determinada por el usuario o el propio código.

En el esquema presentado en la Figura 3.19 se detalla el avance de la simulación acoplada durante la fase de lectura de archivos de entrada, inicialización de variables y finalización de simulación. Como puede observarse, la rutina principal de CTF realiza la llamada para la inicialización de FRAPTRAN utilizando el 0 como argumento en dicha llamada. Una vez realizado el proceso de inicialización de los códigos acoplados, se realiza la llamada a la rutina *trans* de CTF, encargada de coordinar el avance de la simulación. Este es el punto de enlace entre la parte I del esquema (Figura 3.19) y la parte II presentada en la Figura 3.20. Mencionar que en la parte de inicialización no existe comunicación de datos entre los códigos acoplados. Por lo tanto, ambos códigos se inician a través de su respectivo archivo de entrada.

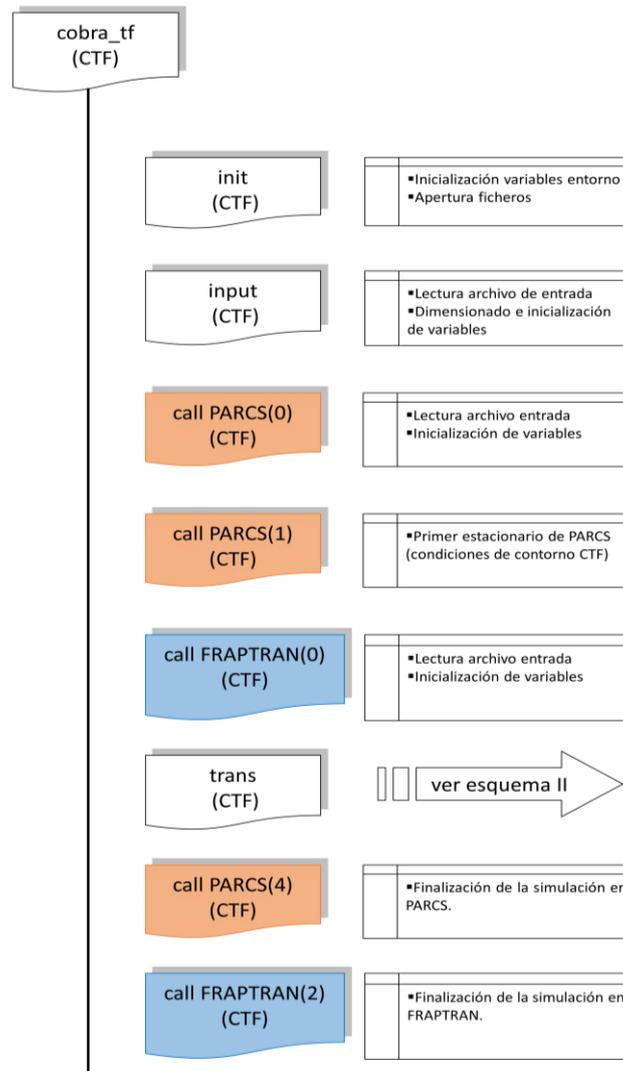


Figura 3.19 Parte I del esquema de comunicación CTF/FRAPTRAN.

En la Figura 3.20 se presenta el diagrama de flujos y las comunicaciones que tienen lugar dentro del bucle que controla el avance de la simulación (*time step loop*) desde CTF (subrutina *trans*). El lugar correcto para la comunicación no es tan evidente como en el caso del acople CTF/PARCS. En este caso, se ha optado por ir directamente a la rutina donde se realizan los cálculos relativos a las estructuras de calor en CTF, para utilizar el bucle sobre todas ellas como punto de llamada a FRAPTRAN. Siguiendo el diagrama de

flujos de la Figura 3.20 se llega a la rutina *temp* de CTF, encargada del cálculo de la conducción de calor y perfil de temperaturas a través de las varillas.

Dentro del bucle sobre todas y cada una de las estructuras de calor tipo varilla de CTF se realiza la llamada a FRAPTRAN cuando la varilla analizada coincide con la seleccionada por el usuario o por el propio código en su algoritmo de selección de varillas más desfavorables. En este punto de la simulación se efectúa la comunicación interna, a través de memoria compartida entre ambos códigos, de las variables hidráulicas, los coeficientes de transferencia de calor entre el fluido y la pared calculados por CTF y las potencias calculadas por PARCS. Con estos datos disponibles se efectúa la llamada a FRAPTRAN con argumento 1. FRAPTRAN efectúa un paso de tiempo en su esquema de cálculo y devuelve el control a CTF, no sin previamente efectuar la comunicación del perfil de temperaturas de la varilla si la opción está activa en el archivo de entrada.

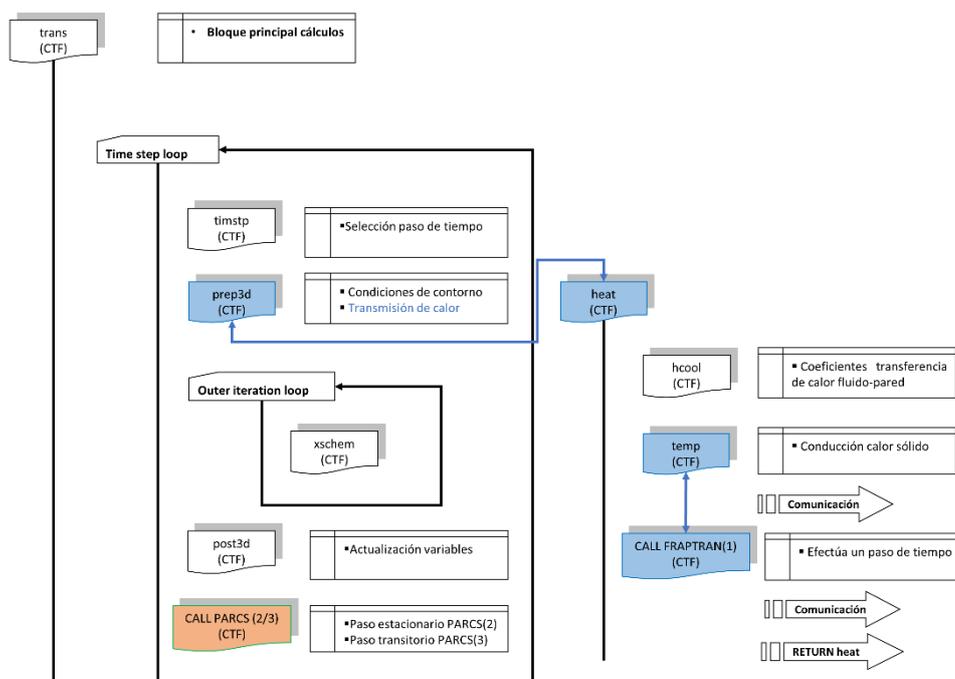


Figura 3.20 Parte II del esquema de comunicación CTF/FRAPTRAN.

El algoritmo de simulación se repite hasta que finaliza la simulación en CTF, momento en el que se realiza un último cálculo en FRAPTRAN, se escriben los ficheros de salida y finaliza la simulación.

Seguidamente se analiza el procedimiento de simulación realizado por el código *seguidor* FRAPTRAN en función del argumento que emplee en la llamada el código *líder*

CTF. En la etapa de lectura del archivo de entrada e inicialización de variables, FRAPTRAN realiza los procesos documentados en el esquema de la Figura 3.21.

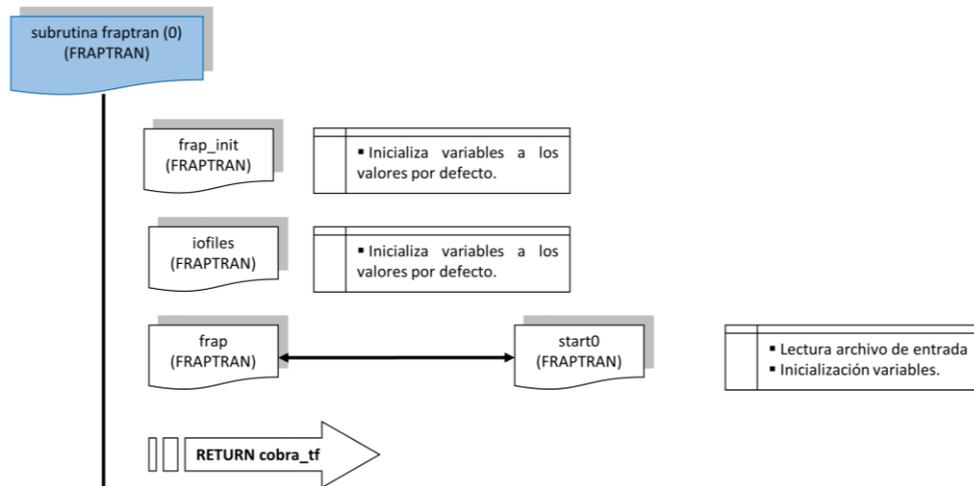


Figura 3.21 Esquema de ejecución FRAPTRAN caso 0.

Como puede apreciarse en este punto de la simulación FRAPTRAN inicializa sus datos por defecto y lee el archivo de entrada inicializando los datos geométricos y demás variables iniciales. En presente estado actual del acople la información geométrica debe incluirse en el archivo de entrada. No obstante, en un futuro estas variables serán inicializadas directamente por CTF, ya que éste posee gran parte de los datos necesarios implícitos en su archivo de entrada.

En el caso de la llamada general para efectuar el paso de tiempo transitorio por parte de FRAPTRAN se emplea el argumento 1. Como se observa en el diagrama de la Figura 3.22, en esta llamada, FRAPTRAN entra directamente en su bucle de control de avance temporal. Una vez aquí el código resuelve los diferentes modelos que contiene para la descripción del comportamiento de la varilla de combustible. El intervalo de tiempo total cubierto por FRAPTRAN antes de volver a CTF deber ser igual al paso de tiempo seleccionado por CTF. La metodología empleada para la selección del paso de tiempo se detalla en el apartado correspondiente.

Cuando FRAPTRAN completa la simulación del intervalo de tiempo marcado por CTF, se almacenan los valores máximos y mínimos globales de los parámetros de seguridad y comunica los datos relativos al perfil de temperatura (en caso que haya sido solicitado por el usuario) a la vez que devuelve el control de la simulación a CTF.

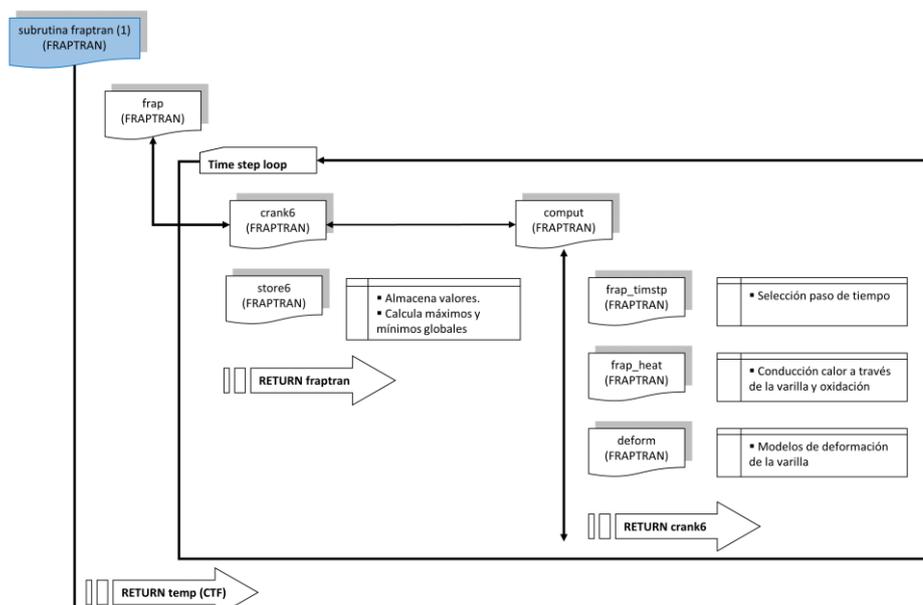


Figura 3.22 Esquema de ejecución FRAPTRAN caso 1.

3.5.3. Modificaciones introducidas en los códigos

Se han realizado modificaciones en el código fuente de CTF para realizar la comunicación entre códigos. Además, se han implementado funciones para realizar búsquedas activas de las varillas más desfavorables respecto a temperatura de vaina, ratio de potencia respecto a la potencia crítica y entalpía del combustible durante las simulaciones de CTF. En FRAPTRAN se han tenido que modificar la estructura de algunas rutinas para facilitar la subdivisión de tareas en el interior del código, de forma que se pueda realizar tanto la inicialización y finalización de simulaciones como pasos de tiempo aislados.

El archivo de entrada de FRAPTRAN no ha sido modificado. En CTF únicamente se han añadido ciertas variables en la parte del archivo de entrada relativo a las estructuras de calor para indicar la opción de acople con FRAPTRAN deseada.

3.5.4. Otros aspectos destacados

3.5.4.1 Control de paso de tiempo y backup

En este caso, el control del paso de tiempo en el esquema de acople es parcialmente independiente entre ambos códigos. La única imposición fijada a FRAPTRAN es que utilice pasos de tiempo menores o iguales que el de CTF manteniendo la sincronización temporal (el tamaño total del paso de tiempo). Esto se traduce en el siguiente algoritmo

presentado en la Figura 3.23. En primera instancia, FRAPTRAN utiliza el paso de tiempo seleccionado por CTF. Si alguno de sus modelos necesita paso de tiempo inferiores, el propio FRAPTRAN realiza un *backup* interno y selecciona como paso de tiempo la mitad del inicialmente propuesto por CTF. Si con este paso de tiempo tampoco se logra la convergencia lo reduce de nuevo a la mitad y así sucesivamente. Una vez lograda la convergencia FRAPTRAN realiza el número necesario de pasos temporales de tamaño $\Delta t_{CTF}/n$ para alcanzar el tiempo de simulación fijado por CTF. En dicho momento se produce la comunicación y retorno a CTF.

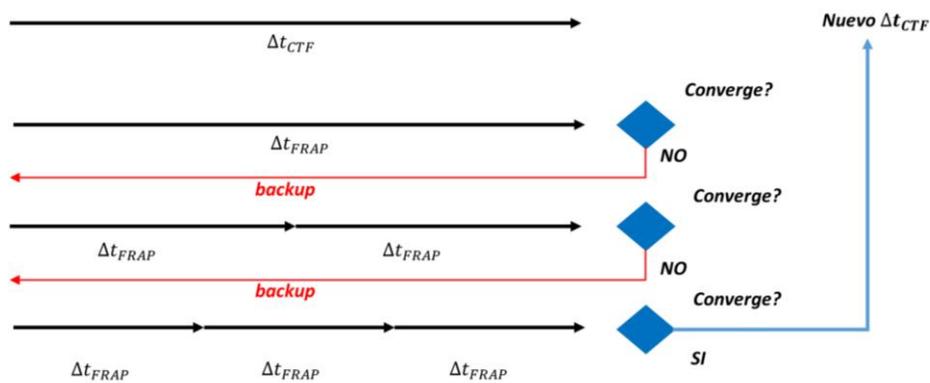


Figura 3.23 Algoritmo para la selección de paso e tiempo de FRAPTRAN.

Cada uno de los códigos posee su propio control de convergencia independientes y únicamente en caso de finalización de la simulación por error se comunica la situación al otro código.

3.5.4.2 Algoritmos de búsqueda automática de varillas desfavorables

Se han implementado algoritmos para la localización de las varillas más desfavorables durante los cálculos transitorios de CTF. Estos algoritmos incluyen la búsqueda global en todas las estructuras de calor activas de CTF de la varilla con mayor temperatura de vaina (PCT), la que presenta un menor cociente entre el flujo crítico de calor y el flujo real de calor (CPR/DNBR), y la varilla que almacena más energía durante el transitorio. El objeto final de estos algoritmos es realizar el análisis de integridad de las varillas más desfavorables utilizando el código FRAPTRAN.

3.6. Paralelización de CTF mediante MPI

En ingeniería nuclear es habitual el uso de códigos de simulación numérica para analizar el comportamiento de los diferentes componentes de las plantas nucleares, tanto en funcionamiento normal del reactor como en situaciones menos frecuentes como pueden ser la recarga de combustible y secuencias accidentales.

Frecuentemente, la elevada exigencia en términos de seguridad y el gran beneficio económico que supone la operación a mayor potencia que la inicialmente licenciada, mediante la licencia de nuevos márgenes a través de una ampliación de potencia, hace necesario utilizar modelos de gran nivel de detalle para conseguir unas predicciones que estimen con gran precisión el comportamiento real del sistema. Esto implica aumentar el nivel de detalle de los modelos y de los mecanismos físicos modelados, lo que generalmente se traduce en un alto coste computacional de las simulaciones.

De la mano de los avances de la tecnología informática, el empleo de la computación de altas prestaciones mediante el uso de clústeres de procesadores multi-núcleo se ha extendido por multitud de campos de aplicación. Para adaptarse al empleo de este tipo de computación, la paralelización de los códigos es muy conveniente ya que hace abordable y eficiente simulaciones computacionalmente muy costosas con un solo procesador. Las diferentes técnicas de paralelización permiten el uso de numerosos procesadores (o núcleos) que colaboren en la obtención de la solución a un único problema. Esto no sólo reduce el tiempo de computación, sino que además aumenta la cantidad de memoria disponible haciendo posible la resolución de problemas de gran dimensión.

Aplicando estos preceptos a los códigos acoplados desarrollados se ha decidido paralelizar el código termohidráulico de subcanal empleado. CTF es un código que requiere gran cantidad de recursos computacionales, merced el gran detalle en la descripción geométrica y la descripción de la física del fluido bifásico que se puede alcanzar con sus modelos. Para alcanzar una paralelización efectiva del código se deben alcanzar dos hitos claramente definidos. Estos hitos son paralelizar el algoritmo numérico de discretización semi-implícita de las ecuaciones de conservación del fluido (etapas previas a la solución de la matriz de presiones en el algoritmo SIMPLE), y en segundo lugar resolver el sistema lineal formado por la matriz de presiones de todo el dominio simulado de forma paralela y eficiente. En dicha paralelización se ha sustituido el solucionador original por otro con capacidad paralela y se ha empleado la técnica de división en subdominios del problema original. Para solventar las comunicaciones se ha utilizado el estándar MPI definido en las librerías de código abierto existentes para este tipo de aplicaciones.

La primera fase de la paralelización del código CTF consiste en la integración en el código de una librería paralela para resolución de sistemas de ecuaciones, concretamente se ha utilizado PETSc [62], [63], [64]. En esta sección se describen algunos detalles del código que son relevantes para la paralelización y se describe como se ha implementado y optimizado la librería PETSc en el código CTF.

La segunda fase del proceso de paralelización consiste en la división en subdominios axiales del dominio original descrito en el archivo de entrada de CTF. Para ello se ha realizado una distribución de memoria y de trabajo computacional entre el número total de procesadores destinados a la resolución del problema original. Otra parte importante es la implementación de las comunicaciones necesarias para el intercambio de los datos entre las diferentes unidades de proceso asignadas. Esta fase también está descrita en el presente capítulo.

3.6.1. Optimización del código secuencial original

Ante la envergadura de las simulaciones llevadas a cabo por CTF, que implican unas cantidades de memoria y de tiempo de ejecución realmente importantes, previamente a la paralelización del código resulta imprescindible realizar una revisión y optimización de código secuencial. Este proceso está encaminado a optimizar el uso de memoria y la rapidez del código secuencial.

El primer paso trata de reducir en la medida de lo posible la memoria reservada durante la ejecución del código. Este factor es fundamental en los casos de simulación de grandes dimensiones, ya que pequeños errores en el dimensionamiento de las estructuras de almacenamiento de variables implican grandes cantidades de memoria inutilizada. Este aspecto resulta incluso mucho más importante si tenemos en cuenta que en las ejecuciones paralelas cada proceso necesita su espacio de memoria.

En este sentido se trabajó en la eliminación de datos no necesarios o duplicados y el correcto predimensionado de variables en el código. Mediante este procedimiento se localizaron varias variables, que estaban predimensionadas estáticamente a grandes tamaños, se adaptasen a las necesidades reales de cada ejecución. Mediante estas actuaciones se consiguió reducir drásticamente las necesidades de memoria del código secuencial original, lo que repercutirá positivamente en la eficiencia en la distribución de memoria de cada proceso en las ejecuciones paralelas.

El segundo aspecto a optimizar es el tiempo de ejecución en secuencial. Para ello se realiza una lectura y análisis exhaustivo de todas las subrutinas del código fuente, especialmente centrada en la eliminación de bucles innecesarios, el reordenamiento de bucles para eliminar anidamientos innecesarios y la revisión del dimensionado de los bucles.

Estas actuaciones en algunos supuestos permitieron reducir a la mitad el tiempo de ejecución y disminuir drásticamente la demanda de memoria de acceso aleatorio.

3.6.2. Sustitución del solucionador

Se ha seleccionado PETSc (*Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation*) como nueva librería de solucionadores paralelos para resolver el sistema de ecuaciones lineales de la presión generado por CTF en su esquema de resolución de las ecuaciones de conservación del fluido. PETSc es un software numérico orientado a objetos para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales y paralelizado mediante paso de mensajes (MPI). Está siendo utilizado en muchas aplicaciones científicas en todo el mundo. En PETSc todo el código se construye alrededor de una serie de estructuras de datos y algoritmos que han sido encapsuladas mediante técnicas de orientación a objetos. Su ventaja consiste en trabajar directamente con estos objetos abstrayéndose de la estructura de datos interna, lo que le da una gran potencia al permitir programar los métodos numéricos y aplicaciones habituales sin tener que estar pendiente de multitud de detalles de implementación relativos a las estructuras de datos o la paralelización. En la Figura 3.24 se pueden ver los componentes principales (objetos) de PETSc.

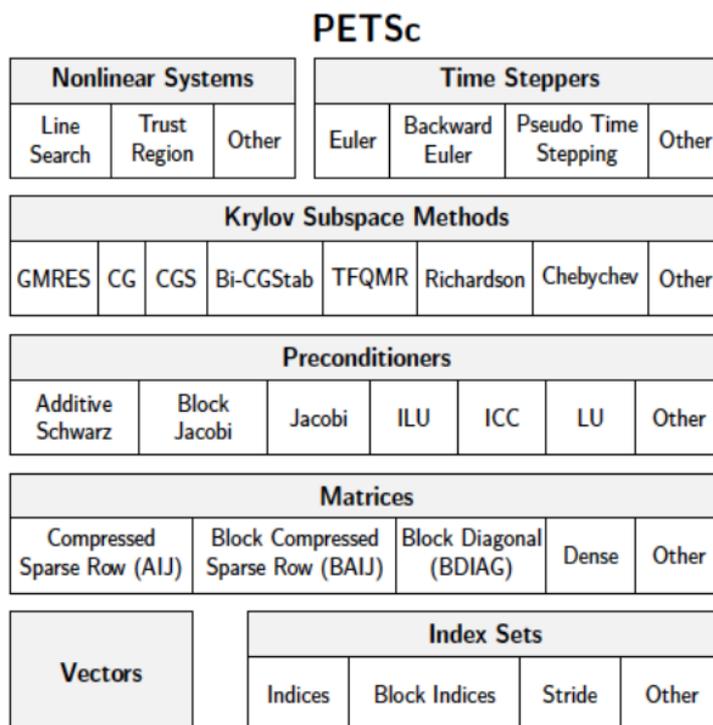


Figura 3.24 Componentes principales de PETSc.

Aparte de algunos objetos auxiliares relativos a la gestión de las mallas, los componentes básicos a nivel de datos que incluye PETSc son los vectores y las matrices. Estos objetos son análogos a los vectores y matrices del álgebra lineal, y PETSc ofrece un gran número de operaciones que permiten realizar los cálculos más habituales, facilitando enormemente la labor del programador. Por encima de ellos se tiene la posibilidad de usar varias clases de solucionadores, tanto lineales como no lineales, y combinarlos con diferentes preconditionadores. Todo ello en el entorno paralelo que el propio PETSc gestiona en función de las características del sistema en el cual está instalado.

Las matrices en PETSc tienen una interfaz independiente de la implementación, lo que implica poder utilizar diferentes formatos de almacenamiento de matrices sin necesidad de modificar el código fuente. Esto permite por ejemplo especificar el formato de almacenamiento al ejecutar el programa, pudiendo así comparar las prestaciones de las distintas alternativas. Por defecto las matrices se almacenan en el formato disperso comprimido por filas. Otras alternativas disponibles son el formato simétrico (almacenando únicamente la parte triangular superior) o el formato por bloques. Todos ellos son estructuras de datos paralelas, con distribución orientada a bloques de filas contiguas, y la

comunicación necesaria para realizar las operaciones en paralelo es gestionada internamente por PETSc. En su uso básico, el programador solo ha de preocuparse de que cada proceso MPI se encargue de rellenar la parte que le ha sido asignada. En este caso se ha empleado el formato disperso comprimido por filas por ser el que más se adapta a la matriz resultante.

La parte fundamental del trabajo realizado en CTF es la sustitución de la librería de solucionadores en serie original SPARSKIT [65], que no permite la paralelización, por la librería paralela PETSc como nuevo medio para resolver los sistemas de ecuaciones lineales. Para ello se sustituyeron las llamadas a SPARSKIT por las correspondientes a PETSc. Previamente es fundamental realizar un análisis del lugar óptimo para la creación, inicialización y destrucción de todos los objetos (matrices y vectores) propios de PETSc necesarios para su funcionamiento. Todo ello codificado en FORTRAN con las estructuras de datos ya existentes en la versión original de CTF.

Antes de utilizarse, PETSc debe instalarse y optimizarse en función de las características del sistema y los compiladores instalados en el equipo donde se desarrollan las simulaciones. Una vez integrado PETSc, se procede a analizar las diferentes posibilidades que este ofrece a la hora de gestionar las matrices, vectores y solucionadores. Para ello se realiza un estudio del patrón de elementos no nulos de la matriz, para poder realizar la reserva de memoria de forma adecuada y en el lugar adecuado. El hecho de reservar correctamente la memoria en los objetos que crea PETSc ofrece importantes ventajas en cuanto a eficiencia a la hora de resolver el sistema de ecuaciones. Además, debido a que el sistema se tiene que resolver muchas veces, tanto en estacionario, hasta alcanzar la convergencia, como en transitorio, se realiza un análisis para estudiar la posibilidad de reusar un preconditionador para ganar velocidad, de forma que se mantenga su estructura invariable durante toda la simulación.

En la fase de optimización hay que averiguar qué combinación de preconditionadores y métodos de resolución son más adecuados para el tipo de problema matricial a resolver. Hay que tener en cuenta que no todas las combinaciones de preconditionador y métodos numéricos funcionan igual para un mismo caso. Para ello se realiza una batería de pruebas que permita analizar la eficiencia de las distintas combinaciones existentes en PETSc de preconditionador y método iterativo para resolver problemas lineales con matrices dispersas [66].

De entre los métodos iterativos para problemas lineales disponibles en PETSc (ver Figura 3.24) se seleccionan como posibles preconditionadores: *Block Jacobi* (con *ILU(0)* como preconditionador local), *Jacobi*, *SOR*, *Additive Schwarz* (con *ILU(0)* como preconditionador local) *ASM*; y como métodos iterativos de resolución de sistemas lineales: *GMRES*, *DGMRES*, *BiCGstab*, *BiCGstab(l)*. Para realizar las pruebas de la manera más general posible, se utiliza un archivo de entrada de CTF en el que se modela un problema 3-D de tamaño medio. Además, se aplican las consideraciones habituales en cuanto selección de modelos y condiciones de contorno.

Los métodos *GMRES* y *DGMRES* han sido eliminados del análisis debido a que no convergen por problemas de condicionamiento de la matriz de presiones. La ejecución secuencial de referencia se realiza con el CTF original, utilizando el método *BiCGstab* con un *ILUT* (Factorización de LU incompleta con estrategia de truncamiento dual) como preconditionador. Desgraciadamente este preconditionador no está disponible en PETSc y no se puede realizar una comparación secuencial con SPARSKIT.

Antes de presentar los resultados, se definen las figuras de mérito (FOM, *Figure Of Merite*) de las simulaciones paralelas. Estas FOM son la aceleración S (*speedup*) y eficiencia de la simulación paralela ξ . La aceleración se define como el cociente entre el tiempo secuencial y el tiempo paralelo (Ecuación 3.32) y la eficiencia se define como la aceleración dividida entre el número de procesos (Ecuación 3.33).

$$S = \frac{t_{secuencial}}{t_{paralelo}} \quad \text{Ecuación 3.32}$$

$$\xi = \frac{S}{N_{procesos}} \quad \text{Ecuación 3.33}$$

En la Tabla 3.9 y Tabla 3.10 pueden observarse respectivamente el tiempo de ejecución total empleado por el solucionador y la aceleración obtenida (Ecuación 3.32) con las diferentes combinaciones de solucionadores lineales y preconditionadores. En la Tabla 3.11 aparece la eficiencia computacional de la combinación preconditionador/solucionador.

Tabla 3.9 Tiempo total del solucionador lineal en segundos.

Combinación resolv./prec.	Número de procesos MPI			
	1	2	4	8
<i>Caso original</i>	125	---	---	---
bcgs-asm	131	72	37	21
bcgs-bjacobi	119	67	33	20
bcgs-jacobi	206	115	61	38
bcgs-sor	153	84	42	26
bcgsl-asm	134	79	39	22
bcgsl-bjacobi	122	86	35	20
bcgsl-jacobi	218	122	64	39
bcgsl-sor	159	93	44	25

Estos tiempos se han obtenido con un HP Proliant con 2 procesadores AMD Opteron 6272 con 16 núcleos de 2,2 GHz y 2M de caché. La memoria RAM disponible era de 96 Gb. El sistema operativo instalado era el CentOS 6.3 con PETSc 3.3-p6 versión. Los resultados presentados corresponden a un caso de prueba con más de 80,000 celdas computacionales y un tiempo de simulación de 1 segundo.

Tabla 3.10 Aceleración (S) obtenida con cada combinación solucionador/precondicionador.

Combinación resolv./prec.	Número de procesos MPI			
	1	2	4	8
bcgs-asm	1.000	1.819	3.541	6.238
bcgs-bjacobi	1.000	1.776	3.606	5.950
bcgs-jacobi	1.000	1.791	3.377	5.421
bcgs-sor	1.000	1.821	3.643	5.885
bcgsl-asm	1.000	1.696	3.436	6.091
bcgsl-bjacobi	1.000	1.419	3.486	6.100
bcgsl-jacobi	1.000	1.787	3.406	5.590
bcgsl-sor	1.000	1.710	3.614	6.360

Tabla 3.11 Eficiencia (ξ) de la simulación obtenida con cada solucionador/precondicionador.

Combinación resolv./prec.	Número de procesos MPI			
	1	2	4	8
bcgs-asm	1.000	0.910	0.885	0.780
bcgs-bjacobi	1.000	0.888	0.902	0.744
bcgs-jacobi	1.000	0.896	0.844	0.678
bcgs-sor	1.000	0.911	0.911	0.736
bcgsl-asm	1.000	0.848	0.859	0.761
bcgsl-bjacobi	1.000	0.709	0.871	0.763
bcgsl-jacobi	1.000	0.893	0.852	0.699
bcgsl-sor	1.000	0.855	0.903	0.795

De los resultados obtenidos se concluye que las combinaciones de *BiCGstab*, *BiCGstab(l)* con los preconditionadores *BJacobi* y *ASM* funcionan de manera similar siendo las más eficientes computacionalmente.

3.6.3. Paralelización en subdominios axiales

Antes de abordar la paralelización del código, es importante definir una estrategia correcta a la hora de definir la parte del código que se ejecuta en paralelo. En primer lugar, se debe realizar un estudio de los tiempos que consume cada uno de los módulos y/o subrutinas que se ejecutaban en el proceso CTF. Para ello se utiliza la herramienta de *profiling* Valgrind [67].

Analizando los resultados obtenidos con Valgrind se aprecia como la iteración externa de CTF (subrutina *outer*) acumula casi el 80% del coste computacional. Esta rutina engloba toda la carga computacional de la iteración externa incluyendo la linealización de las ecuaciones de conservación del fluido, la construcción la matriz Jacobiana de celda y el vector de residuos de la ecuación no lineal para la iteración de Newton-Raphson, la reducción de las matrices Jacobianas de celda y la resolución del sistema lineal de ecuaciones formado por la matriz de presión del dominio simulado, además, de la retro-sustitución de la solución en las ecuaciones de conservación y el cálculo de ecuaciones de cierre. Básicamente, como era por otra parte de esperar, el coste computacional reside en realizar todas las etapas definidas en el algoritmo SIMPLE para resolver las ecuaciones semi-implícitas del fluido bifásico.

Por otra parte, se puede deducir que debido al esquema de discretización por volúmenes finitos de CTF (*upwind* de primer orden) se requiere del uso de valores de celdas vecinas para la discretización de las ecuaciones. Esto implica la necesidad de comunicación entre procesos en el código paralelo. Un último aspecto a tener en cuenta es que la matriz de coeficientes del sistema lineal de presiones es dispersa, por lo que los métodos iterativos son los recomendables para la resolución del sistema como se ha visto en el apartado anterior.

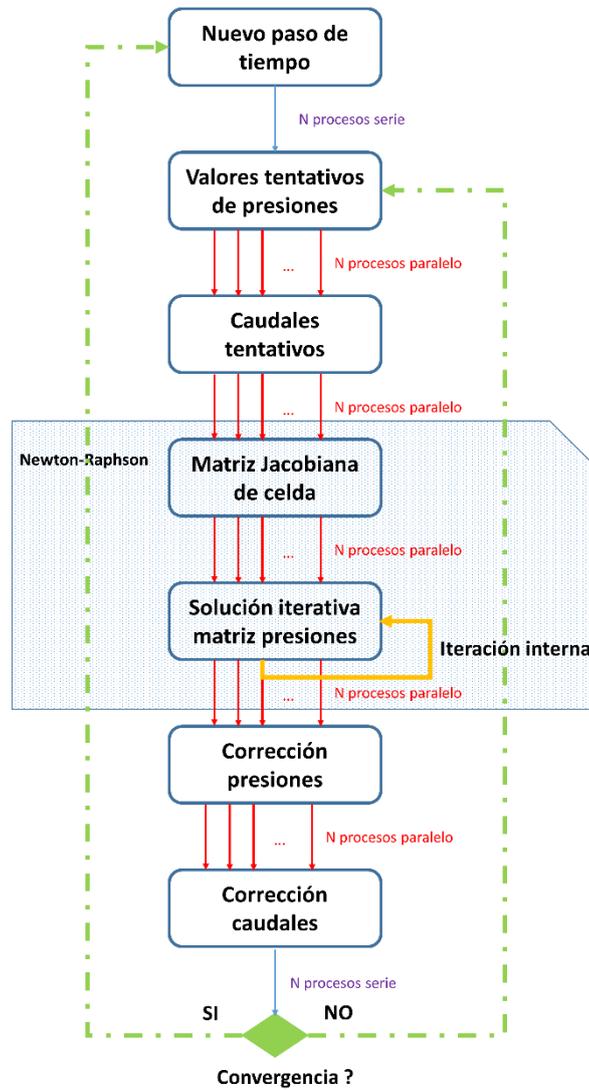


Figura 3.25 Parte paralelizada del esquema de cálculo de CTF.

A tenor de los resultados arrojados por el análisis previo realizado, los esfuerzos en cuanto a la paralelización de CTF se han centrado en el lazo de la iteración externa de CTF. Todos los pasos para completar el mencionado algoritmo SIMPLE de resolución de las ecuaciones del fluido han sido paralelizados (Figura 3.25). Además, se han implementado los puntos de sincronización y distribución de memoria entre procesos para

manejar de forma apropiada el reparto de las variables de estado entre los diferentes procesos.

Con esta estrategia optimizada se consigue focalizar la paralelización en la parte del cálculo que absorbe la mayor cantidad de tiempo. Esto implica que se tengan mayores beneficios a medida que aumenta el número de veces que hay que resolver el sistema de ecuaciones y sobre todo la dimensión del dominio simulado.

Se pueden plantear numerosas estrategias de paralelización en subdominios de la geometría simulada. Estas estrategias dependen de la subdivisión efectuada en el dominio de simulación original, y en cómo éstos se asignan a los diferentes procesos. En geometrías tridimensionales cartesianas, como es el caso de CTF, teóricamente se pueden construir subdominios axiales, radiales o mixtos. Sin embargo, debido a la complejidad de subdividir la geometría radialmente por la propia estructura original de bucles de CTF se ha optado en este trabajo, sólo por la paralelización en subdominios axiales.

Utilizando la paralelización axial se procede a realizar el reparto paralelo de las celdas contenidas en un grupo de planos axiales entre los diferentes procesos MPI disponibles. Cada proceso por tanto tiene asignado un espacio continuo de niveles axiales. Habitualmente el número de niveles axiales en simulaciones nucleares está predefinido, por lo que la escalabilidad del código paralelo está limitada en esta dimensión. La paralelización en el dominio radial podrá ser abordada en posteriores trabajos, pero implicará grandes modificaciones en la estructura interna de CTF.

Como ya se ha comentado, se necesita información de niveles vecinos, por lo que cada proceso debe tener espacio en su memoria para almacenar los datos de estos *niveles virtuales*. Observando el esquema de la Figura 3.26 puede observarse cómo se deben definir grupos de celdas virtuales en la memoria de cada proceso para almacenar la información necesaria de los dominios vecinos (superior e inferior).

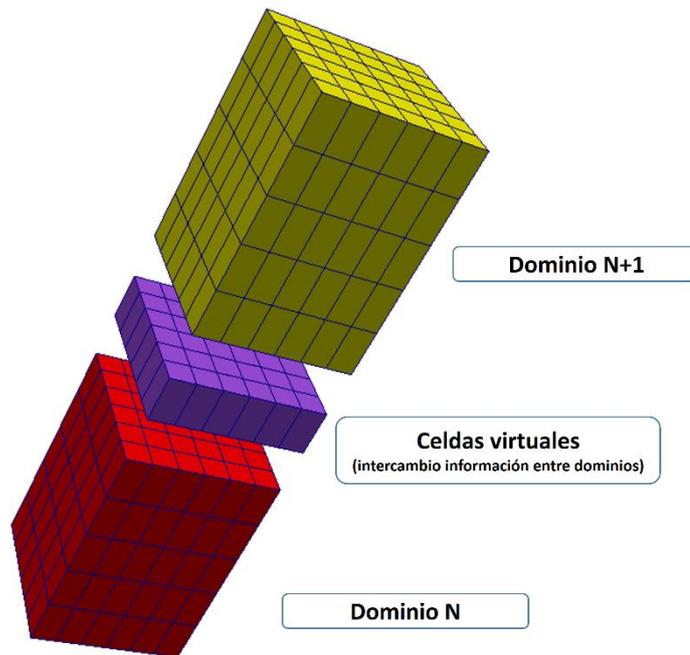


Figura 3.26 Esquema de la paralelización en subdominios de CTF.

La paralelización efectiva del código conlleva cuatro partes claramente diferenciadas que deben realizarse adecuadamente:

- Reparto entre los diferentes procesos de las variables necesarias en función de los planos axiales asignados.
- Reparto de la carga computacional entre los diferentes procesos en la dimensión axial de todos los bucles del código paralelo.
- Comunicación de los datos de los planos axiales que están en la frontera en el reparto entre procesos y que por lo tanto son necesarios en los procesos vecinos.
- Reducción de los cálculos que implican máximos, mínimos, sumatorios y variables de control de convergencia y avance de la simulación. Al estar la carga repartida entre los procesos, todos deben poseer la información adecuada en cada iteración.

Una vez cumplimentadas todas las fases anteriormente descritas, así como asegurada la correcta lectura del archivo de entrada y escritura de los archivos de salida, se está en disposición de comprobar el rendimiento de la paralelización efectuada en el código de subcanal CTF.

3.6.4. Distribución de información durante simulaciones acopladas.

Una vez sustituido el solucionador y realizada la paralelización en subdominios axiales se analiza el último aspecto fundamental a resolver en la paralelización de CTF. Este aspecto comprende la revisión de los acoplamientos entre CTF y el resto de códigos (TRACE, PARCS y FRAPTRAN) en simulaciones conjuntas.

Para analizar este aspecto hay que estudiar detenidamente las comunicaciones de los acoples en secuencial y adaptarlas al código paralelo mediante MPI. Del análisis realizado se concluye la necesidad de seleccionar a uno de los procesos del código paralelo como encargado de realizar tanto las comunicaciones como la ejecución de las tareas relativas al código acoplado con CTF. Los restantes procesos MPI quedarán en espera mientras se realiza el resto de las tareas en la parte secuencial del código que acopla con CTF.

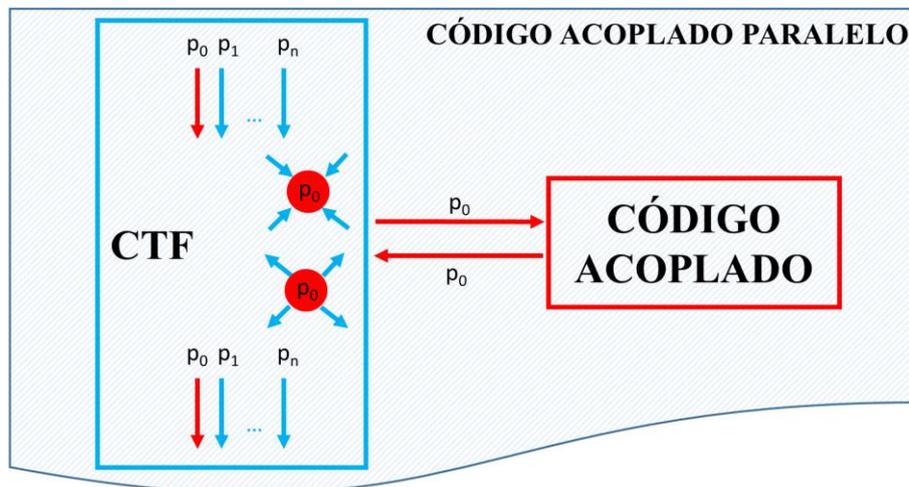


Figura 3.27 Esquema del código acoplado paralelo.

Con anterioridad a realizar las comunicaciones internas en dirección saliente de CTF, el proceso seleccionado solicita a los otros procesos la información a comunicar no disponible en su memoria. Posteriormente este proceso copia la información en la memoria común a ambos códigos acoplados y es el encargado de realizar la llamada al código acoplado ejecutando las respectivas órdenes en el esquema interno del mismo. Finalmente, el proceso seleccionado vuelve a CTF recuperando la información proveniente del código acoplado y distribuyéndola entre todos los procesos MPI. Todo este procedimiento puede seguirse en el esquema de la Figura 3.27 en el que el proceso p_0 es el seleccionado para realizar las tareas relativas al acople.

3.6.5. Escalabilidad y eficiencia de la paralelización

Para comprobar la eficiencia y escalabilidad de la paralelización efectuada en CTF se ha realizado un análisis que consiste en la resolución de un estado estacionario en una simulación acoplada CTF/PARCS. El modelo simulado corresponde con el núcleo de un reactor PWR de tres lazos en el cual el modelo de CTF se ha efectuado varilla a varilla. La malla tridimensional del modelo termohidráulico de núcleo consta de más de 1,700,000 celdas computacionales. Como solucionador se utiliza la combinación Bicsg-tab - BJacobi disponibles en PETSc.

En la Tabla 3.12 se presentan los resultados obtenidos en cuanto a las figuras de mérito del cálculo paralelo (aceleración y eficiencia). El tiempo que aparece en la Tabla 3.12 es el tiempo medio por avance temporal del cálculo. Como puede observarse se pasa de unos 133 s en el caso secuencial a unos 29 s utilizando 7-8 procesos MPI, siendo la eficiencia del paralelismo técnicamente adecuada (superior al 75%) hasta 5 procesos, donde se pierde la escalabilidad del cálculo.

Tabla 3.12 Figuras de mérito de la paralelización realizada.

Procesos MPI	Tiempo (s)	Aceleración	Eficiencia
1	133.778	1.000	1.000
2	73.865	1.811	0.906
3	52.522	2.547	0.849
4	43.055	3.107	0.777
5	35.066	3.815	0.763
6	32.133	4.163	0.694
7	29.272	4.570	0.653
8	29.431	4.546	0.568

Cabe mencionar que axialmente el modelo de CTF se divide en 34 nodos. Este aspecto hace que la necesidad de comunicación a los procesos de subdominios vecinos se incremente rápidamente a partir de 5 procesos reduciendo la eficiencia del cálculo paralelo. Por ejemplo, utilizando 8 procesos se está asignando únicamente 4 planos axiales a cada proceso viéndose limitada la eficiencia del código debido a las comunicaciones.

Con lo que respecta a PARCS, mencionar que el tiempo de cálculo neutrónico es ínfimo comparado con el de CTF (menor de un segundo por paso temporal). Por ello no tiene

grandes implicaciones en términos de coste computacional el realizar los cálculos neutrónicos en secuencial.

Por último, en la Figura 3.28 FOM código acoplado paralelo CTF/PARCS, se presenta la evolución de la aceleración y la eficiencia de la paralelización de CTF para el caso analizado. Como puede observarse existe escalabilidad en el cálculo hasta 5 procesos, donde la pendiente de la aceleración disminuye y la eficiencia de código cae en mayor proporción.

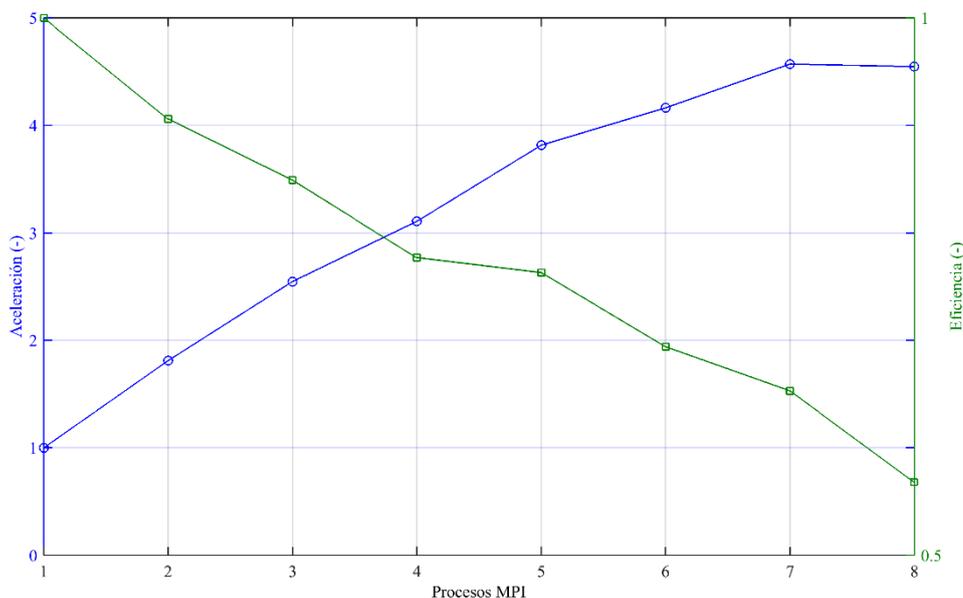


Figura 3.28 FOM código acoplado paralelo CTF/PARCS.

3.7. Plataforma informática: diseño y opciones

Anteriormente se seleccionaron justificadamente los códigos que componen la plataforma, se explicaron los acoples implementados entre las diferentes físicas que se desean analizar y se presentó la optimización mediante paralelización en subdominios llevada a cabo en el código termohidráulico de subcanal CTF. En este apartado se describe cómo todos estos códigos han sido englobados en una plataforma informática común desarrollada como herramienta para el análisis de seguridad nuclear en el contexto del presente trabajo.

La plataforma multifísica engloba una serie de códigos responsables de la simulación de determinados sistemas, y el análisis de diferentes fenómenos que tienen lugar en éstos, para analizar de manera integral el funcionamiento de los reactores nucleares, incluyendo su circuito de refrigeración, ante eventos que pueden causar transitorios en los que resulta

importante el análisis conjunto de aspectos como la termohidráulica, la neutrónica y el comportamiento mecánico del combustible.

Las herramientas informáticas o códigos de simulación que engloba la plataforma desarrollada son TRACE, CTF, PARCS y FRAPCON-FRAPTRAN, de cuya selección ya se habló anteriormente. Como se puede observar de manera gráfica en la Figura 3.29, gracias a los acoplamientos desarrollados en este trabajo, los códigos funcionan como engranajes dentro de la plataforma informática. Cada uno de estos códigos es capaz de proporcionar detalles en características clave al código más general que coordina la simulación.

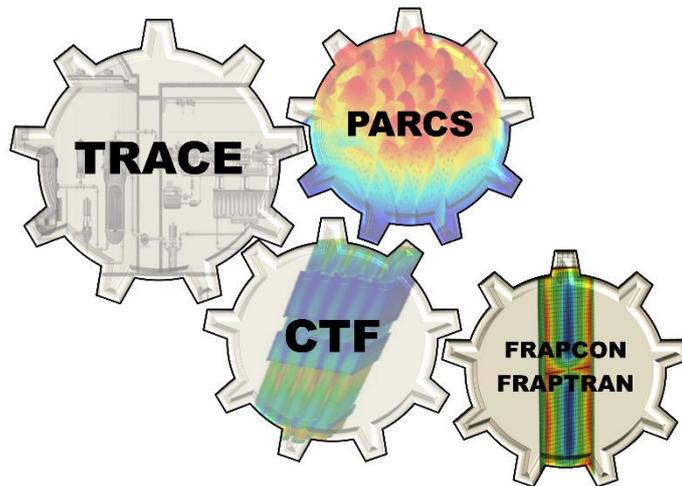


Figura 3.29 Diagrama de los códigos englobados en la plataforma multifísica.

En análisis de seguridad nuclear, los componentes importantes que forman el sistema de refrigeración y de control del reactor nuclear pueden modelarse con el código termohidráulico TRACE. Este código se libera con la capacidad de funcionar acoplado con PARCS, con lo que el comportamiento de la cinética de neutrones del núcleo está cubierto. Sin embargo, aunque se están haciendo esfuerzos por incluir mayor detalle en la definición termohidráulica de los elementos combustibles del núcleo, este código presenta dicho aspecto como limitación. Con objeto de salvar dicha limitación, se ha acoplado TRACE y CTF de manera semi-implícita para conservar la estabilidad numérica durante la realimentación entre ambos códigos termohidráulicos.

El código termohidráulico de subcanal CTF es capaz de definir tridimensionalmente y con gran detalle el comportamiento del fluido bifásico que circula a través de los elementos combustibles nucleares. El nivel de detalle deseado exige alimentar a CTF con los valores de tasa de calor generada por las reacciones nucleares que tienen lugar en cada una de las varillas de combustible. Esta imposición queda cubierta utilizando la

potencia a nivel de varilla que es capaz de calcular PARCS mediante sus algoritmos de reconstrucción de potencia a partir de la solución nodal y funciones de forma de flujo heterogéneo internodal. Esta realimentación con la física nuclear a nivel de varilla de combustible es posible gracias al acople CTF/PARCS desarrollado en el presente trabajo.

Los parámetros limitantes en los transitorios base de diseño son variables siempre referidas a la varilla de combustible más desfavorable. Por este motivo resulta de especial importancia todos los desarrollos planteados alrededor de la definición en detalle de los elementos combustibles y tanto el refrigerante que circula a través de este como las propias varillas que lo componen. Con objeto de dar un paso más en el detalle que se incluye, se han integrado códigos denominados de comportamiento de combustible como el FRAPCON y el FRAPTRAN. Estos códigos han sido desarrollados y utilizados para el análisis térmico, mecánico y químico de varillas aisladas de combustible sometidas a los ambientes existentes en el interior del núcleo de un reactor nuclear.

Gracias al acople CTF/FRAPTRAN se libera la posibilidad de poder analizar el comportamiento transitorio de las varillas de combustible más desfavorables respecto a los parámetros limitantes en los escenarios simulados. Estos análisis efectuados proporcionan una visión de cuán cerca se está de los límites termomecánicos de la varilla. Incluso pueden predecir si alguna de las varillas ha resultado dañada durante el transitorio simulado.

El estudio de dicha fenomenología se cierra con la inclusión de FRAPCON como código aislado dentro de la plataforma. FRAPCON proporciona las condiciones iniciales necesarias a FRAPTRAN. De esta forma las propiedades de los materiales son obtenidas de tablas en función del quemado inicial de la varilla y se inicializan los cálculos transitorios a partir de las condiciones físico-químicas correspondientes al nivel de quemado existente. Otro aspecto destacable es la alimentación de CTF con las propiedades de los materiales en función del quemado existentes en las tablas de FRAPCON y la utilización de conductancias del huelgo entre la vaina y la pastilla adecuadas al nivel de quemado existente.

Cambiando el punto de vista a uno más general, sin necesidad de comprender los fenómenos que simulados por la plataforma, esta puede verse como un conjunto de herramientas englobadas en un bloque (Figura 3.30) que posee tres entradas y una salida. Como entradas se pueden considerar los datos necesarios para modelar el escenario que se desea simular, un usuario que tome decisiones sobre el qué y el cómo se quiere simular y una potencia computacional que mueva los engranajes internos de la plataforma hasta concluir la simulación propuesta por el usuario. Como salida de la plataforma se esperan unos datos que permitan valorar el cumplimiento de los parámetros de seguridad exigidos por el organismo regulador para el escenario simulado. El usuario necesita datos de herramientas auxiliares no incluidas en la plataforma pero que a menudo forman parte de la metodología desarrollada.

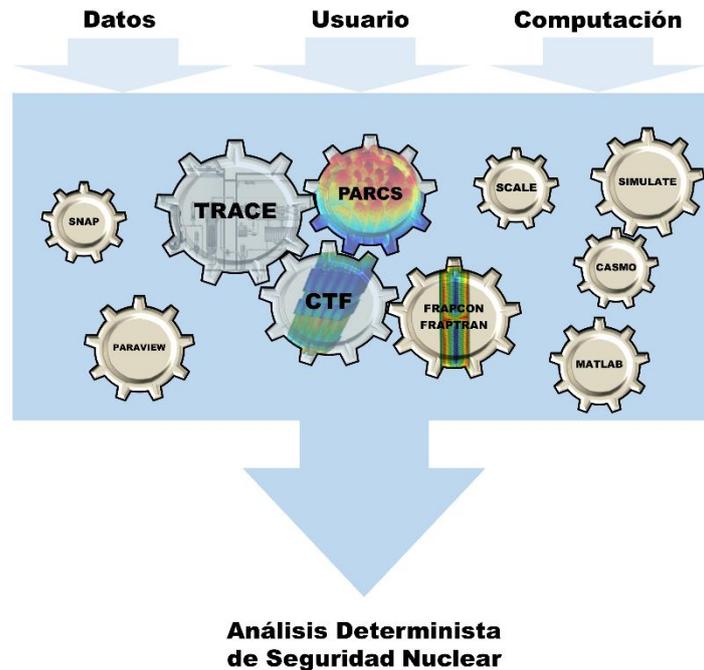


Figura 3.30 Diagrama de bloques de la plataforma multifísica.

Dentro de esta caja que contiene todo el entramado de códigos y herramientas computacionales integrados en la plataforma se utilizarán los datos proporcionados por el usuario para, a través de las simulaciones, obtener las funciones respuesta de los sistemas modelados. Estas funciones respuesta deben ser analizadas por el usuario para concluir si están dentro de los márgenes de seguridad exigidos por los estándares.

Existe la posibilidad de que para conseguir los objetivos marcados sea necesaria la utilización de otros códigos computacionales que no están incluidos en la propia plataforma. Este es el caso de la metodología de obtención de secciones eficaces, los códigos de transporte de malla fina para la obtención de las funciones de forma para la reconstrucción de la potencia a nivel de varilla, códigos de diseño de núcleo para la obtención de los mapas de quemado y herramientas auxiliares para la generación de archivos de entrada y representación de resultados. Estas herramientas que no se incluyen en la plataforma por diversos motivos, si forman parte de la metodología integral necesaria para los cálculos de seguridad nuclear que se abordan en el apartado de aplicaciones del presente trabajo.

3.7.1. Diseño e implementación.

En este apartado se presenta el diseño desde el punto de vista informático de la plataforma multifísica desarrollada. Además, se detalla cómo se han realizado los proyectos

de compilación conjuntos, para qué sistemas operativos y compiladores está disponible y cuáles son las limitaciones actuales en el plano informático.

Desde el punto de vista de la programación se ha desarrollado un único proyecto de compilación conjunto para todos los códigos. Este proyecto consta de un bloque principal que engloba las subrutinas de control de los códigos (módulo de control) en función del archivo de entrada principal definido para la plataforma. Todos los códigos informáticos que componen la plataforma multifísica se compilan como librerías estáticas que son enlazadas una vez finalizada la compilación del módulo de control.

Se ha utilizado la librería de comunicación paralela OpenMPI para añadir la posibilidad de implementar una interfaz de comunicación paralela entre códigos. Además, las funciones MPI que contiene esta librería se han utilizado en la paralelización de CTF. Actualmente la comunicación entre códigos acoplados que se utiliza por defecto es secuencial a través de llamadas internas. No obstante, la plataforma está preparada para implementar las oportunas llamadas MPI que permitan la ejecución y comunicación en paralelo.

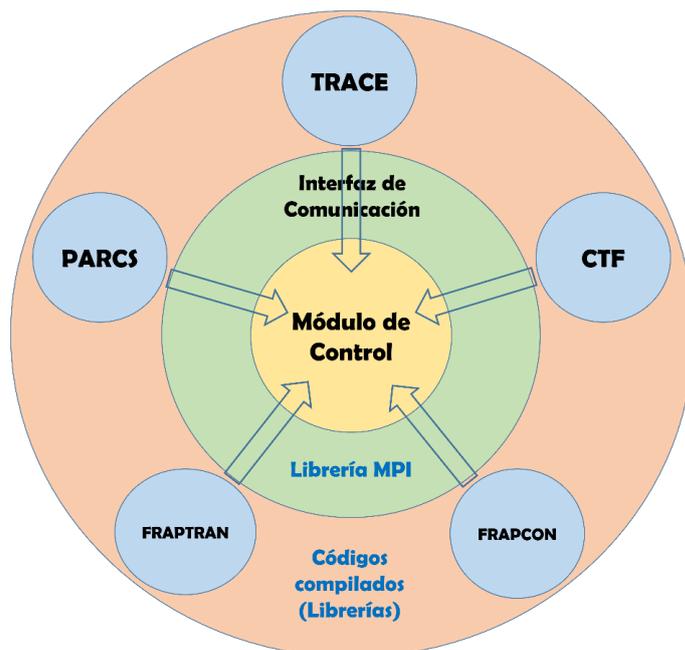


Figura 3.31 Esquema del proyecto de compilación de la plataforma multifísica.

En el diagrama de la Figura 3.31 se puede observar esquemáticamente las distintas capas que componen la plataforma. El núcleo central de la plataforma está compuesto por el proyecto principal de compilación que contiene todas las rutinas de control de ejecución

y manejo de archivos de la misma. Alrededor de este núcleo se sitúa la capa intermedia en la que se engloban las funciones y subrutinas de comunicación entre códigos. Estas rutinas, representadas mediante flechas verdes y rojas en el diagrama de flujos de la Figura 3.32, se emplean para comunicar los distintos códigos entre sí y con el propio módulo de control de ejecución. Como se ha planteado anteriormente, como futuras mejoras de la plataforma figura la implementación de una red de comunicación paralela mediante MPI que cree una verdadera capa de comunicación entre el núcleo central y todos los códigos. Por último, en la capa más externa se agrupan los diferentes códigos incluidos en la plataforma. Estos códigos están compilados como librerías que se enlaza al proyecto principal una vez compilados todas las fuentes. Actualmente aún existe comunicación bidireccional entre los diferentes códigos en la capa externa (flechas verdes en el esquema de la Figura 3.32). No obstante, futuras mejoras en la plataforma informática eliminarán estas comunicaciones pasando a estar coordinadas por el módulo de control.

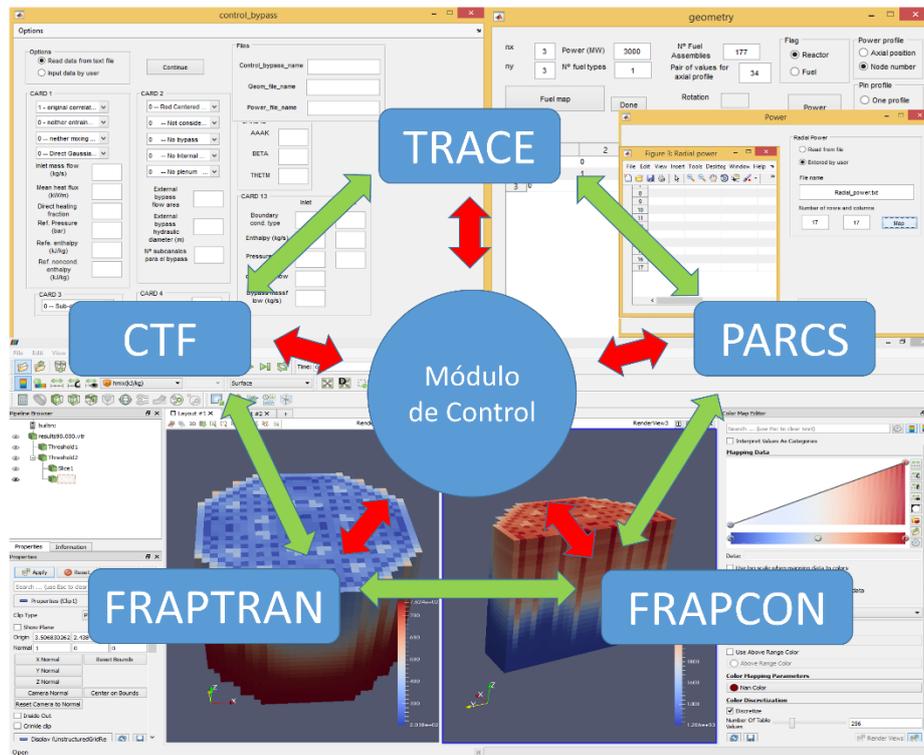


Figura 3.32 Diagrama de flujos de la plataforma informática.

La plataforma informática desarrollada en la presente tesis es compatible tanto con sistema operativo Windows como con sistemas basados en Unix. En concreto se tienen proyectos de compilación desarrollados en *Windows* para compiladores Intel bajo el *Intel*

Parallel Studio XE a través de la interfaz proporcionada por el *Microsoft Visual Studio*. En lo que respecta a los sistemas tipo *Linux* se han desarrollado una serie de *Scripts* para compilación utilizando la herramienta *SCons* basada en programación con *Python*. Utilizando este procedimiento se ha compilado la plataforma mediante compiladores de Intel en el sistema operativo *CentOs*, versión 7.

Desde el punto de vista informático actualmente no existen grandes limitaciones en la plataforma desarrollada. Todos los acoples se encuentran disponibles y los problemas de integración de los códigos han sido resueltos satisfactoriamente. Únicamente se puede hablar de capacidades deseables que no se encuentran disponibles en la actualidad. Entre estas capacidades deseables se encuentra la interfaz de comunicación paralela MPI de la que se ha hablado con anterioridad y la posibilidad de integrar una interfaz gráfica para el usuario.

3.7.2. Capacidades y limitaciones simuladoras.

En este apartado se detallan las capacidades y limitaciones desde el punto de vista de la simulación de los distintos fenómenos físicos que aplican a los análisis de seguridad nuclear. Mencionar que el objetivo de la plataforma es simular la fenomenología que tiene lugar en el sistema de refrigeración, núcleo, elementos de combustible y varillas de combustible del reactor nuclear. En ningún caso se entenderá como limitación a la misma la imposibilidad de simular otros fenómenos o sistemas implicados.

Para entender las capacidades de la plataforma multifísica se presentan los diagramas de flujos de datos e intercomunicación entre códigos que pueden darse durante las simulaciones realizadas. En el diagrama de flujos ascendente de la Figura 3.33, en el sentido desde códigos de mayor detalle a códigos más genéricos, puede observarse la información transmitida desde los códigos para el estudio del comportamiento de la varilla de combustible hasta finalmente llegar a el código de sistema TRACE.

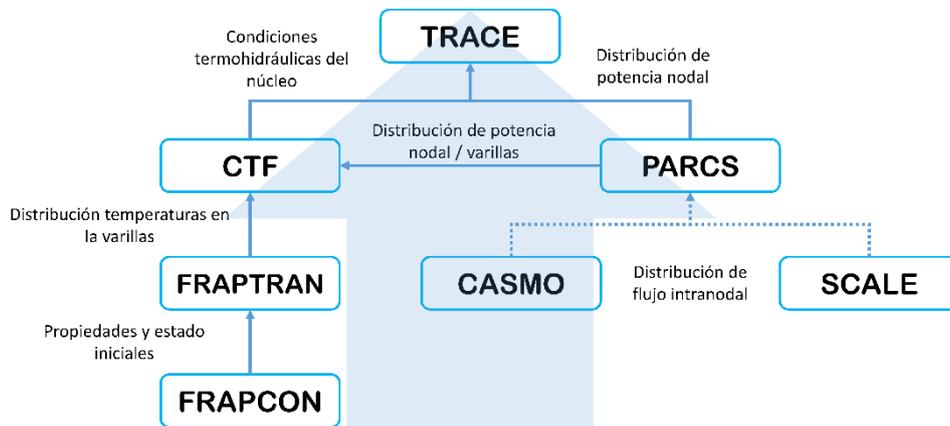


Figura 3.33 Diagrama de flujos ascendentes de los códigos integrados en la plataforma.

Existe capacidad para realizar cálculos multifísicos en los que se representan aspectos como la hidráulica, la transmisión de calor, la neutrónica y la resistencia de materiales desde nivel de sistemas concretos de la instalación hasta el nivel de varilla de combustible. Los acoples realizados posibilitan la capacidad de realimentación entre códigos y los diferentes fenómenos modelados. Aspectos como la apertura de una válvula o la inyección de un sistema de seguridad se verán reflejados en los valores locales como el flujo de calor a través de la varilla, la temperatura de vaina, e incluso valores mecánicos de deformación de la vaina. De la misma forma, efectos locales se transmitirán al resto de sistemas de la instalación nuclear pudiendo cambiar ligeramente el comportamiento de la misma respecto al obtenido cuando se promedian o directamente no se tienen en cuenta dichos efectos.

En el diagrama de flujos descendentes de la Figura 3.34 se describe la información transmitida desde el código de sistema TRACE hacia el resto de códigos hasta finalizar con las condiciones proporcionadas al código de varilla para realizar los cálculos relativos a su integridad. La alimentación con las condiciones de contorno adecuadas durante la simulación gracias al acople entre los códigos permite la predicción de los efectos locales que tienen lugar durante transitorios mediante códigos que proporcionan gran nivel de detalle. En la Figura 3.34 puede apreciarse como códigos como CTF o FRAPTRAN con capacidad para simular a nivel de varilla de combustibles se alimentan con condiciones de contorno de códigos más generalistas como TRACE.

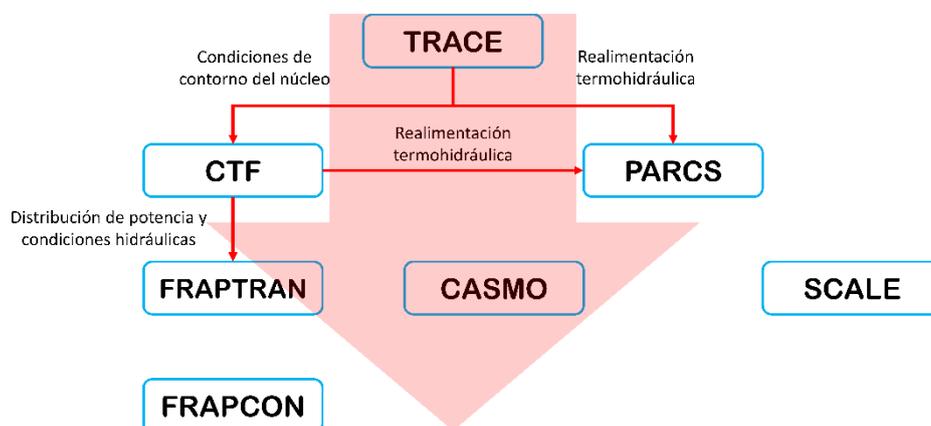


Figura 3.34 Diagrama de flujos descendentes de los códigos integrados en la plataforma.

Como puede observarse en los diagramas de flujos de la Figura 3.32 y Figura 3.34, para los cálculos de PARCS se necesitan herramientas auxiliares no incluidas en la plataforma informática. PARCS necesita secciones eficaces para poder realizar los cálculos de difusión neutrónica y estas deben ser obtenidas utilizando códigos auxiliares. Las secciones eficaces y las funciones de forma del flujo heterogéneo intranodal se pueden obtener utilizando los códigos de transporte de malla fina CASMO o SCALE. No obstante, del primero de ellos no se tiene licencia en el grupo de investigación y de SCALE aún se está desarrollando una metodología propia para la obtención de secciones eficaces utilizando los módulos TRITON/NEWT o POLARIS. Los códigos de transporte y/o quemado para la generación de secciones eficaces no se incluyen en la plataforma informática desarrollada y estas deben calcularse u obtenerse de manera externa. Lo mismo ocurre con las funciones de forma del flujo internodal que se obtienen conjuntamente a las secciones eficaces.

Otro aspecto en el que se tienen limitaciones, en este caso en el plano computacional, es en las capacidades de simulación de múltiples varillas mediante el código FRAPTRAN. En este momento se está trabajando en la modificación del código fuente original de FRAPTRAN para guardar en memoria todos los datos relativos a las varillas que se deseen simular. De esta forma se podrían simular varias varillas durante una misma simulación secuencial con la posibilidad incluso de sustituir el cálculo del sólido en CTF por FRAPTRAN. También se está analizando la opción de realizar simulaciones múltiples mediante la ejecución multiproceso de FRAPTRAN. La tecnología MPI de la que consta la plataforma habilita la posibilidad de realizar simulaciones múltiples de FRAPTRAN utilizando el código actual con pequeñas modificaciones.

3.7.3. Opciones de simulación.

La modularidad con la que se ha desarrollado tanto los acoplamientos entre códigos como la plataforma multifísica finalmente desarrollada es extremadamente alta. Gracias a dicha modularidad existen gran flexibilidad a la hora de realizar las simulaciones necesarias por parte del usuario.

Todos los códigos que componen la plataforma pueden ejecutarse de forma aislada. De esta forma el usuario puede realizar simulaciones aisladas para comprobar y ajustar los modelos e inicializarlos correctamente.

Existe la posibilidad de utilizar aisladamente cada uno de los códigos acoplados que se han presentado en los apartados anteriores. Simulaciones TH-TH mediante TRACE/CTF, TH-NK3D utilizando tanto TRACE/PARCS como CTF/PARCS, simulaciones TH-FP CTF/FRAPTRAN y simulaciones con todas las físicas funcionando al unísono TRACE/CTF/PARCS/FRAPTRAN.

3.7.4. Interfaz con el usuario y archivo de entrada.

El nivel de desarrollo actual de la plataforma multifísica no incluye interfaz gráfico para el usuario. No obstante, durante el desarrollo del presente trabajo se han creado herramientas auxiliares en lenguaje Matlab para la creación automática de archivos de entrada de los códigos. Además, existen disponibles códigos con interfaz gráfico como *SNAP* para crear archivos de entrada para TRACE, PARCS y FRAPTRAN.

Respecto al procesado de archivos de salida de los diferentes códigos existen diversas herramientas disponibles dentro del paquete *SNAP* para tal fin. En CTF se han creado nuevos archivos de salida de forma que la información más importante pueda ser graficada utilizando códigos libres disponibles para la representación de mallas como *el Paraview*.

La comunicación entre el usuario y la plataforma multifísica viene dada a través de un archivo de entrada que debe ser definido en el directorio principal de ejecución. Este archivo de texto debe contener instrucciones precisas con la sintaxis definida para establecer la comunicación usuario-plataforma. El usuario únicamente interviene en la generación de los archivos de entrada de los distintos códigos de la plataforma y en la definición del archivo de instrucciones que define la simulación realizada.

Durante la generación de las instrucciones del bloque de control de simulación de la plataforma multifísica se ha enfatizado en flexibilizar al máximo la capacidad del usuario de confeccionar sus propios esquemas de simulación. Para ello se han generado un conjunto de instrucciones genéricas mediante las cuales el usuario de la plataforma puede confeccionarse el esquema de simulación deseado en función del escenario a simular y de sus propias preferencias.

Tabla 3.13 Listado de instrucciones de la plataforma multifísica.

Instrucción	Significado
BeginSimulation	Comienzo de una simulación
EndSimulation	Fin de una simulación
Code	Código seleccionado
InputPath	Ruta del archivo de entrada
OutputPath	Ruta del archivo de salida
CopyFile	Copiar archivo
RenameFile	Renombrar archivo
MPI	Número de procesos MPI empleados
BeginCoupling	Apertura del lazo de código acoplado
EndCoupling	Cierre del lazo de código acoplado

En el ejemplo presentado en la Tabla 3.14 se muestra el archivo de entrada de la plataforma multifísica necesario para efectuar una simulación aislada de FRAPCON. Con posterioridad se utilizan los datos guardados en el archivo de reinicio de este código como condiciones iniciales de FRAPTRAN en una nueva simulación.

Tabla 3.14 Ejemplo I de archivo de entrada plataforma multifísica.

```

<BeginSimulation>
<Code> FRAPCON
<InputPath> /home/user/platform/fracptran/fracpcon.inp
<EndSimulation>
<Copy File> /home/user/platform/fracpcon.rst /home/user/platform/fracptran/
<BeginSimulation>
<InputPath> /home/user/platform/fracptran/fracptran.inp
<EndSimulation>

```

En el segundo ejemplo de la Tabla 3.15 se muestra el archivo de entrada para una simulación conjunta acoplada entre los códigos de la plataforma multifísica. Una vez definido el bloque simulación, se engloba en el mismo la información necesaria para la simulación acoplada. El bloque de instrucciones comienza con la definición de la ruta del archivo de entrada del código TRACE. Posteriormente se abre un lazo de acople utilizando el orden *BeginCoupling*, dentro de este lazo de acople se incluyen el resto de códigos acoplados hasta su cierre (*EndCoupling*). El primer acoplamiento realizado en el ejemplo es el TH-TH TRACE/CTF y se indica mediante la adición del bloque de información relativo a código acoplado y ruta del archivo de entrada de CTF dentro del lazo de acople. Citar que en este caso la simulación de CTF es secuencial, ya que únicamente se utiliza un proceso MPI como se indica en la instrucción correspondiente.

En la simulación planteada en el ejemplo de la Tabla 3.15 se desea acoplar CTF con PARCS y FRAPTRAN. Para ello se anida otro lazo de acople con posterioridad a la definición de la información relativa a CTF. Dentro de este lazo de acople se incluye la información relativa a ambos códigos acoplados con CTF. Una vez definidas las rutas de los archivos de entrada de PARCS y FRAPTRAN se cierran los lazos de acople terminando la simulación definida mediante la instrucción *EndSimulation*.

Tabla 3.15 Ejemplo II de archivo de entrada plataforma multifísica.

```

<BeginSimulation>
<Code> TRACE
<InputPath> /home/user/platform/trace/trace.inp
<BeginCoupling>
<Code> CTF
<InputPath> /home/user/platform/ctf/ctf.inp
<MPI> 1 /*secuencial*/
<BeginCoupling>
<Code> PARCS
<InputPath> /home/user/platform/parcs/parcs.inp
<Code> FRAPTRAN
<Inputpath> /home/user/platform/raptran/raptran.inp
<EndCoupling>
<EndCoupling>
<EndSimulation>

```

Con la meta de garantizar una completa flexibilidad a la plataforma multifísica se ha diseñado un conjunto de instrucciones muy genéricas como ha podido verse en los ejemplos anteriormente presentados. Resulta relativamente sencillo ampliar el bloque de instrucciones en la plataforma en función de las necesidades que vayan surgiendo. La estructura en capas utilizada para confeccionar el proyecto de compilación, conjuntamente con la definición del módulo central de control de la simulación presentados en la Figura 3.31, permiten la modificación de la estructura de control sin afectar a los códigos que la componen. Este aspecto es muy interesante a la hora de añadir nuevas capacidades a la plataforma y/o migrar a nuevas versiones de los códigos incluidos en la misma.

Capítulo 4

Aplicaciones prácticas y resultados

4.1. Aplicaciones a reactores PWR

En cuanto a las aplicaciones a reactores PWR se han simulado dos transitorios, el primero de ellos se trata de un transitorio operacional real de un reactor PWR de tres lazos tipo KWU-Siemens. El segundo de los escenarios propuestos es una inyección de boro a través del *Chemical and Volume Control System* CVCS situado en uno de los lazos del reactor.

4.1.1. Descripción de los escenarios

4.1.1.1 Análisis de un transitorio operacional de inserción de barra de control.

Una central nuclear está diseñada no sólo para operar en condiciones nominales, sino para llevar a cabo con éxito cambios entre diferentes condiciones de operación y soportar desviaciones más o menos esperadas de su condición normal sin menoscabar la seguridad del reactor. Estas desviaciones pueden ser globales o locales, y es interesante desarrollar herramientas para obtener la respuesta local básica a los transitorios y accidentes previstos o postulados.

En esta aplicación los códigos que componen la plataforma multifísica se han podido validar frente a un transitorio de caída de la barra de control gracias a los datos proporcionados por *Centrales Nucleares Almaraz-Trillo* (CNAT). Estos datos incluyen señales reales para los detectores situados en el interior del núcleo (detectores tipo *Incore*, *Power Density Detectors* (PDD)) y los detectores situados en la zona de blindaje biológico en el exterior de la vasija (detectores tipo *Excore*) durante una prueba de caída de barra de control en la central de Trillo. Se tienen datos de la Central Nuclear (CN) de Trillo (KWU-Siemens PWR) que se utilizan para llevar a cabo este estudio.

La evaluación de la seguridad de una central nuclear requiere el análisis de su respuesta a fallos de equipos postulados y/o malfuncionamientos, que ayudan a determinar las condiciones límite para el funcionamiento, los ajustes del sistema de seguridad y las especificaciones de diseño. Dado que el transitorio propuesto en este trabajo es un evento de operación anormal, parece apropiado identificar y categorizar este incidente e incluir en el estudio el análisis de los criterios de aceptación que lo conciernen.

Un transitorio de caída de barra de control consiste en la inserción inadvertida de una barra de control debido a un mal funcionamiento de su mecanismo de activación. La evolución de la potencia del reactor está dominada por una inserción súbita y continua de reactividad negativa, y la distribución de potencia del núcleo se modifica de forma asimétrica. Debido a esta inserción de absorbente neutrónico, la reactividad disminuye (a medida que disminuye la población de neutrones) y el núcleo del reactor se vuelve subcrítico. El efecto de la densidad del moderador y la temperatura *Doppler* sobre la reactividad conduce al reactor de nuevo a la criticidad en unos segundos, pero en un nuevo punto de funcionamiento estacionario.

Debido a las tasas de disminución de potencia y subsiguiente aumento de potencia, los procesos termohidráulicos centrales tienen poco impacto en el resultado del accidente si la deposición de energía es suficientemente baja para evitar superar el régimen de ebullición nucleada (*Departure of Nucleate Boiling* (DNB)) [69]. Sin embargo, es necesario conocer los criterios de aceptación específicos para realizar un análisis adecuado del transitorio propuesto.

La US NRC publica su *Standard Review Plan* [53] donde se establecen los criterios para usar en esta evaluación. En su literatura, y de acuerdo con la frecuencia de ocurrencia, la caída de la barra de control puede ser identificada como un evento iniciador que se espera que ocurra una o más veces durante la vida de la unidad de energía nuclear, una Ocurrencias Operacionales Anticipadas (*Anticipated Operational Occurrence* (AOO)). Según el tipo, este transitorio se clasifica como *grupo 4: Anomalías de reactividad y distribución de potencia*.

Por lo tanto, una caída de barra de control (adición inadvertida de absorbente) pertenece a las AOOs como parte de los transitorios que se supone que los reactores PWR soportan. Un AOO, por definición, no podría resultar por sí mismo en daño suficiente para impedir la reanudación del funcionamiento de la planta.

Los criterios de aceptación de AOO, tal como se definen en el capítulo 15 del *Standard Review Plan* [53], se establecen mediante los siguientes puntos: a) la presión en el refrigerante del reactor y en los sistemas de vapor principales debe mantenerse por debajo del 110% de los valores de diseño según el código ASME para diseño de calderas y vasijas a presión; b) se debe garantizar la integridad de las vainas de combustible garantizando que el mínimo valor del ratio de sobrepaso del régimen de ebullición nucleada (DNBR) se mantenga por encima con el 95/95 del límite para el DNBR en los PWR; c)

un AOO no debe generar un accidente postulado sin que se produzcan fallos independientes o que resulten en una consiguiente pérdida de la función del RCS o de las barreras de contención del reactor.

Obsérvese que el tercer punto está asegurado por definición, ya que AOO no puede generar un accidente más grave sin que otros incidentes ocurran de manera independiente o resultar en una consiguiente pérdida de función del RCS o de las barreras de contención del reactor. Por lo tanto, en este trabajo, sólo se consideran los criterios a) y b).

Resulta evidente que la obtención de datos experimentales correspondientes a un transitorio anticipado que se espera que ocurra en cada CN durante su operación es una gran oportunidad para calificar códigos neutrónicos-termohidráulicos y modelos utilizados en el análisis de seguridad de la CN. Por lo tanto, este trabajo presenta esta calificación para los códigos integrados en la plataforma.

4.1.1.2 Análisis de un transitorio de inyección de boro.

El escenario simulado consiste en una inyección de agua borada a través de uno de los lazos del modelo desarrollado de reactor PWR de tres lazos tipo KWU-Siemens. La inyección de ácido bórico a través del CVCS es uno de los métodos para controlar la potencia durante sucesos tipo *Anticipated Transients Without SCRAM (ATWS)* en reactores tipo PWR. Desafortunadamente no se poseen datos de concentración de boro en el tanque de almacenamiento ni sobre la tasa de inyección en posibles eventos accidentales. Por el citado motivo el transitorio considerado es puramente académico y se utiliza para comprobar el correcto transporte de boro en el acople TRACE/CTF/PARCS.

En este caso, al no ser un transitorio contemplado en la normativa reguladora en seguridad nuclear no se han calculado límites de seguridad. En cualquier caso, al ser una inyección de boro desde situación de potencia nominal en ningún caso provoca situaciones accidentales ni daño al núcleo. No existen datos para la validación del transitorio por lo se utiliza una intercomparación de resultados cualitativa entre los códigos disponibles.

4.1.2. Modelos desarrollados

En este apartado se presentan los modelos desarrollados para cada uno de los códigos que intervienen en los análisis de seguridad nuclear presentados en el presente trabajo relativos a las aplicaciones en reactores PWR. El orden de presentación realizado comienza con los modelos más generales del código TRACE hasta llegar a modelos más en detalle de varilla de combustible con los códigos termomecánicos incluidos en la plataforma anteriormente presentada.

4.1.2.1 Modelo de sistema de TRACE

Se ha utilizado un modelo originalmente desarrollado por el autor de la tesis para el código RELAP5. El modelo consiste en el sistema primario de un reactor PWR de tres

lazos tipo KWU-Siemens, incluyendo la carcasa de los generadores de vapor que corresponde al circuito secundario. Se ha utilizado el procedimiento de conversión semi-automática para la traducción del archivo de entrada a formato TRACE mediante la herramienta SNAP [70].

El flujo de refrigerante procedente de los generadores de vapor entra en la vasija impulsado por las bombas situadas en las ramas frías. El refrigerante desciende a través del *downcomer* (sector radial externo de la vasija) hasta llegar al pleno inferior en la parte baja de la vasija del diagrama presentado en la Figura 4.1. La vasija cilíndrica incluida en el modelo consta de dos anillos radiales, un solo sector azimutal y 40 nodos axiales. No es necesario gran detalle en la definición del núcleo en el interior de la vasija puesto que se utiliza un núcleo modelado por CTF, y por tanto su dominio es sustituido. Desde el pleno inferior el refrigerante asciende a través del núcleo, cuya nodalización de la región activa consta de 34 nodos axiales. No se incluye ninguna estructura térmica activa para describir la transferencia de calor desde los elementos combustibles al fluido, ya que éstas están incluidas en el núcleo de CTF.

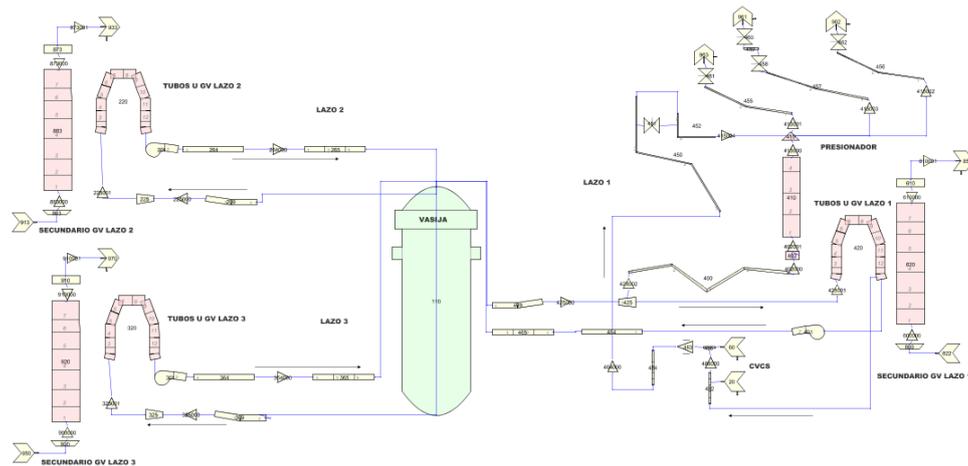


Figura 4.1 Diagrama SNAP del modelo de TRACE del reactor KWU-Siemens de tres lazos.

El refrigerante atraviesa el núcleo de abajo a arriba saliendo del núcleo a través del pleno superior, en el cual se modelan una serie de ramificaciones que representan las salidas de la vasija hacia las ramas calientes del primario. Las salidas a través de las toberas de la vasija se modelan a la altura equivalente del reactor real que equivale al nodo axial número 38 de la vasija.

El refrigerante calentado se envía, a través de la rama caliente, de vuelta a los generadores de vapor. Los tres generadores de vapor son idénticos como se puede observar en la Figura 4.1. Se utilizan componentes unidimensionales *pipe* (tubería) para modelar los tubos en U del primario del generador de vapor. El modelo del lado secundario o carcasa

del generador de vapor consiste en un componente unidimensional conectado a través de una estructura de calor a los tubos en U del primario del generador. Las condiciones de contorno se especifican en la entrada y salida de la carcasa del generador de vapor mediante componentes tipo *fill* y *break*.

El lazo número 1 del esquema de la Figura 4.1 contiene además dos sistemas importantes como son el presionador y el CVCS por donde se realizan las inyecciones y diluciones de boro.

El presionador es necesario para controlar la presión de todo el sistema. Está directamente conectado en dos puntos entre las ramas caliente y fría del lazo de refrigeración número 3. En el modelo realizado el volumen de dicho componente está representado con una única tubería. Además, se incluyen las conexiones en la entrada y salida de la cámara del presionador y las líneas con las válvulas de alivio y de seguridad. Mencionar también la inclusión en el modelo del sistema de pulverización de líquido de la rama fría para aliviar la presión. El comportamiento del presionador se rige por el sistema de control programado para la regulación de la presión del sistema.

El CVCS está conectado al mismo lazo que el presionador. Este sistema forma parte del sistema de inyección de seguridad a alta presión (HPIS) y tiene numerosos cometidos en dentro de los reactores tipo PWR. Se utiliza para añadir hidrógeno para combinación con cualquier oxígeno presente en el sistema de refrigeración del reactor mitigando la corrosión. También se añade a través del CVCS hidróxido de litio para controlar el pH (acidez-basicidad) del sistema de refrigeración del reactor. Se añade o se elimina ácido bórico para controlar la potencia en el reactor. El sistema también elimina las especies químicas no deseadas. En este caso el CVCS se ha incluido en el modelo con el fin de optimizar la reproducción de las diluciones e inyecciones de boro. El modelo realizado es bastante simplificado y consta de dos tanques a través de los cuales se efectúa la inyección de refrigerante borado a la rama fría, previa extracción de la misma cantidad de refrigerante del circuito primario.

4.1.2.2 Modelo de núcleo de CTF

El núcleo del reactor PWR de tres lazos tipo KWU-Siemens se realiza mediante el código termohidráulico de subcanal CTF. Existe la posibilidad de realizar diversos modelos de núcleo mediante CTF en función del grado de detalle deseado. Estos grados de detalle son, básicamente, el modelo a nivel de elemento combustible y modelo a nivel de varilla de combustible. Con el fin de optimizar los tiempos de computación en función del nivel de detalle requerido y de la longitud del transitorio simulado se han desarrollado ambos modelos. Los dos niveles de detalle se analizan de forma conjunta comenzando con la descripción del núcleo utilizando elementos combustibles colapsados radialmente y terminando con el detalle de dichos elementos a nivel de varilla de combustible (o subcanal).

El modelo de núcleo del reactor en cuestión consta de 177 elementos de combustible más una región estructural externa al núcleo activo, por la que pasa el refrigerante, conocida como baipás del núcleo. Los elementos de combustible poseen una anchura (*fuel pitch*) de 23 cm. Radialmente el núcleo se ha dividido en 178 canales termohidráulicos, de los que 177 corresponden al núcleo activo y el restante al baipás del núcleo. En el esquema de la Figura 4.2 se representa el modelo de núcleo desarrollado en CTF, en color azul se representa la zona activa del núcleo y en rojo la región correspondiente al baipás. Axialmente el modelo se ha dividido en 34 nodos de 10.625 cm de altura.

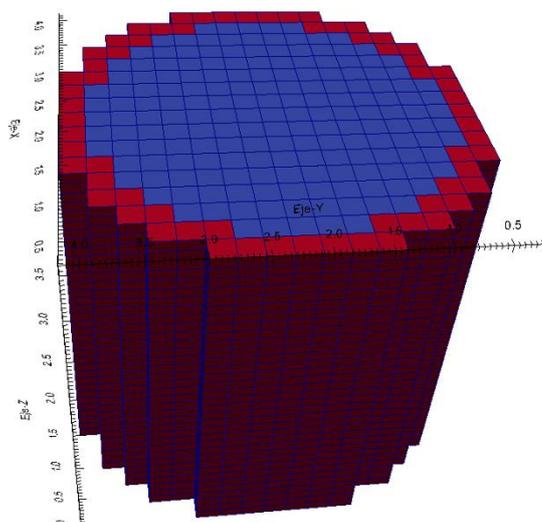


Figura 4.2 Esquema del modelo de CTF del núcleo del reactor KWU-Siemens a nivel de elemento combustible.

Todos los elementos de combustible cargados en el núcleo poseen una matriz de 16 por 16 varillas, separadas entre ellas 1.54 cm (*pin pitch*). Las varillas poseen un diámetro de 1.077 cm y una longitud de 3.4 m. Este diseño de combustible consta de 236 varillas de combustible y 20 tubos guía para las barras de control. Los elementos de combustible contienen de 6 rejillas espaciadoras distribuidas a lo largo de su longitud además de un cabezal inferior y superior que aglutinan estructuralmente las varillas de combustible.

Teniendo en cuenta los aspectos geométricos, el modelo de núcleo a nivel de elemento combustible suma radialmente las áreas y perímetros de las varillas de combustible obteniendo un área y diámetro hidráulico equivalentes al de todo el elemento combustible. Igualmente se modela una única varilla de combustible equivalente a 236 reales y un único tubo guía como estructura de calor disipativa. Recapitulando, las dimensiones de la malla cartesiana que constituye el modelo físico realizado, la parte hidráulica consta de 6,052 celdas computacionales y la parte térmica de 12,070 elementos en los que se tiene que efectuar el cálculo de la conducción calor.

Por el contrario, cada uno de los elementos de combustible del modelo varilla a varilla de CTF consta de 256 canales termohidráulicos. Térmicamente se representan las 236 estructuras de calor calefactados que representan las varillas de combustible nuclear y los 20 tubos guía de las barras de control. De nuevo se han modelado las 6 rejillas separadoras mediante coeficientes de pérdidas de aplicados a cada subcanal en cada uno de los niveles axiales en los que se sitúan. También se aplican coeficientes de pérdidas de presión en los cabezales del combustible. La disposición radial de varillas de combustible y tubos guía dentro de la matriz de combustible se presenta en la sección radial de la Figura 4.3 conjuntamente con el esquema axial del modelo realizado.

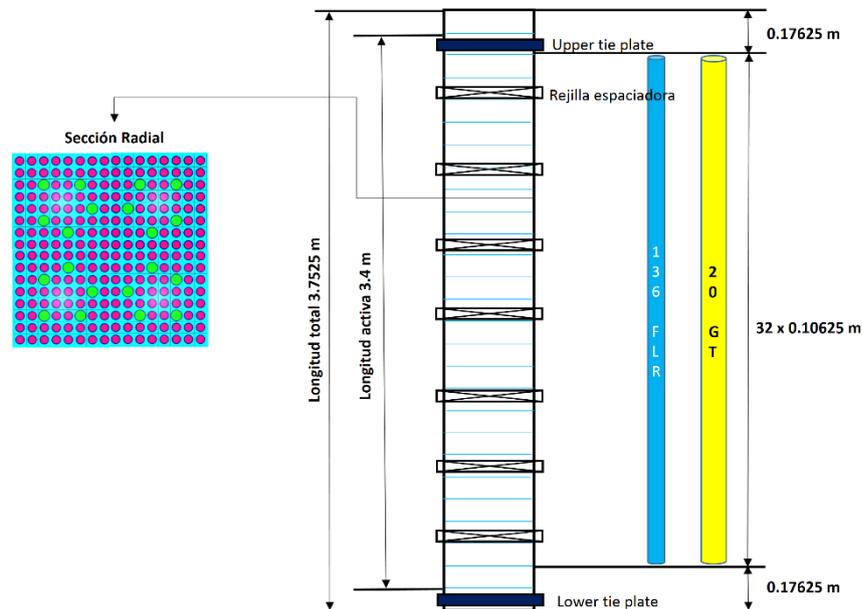


Figura 4.3 Esquema del modelo de CTF de los elementos combustibles PWR cargados en el núcleo del reactor KWU-Siemens.

En el caso del modelo de núcleo varilla a varilla, éste consta de una malla análoga a la presentada en la Figura 4.2, pero en la que cada elemento de la zona activa (celdas de la región azul) se subdivide a su vez en 256 subceldas (como en la Figura 4.3 izquierda). Analizando los elementos de la malla, se pueden calcular un total de 1,540,609 celdas en el dominio fluido. Por otra parte, existe análogo número de elementos en la malla térmica sobre los que se debe resolver la ecuación de la conducción de calor.

4.1.2.3 Modelo neutrónico de núcleo de PARCS

El modelo neutrónico asigna un nodo radial homogeneizado a cada elemento de combustible. Por tanto, el núcleo está modelado mediante 177 nodos radiales en su parte

activa (zona roja en la Figura 4.4) y según el diseño del mismo existen otros 64 nodos que los rodean correspondientes al reflector (zona azul en la Figura 4.4). Axialmente, al igual que en los modelos termohidráulicos, el núcleo se divide en 34 niveles, de los que 32 corresponden a la zona activa y 2 de ellos al reflector superior e inferior. En el caso neutrónico la malla está compuesta por 8,194 elementos.

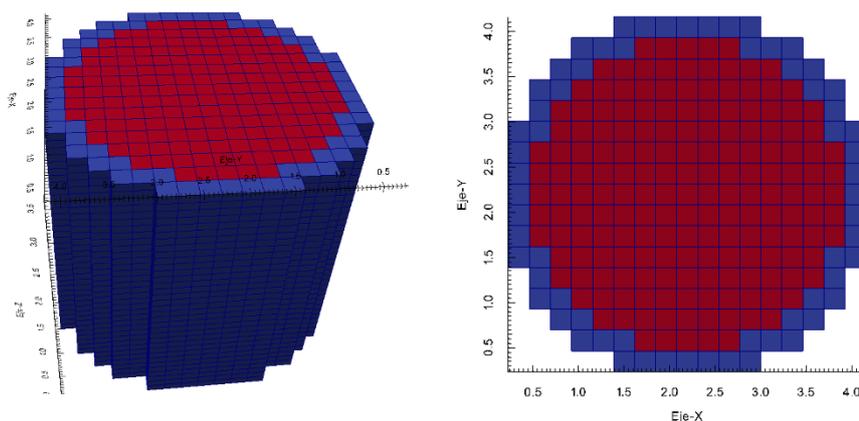


Figura 4.4 Malla neutrónica de PARCS para el núcleo del reactor KWU-Siemens.

4.1.2.4 Modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN

Los modelos geométricos desarrollados para los códigos FRAPCON y FRAPTRAN son idénticos. En ellos se describen las principales características de la varilla de combustible y los materiales que la componen incluyendo datos sobre el enriquecimiento y la densidad de compactación de las pastillas, materiales estructurales de la vaina, datos geométricos en frío, etc. En el caso del reactor analizado, todas las varillas de combustible son geoméricamente análogas.

En el caso de las varillas que componen los elementos de combustible del núcleo analizado presentan un diámetro externo de 1.077 cm, la vaina tiene un espesor de tan solo 0.726 mm y la pastilla de combustible un diámetro de 0.9171 cm. Las varillas tienen una longitud total de 3.61 m de los que son activos 3.4 m. El enriquecimiento de las varillas oscila entre el 1.9 % y el 4.2 % en peso de ^{235}U .

Partiendo de estos datos geométricos, el modelo desarrollado para los códigos FRAPCON y FRAPTRAN engloba a una sola varilla de combustible rodeada por la porción de refrigerante que la baña. Radialmente la varilla se ha dividido en 18 nodos, uno representa la vaina, otro el huelgo y 16 la pastilla de combustible. Axialmente se han utilizado 32 nodos además de los plenos inferior y superior seleccionados por defecto por los códigos.

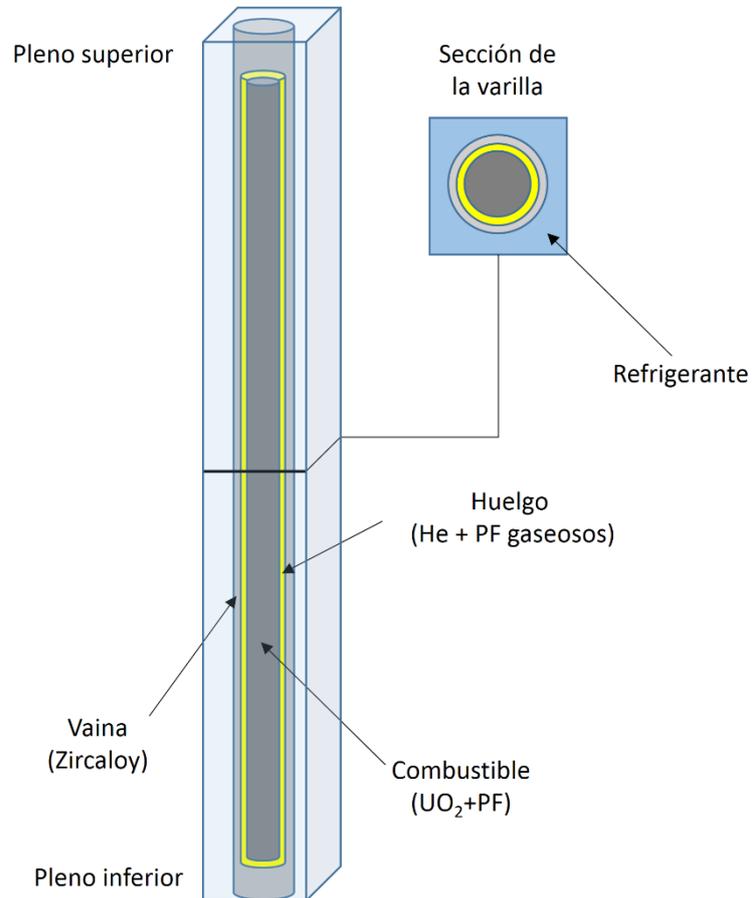


Figura 4.5 Croquis del modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN.

Con lo que respecta al fluido que rodea a la varilla se ha definido un área nominal y diámetro hidráulico equivalente al subcanal que rodea a la varilla (anchura igual al *pin pitch*). La estructura de calor equivalente viene también definida en el archivo de entrada en el que se proporciona el flujo lineal de potencia y los perfiles axial y radial de generación de calor en las pastillas de combustible. Cuando FRAPTRAN está acoplado con CTF, estos valores tienen que ser equivalentes en ambos códigos y son comunicados durante la inicialización.

4.1.2.5 Datos y herramientas auxiliares

En este apartado se presentan los datos y herramientas auxiliares necesarios para completar los escenarios plantados con el reactor PWR de diseño KWU-Siemens. Estos datos han sido obtenidos mediante procedimientos y códigos externos de apoyo a los incluidos en la plataforma informática desarrollada. Como datos adicionales para la simulación de los transitorios se necesitan las secciones eficaces para el cálculo neutrónico, las funciones de forma del flujo intranodal utilizadas en la reconstrucción de la potencia a nivel de varilla, y el mapa de quemados del núcleo para cargar las propiedades de los materiales en CTF.

Las tablas de secciones eficaces han sido proporcionadas por *Iberdrola Generación Nuclear S.A.* en formato *nemtab*. Estas tablas poseen un número variable de composiciones isotópicas diferentes generadas en función del diseño del elemento de combustible y el quemado. Entre las isotopías generadas se incluyen las secciones eficaces asignadas al reflector superior, inferior y radial del núcleo. La metodología utilizada para la generación de secciones eficaces es SIMTAB. Esta metodología, desarrollada en la *Universitat Politècnica de València* en colaboración con *Iberdrola Generación Nuclear S.A.*, se alimenta con datos de los códigos CASMO4-SIMULATE3 y genera las secciones eficaces en función de la temperatura del combustible, la densidad del moderador, la concentración de boro y la inserción de barras de control [71], [72].

Las secciones eficaces de los casos de aplicación de la plataforma multifísica a reactores tipo PWR están tabuladas siguiendo la parametrización (*branches*/estructura de ramas) que se presenta en la Tabla 4.1 y Tabla 4.2 para los transitorios de inserción de barras de control e inyección de boro respectivamente.

El parámetro CR (*Control Rod*) representa la inserción de la barra de control. Cuando CR=0, la sección eficaz se calcula sin tener en cuenta los materiales de la barra de control. Cuando CR=1, los materiales estructurales y absorbentes de la barra de control se añaden al modelo del código de transporte para la generación de secciones eficaces, en este caso CASMO4.

El parámetro *Boro* representa la concentración de boro en partes por millón (ppm) existente en el refrigerante que forma parte del material homogeneizado sobre el que se ha obtenido la sección eficaz.

Tabla 4.1 Parametrización de las secciones eficaces para el transitorio de inserción de barra.

CR	Temperatura combustible (K)						Densidad Moderador (kg/m ³)					
0	547	618	800	900	1000	1200	300	450	625	700	750	800
1	547	618	800	900	1000	1200	300	450	625	700	750	800

Tabla 4.2 Parametrización de las secciones eficaces para el transitorio de inyección de boro.

Boro	CR	Temperatura combustible (K)					Densidad Moderador (kg/m ³)				
639	0	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914
	1	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914
1570	0	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914
	1	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914
2500	0	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914
	1	442	547	800	1000	1300	222	341	645	743	914

Con lo que respecta a la obtención de las funciones de forma del flujo internodal para el cálculo de reconstrucción de potencia a nivel de varilla de PARCS, se han utilizado los valores de flujo espacial colapsado a dos grupos procedentes de la secuencia de quemado de TRITON/NEWT de la plataforma SCALE6.2.

Para la reconstrucción de potencia en las varillas se necesita incluir las funciones de forma del flujo para cada grupo de energía y para combustible con barra y sin barra de control en el archivo de entrada de PARCS. Existe una limitación en PARCS a la hora de introducir las funciones de forma cuando se utilizan secciones eficaces en formato *nemtab*. Esta limitación se debe a que sólo se puede introducir una función de forma para un único diseño de combustible y estado de quemado del mismo. Por este motivo se deben utilizar valores promedio de quemado y el diseño mayoritario en el núcleo para el cálculo de dichas funciones.

En el procedimiento utilizado para obtener la función de forma se han realizado algunas suposiciones: se utiliza el quemado medio del núcleo como punto de quemado para la obtención de las funciones; el combustible fresco inicial (antes del quemado) tiene un enriquecimiento equivalente al máximo existente en el núcleo, en este caso del 4.2% en peso de ²³⁵U; se asume simetría un cuarto en el elemento combustible.

La Figura 4.6 muestra la representación gráfica de los materiales que componen la geometría desarrollada en SCALE para los elementos de combustible con barra (derecha) y sin barra de control (izquierda). Las funciones de la forma de flujo internodal se obtienen superponiendo una malla 2-D cartesiana sobre el elemento combustible y capturando los valores de flujo para dos grupos de energía (grupo térmico y rápido).

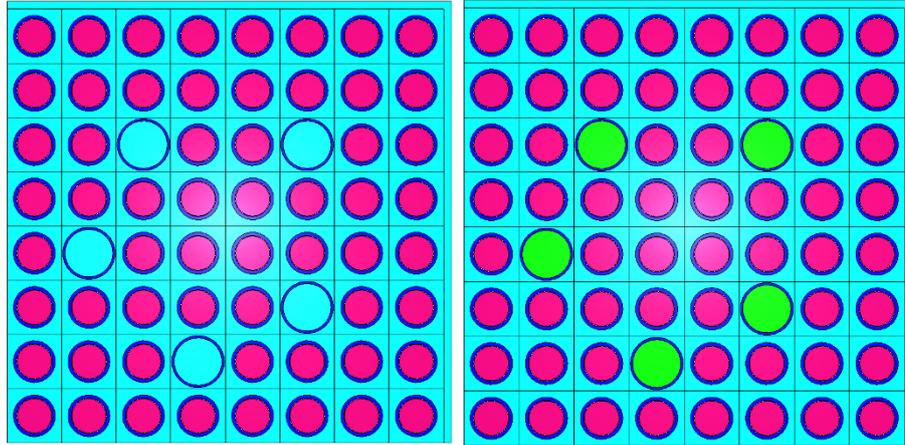


Figura 4.6 Diseño de los elementos combustible en el archivo de entrada de TRITON/NEWT (sin barra de control izquierda, con barra de control derecha).

Las celdas de la malla superpuesta coinciden (o son submúltiplos) de las celdas de varilla (*pin cells*) del elemento combustible. De esto modo los flujos obtenidos pueden normalizarse directamente y utilizarse como funciones de forma dependientes del grupo de energía y la inserción de barra en PARCS. La Figura 4.7 y la Figura 4.8 representan los flujos neutrónicos térmicos y rápidos calculados mediante la secuencia TRITON/NEWT en la malla superpuesta sobre los elementos de combustible.

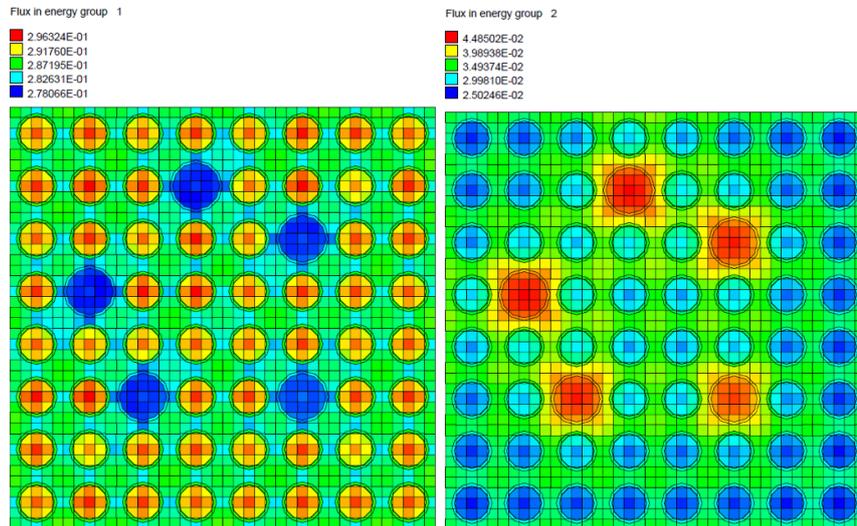


Figura 4.7 Distribución de flujos (flujo rápido izquierda y flujo térmico derecha) para el elemento combustible PWR sin barra de control.

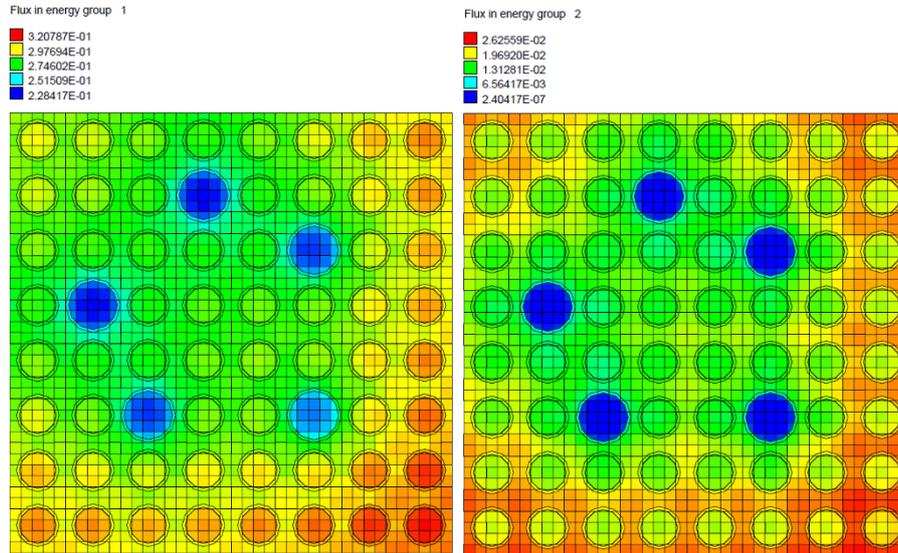


Figura 4.8 Distribución de flujos (flujo rápido izquierda y flujo térmico derecha) para el elemento combustible PWR con barra de control.

Como último aspecto que debe ser preprocesado externamente para su uso como dato en la plataforma multifísica se encuentra el mapa de quemado de los elementos de combustible del núcleo. Los mapas 2-D y 3-D de quemado medio de los elementos de combustible, el mapa 2-D se representa en la Figura 4.9 para el estado inicial del núcleo de la C.N. de Trillo, ha sido proporcionado a la plataforma a partir de los datos existentes en el código de referencia para el seguimiento del núcleo, SIMULATE.

res del código de referencia con los resultados de la simulación realizada. Se puede observar que el mayor error reside en la predicción de la caída de presión del núcleo que ronda el 3.8%. El error podría estar relacionado con la diferente definición de las pérdidas locales en los cabezales de entrada y salida de los elementos combustibles modelados en CTF respecto a S3. En cualquier caso, los errores cometidos en el ajuste estacionario del modelo están dentro de los límites tolerables para este tipo de simulaciones.

Tabla 4.3 Resumen de los resultados del estado estacionario de TRACE/CTF en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

Variable	SIMULATE 3	TRACE/CTF	Error (%)
Caudal activo (kg/s)	15605.55	15615.34	0.063
Caudal baipás (kg/s)	970.25	971.34	0.11
Potencia total (MWt)	3009.98	3006.88	0.10
Caída presión núcleo (kPa)	122.9	118.2	3.82

4.1.3.2 Estado estacionario PARCS

Con objeto de verificar las secciones eficaces y el modelo neutrónico, se ha realizado una simulación de un estado estacionario con el código PARCS funcionando en solitario. Recordar en este punto que se ha utilizado la metodología SIMTAB para obtener los conjuntos de secciones eficaces para las diferentes isotopías de acuerdo con el quemado del combustible y diferencias en su diseño. Las secciones eficaces están tabuladas en función de la densidad del moderador, la temperatura del combustible y la concentración de boro en el refrigerante. Es imprescindible proveer a PARCS de las condiciones termohidráulicas del núcleo. Estas condiciones de contorno para el cálculo neutrónico se obtienen, conjuntamente a la generación de secciones eficaces, a partir de los resultados de la simulación del núcleo con S3.

Generalmente para la verificación de las secciones eficaces y los modelos neutrónicos se comparan los perfiles de potencia axial y radial colapsado en el plano medio del núcleo. Otro parámetro que debe contrastarse con el código de referencia en la metodología SIMTAB para la generación de secciones eficaces es el autovalor fundamental de la potencia o factor de multiplicación (k_{eff}).

Siguiendo el procedimiento habitual, en la Figura 4.10 se muestra una representación comparativa de los perfiles de potencia axial obtenidos para el punto seleccionado del ciclo de combustible con SIMULATE y PARCS. En la Figura 4.11 se muestran los errores nodales cometidos en el perfil de potencia radial en el plano medio del núcleo.

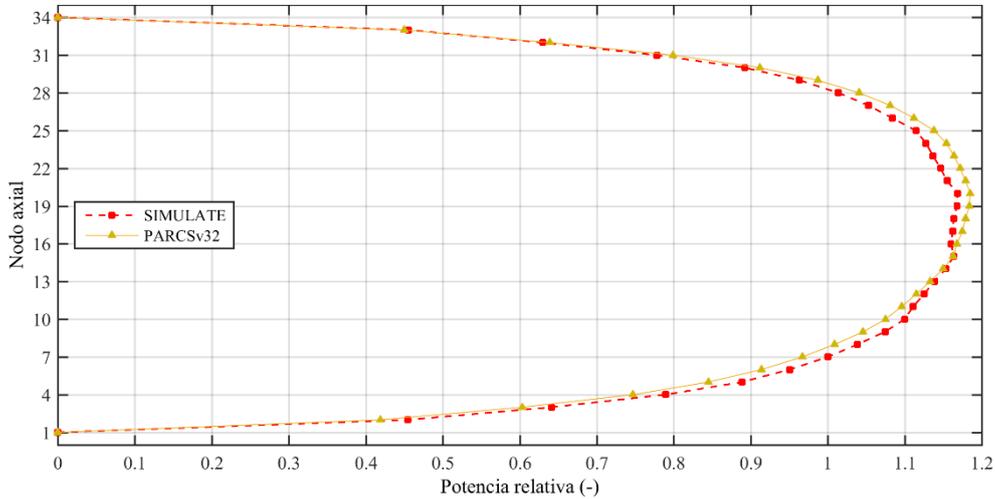


Figura 4.10 Perfil axial de potencia del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

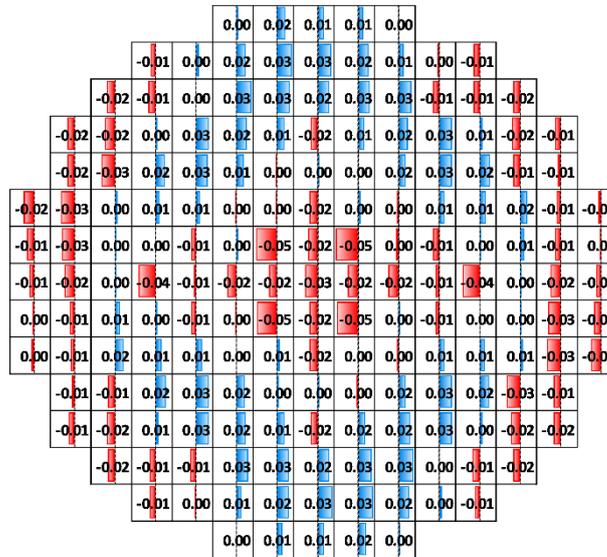


Figura 4.11 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

Los resultados mostrados gráficamente en las Figura 4.10 y Figura 4.11 se ven refutados con los errores mostrados en la Tabla 4.4. La comparación muestra el error absoluto (E_a) del parámetro k_{eff} en pcm (por cien mil) y el error cuadrático medio (RMSE) en porcentaje de la distribución de potencia radial y axial.

Tabla 4.4. Resumen de los resultados del estado estacionario de PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

Código	k_{eff} (-)	$E_a k_{eff}$ (pcm)	RMSE perfil axial (%)	RMSE perfil radial (%)
SIMULATE3	1.00014	---	---	---
PARCSv3.2	1.00077	63.0	3.13	1.86

Analizados los resultados obtenidos y los errores en la distribución de potencia y la k_{eff} , se puede concluir que tanto las secciones eficaces como el modelo y opciones del archivo de entrada de PARCS son correctos. Una vez contrastada la validez con la simulación de PARCS en solitario se está en disposición de realizar cálculos acoplados.

4.1.3.3 Estado estacionario FRAPCON

En este apartado se presentan los resultados del estado pseudo-estacionario realizado con FRAPCON para obtener los valores de conductividad del huelgo en función del quemado (utilizados por CTF) y el estado de inicial para las simulaciones de FRAPTRAN. Además de los datos geométricos de la varilla de combustible, se han empleado valores promedio de núcleo para el enriquecimiento (4.2 % en peso) y el flujo lineal de potencia (20.71 kW/m). Este no es el procedimiento más correcto, ya que se deben de realizar cálculos para todas las varillas con distinto enriquecimiento. Sin embargo, las limitaciones a simular una sola varilla del acople CTF/FRAPTRAN, invitan a utilizar, por simplicidad, una varilla promedio. En la Figura 4.12 se presentan en forma de gráfico los valores de conductividad del huelgo en función del quemado para una varilla promedio del núcleo PWR.

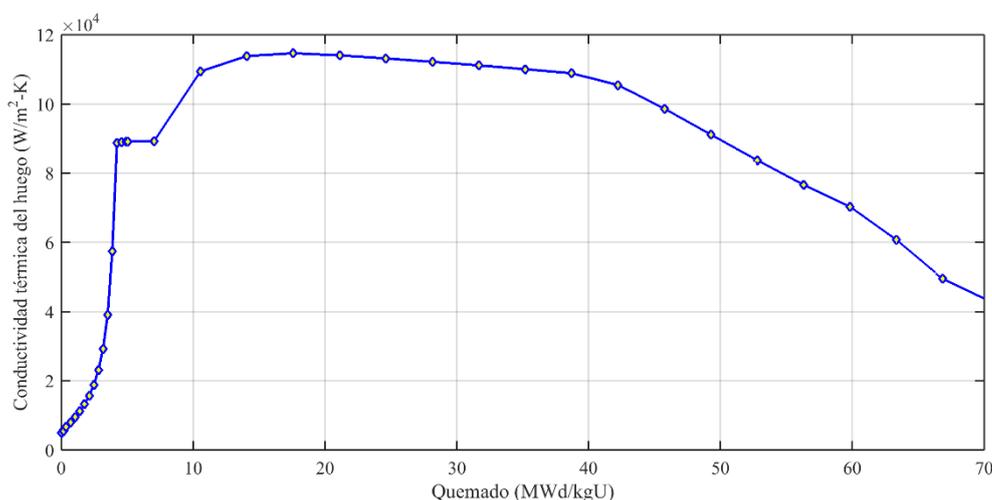


Figura 4.12 Evolución de la conductividad del hueco en función del quemado para la varilla de combustible del núcleo PWR.

En el futuro también se plantea alimentar a CTF con valores geométricos dependientes de la temperatura y el quemado obtenidos mediante el pseudo-estacionario con FRAPCON. Estos valores interesantes para el cálculo térmico en CTF son las dimensiones de la pastilla de combustible, del hueco y la vaina y la capa de ZrO_2 que contiene la vaina.

4.1.3.4 Estado estacionario paralelo acoplado TRACE/CTF/PARCS

El siguiente paso de la metodología aplicada, previo a la realización de los transitorios acoplados, contempla la resolución de un estado estacionario acoplado para proporcionar a las diferentes físicas modeladas con los códigos condiciones iniciales estables antes del comienzo del transitorio.

Para la verificación del estacionario acoplado se comparan de nuevo los resultados con el código de referencia para estacionarios y seguimiento del ciclo del núcleo, S3. El procedimiento es similar al presentado en la verificación del estacionario de PARCS en solitario. Los perfiles axiales y radiales de potencia y el primer autovalor del problema del esquema de carga del núcleo, calculados a partir de la solución nodal de TRACE/CTF/PARCS se comparan con los obtenidos con el código de referencia.

Como puede verse en la Figura 4.13, los perfiles de potencia axial obtenidos con S3 y TRACE/CTF/PARCS presentan muy buen ajuste. Los errores relativos son siempre inferiores al 2% excepto en los dos primeros nodos superiores e inferiores. La misma conclusión puede extraerse de los errores absolutos de los perfiles de potencia radial presentados en la Figura 4.14. En general los errores nodales son inferiores al 2%, exceptuando algunos nodos en la periferia del núcleo en los que alcanza valores superiores.

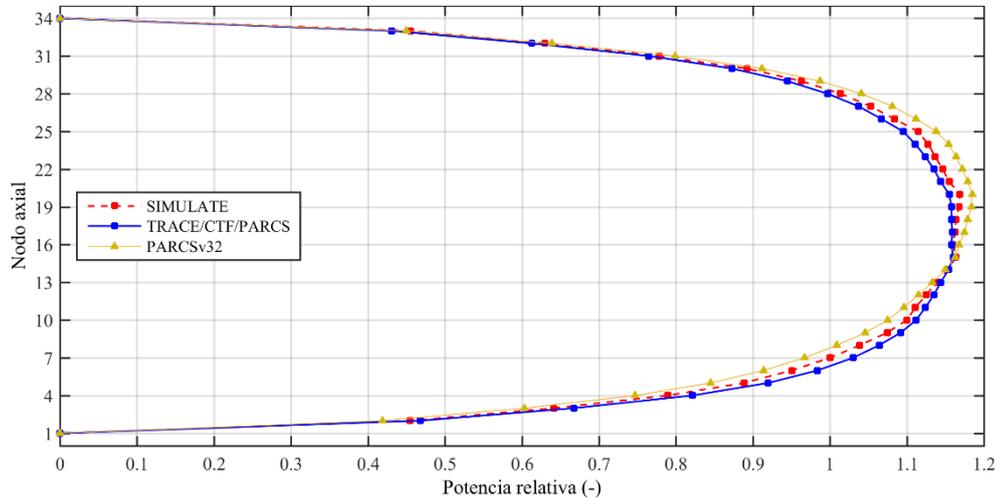


Figura 4.13 Perfil axial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

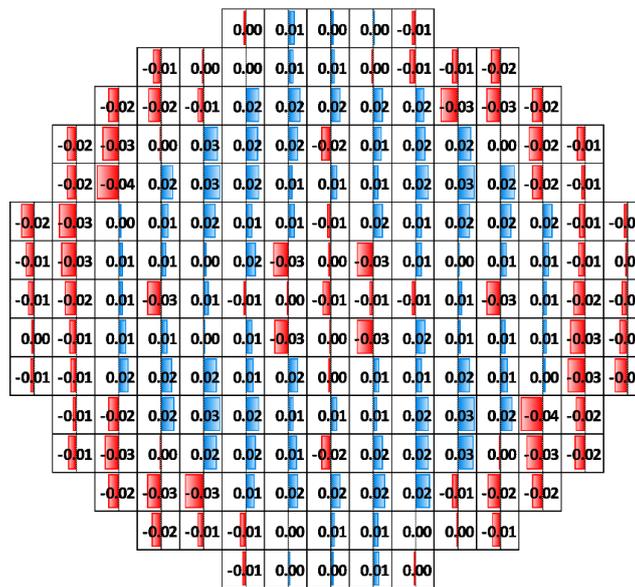


Figura 4.14 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

La Tabla 4.5 muestra el resumen de los resultados obtenidos en la simulación de estado estacionario acoplado. Estos valores confirman la validez de las secciones eficaces y los modelos desarrollados para llevar a cabo las pruebas de caída de barra de control. Tanto en la Tabla 4.5 como en las Figura 4.13 y Figura 4.14, se añade el resultado de la simulación anteriormente presentada de PARCS en solitario con objeto de obtener una mejor visualización de la variación de resultados.

Como puede observarse en la Tabla 4.5 el valor de la k_{eff} en la simulación acoplada es prácticamente coincidente con el de S3. Además, los errores cuadrático medios en ambos perfiles de potencia son inferiores al 2 %. Por tanto, se concluye que los resultados son excelentes y se ha conseguido un sólido punto de partida para la simulación transitoria.

Tabla 4.5 Resumen de los resultados del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en el reactor PWR tipo KWU-Siemens.

Código	k_{eff} (-)	$E_a k_{eff}$ (pcm)	RMSE perfil axial (%)	RMSE perfil radial (%)
SIMULATE3	1.00014	---	---	---
PARCSv3.2	1.00077	63	3.13	1.86
TRACE/CTF/PARCS	1.00016	2	1.55	1.75

4.1.4. Resultados del transitorio de inserción de barra de control.

En este apartado se simulan los transitorios operacionales de caída de barra de control llevados a cabo en el reactor PWR tipo KWU-Siemens. Las simulaciones se llevan a cabo utilizando los códigos acoplados dispuestos en la plataforma multifísica desarrollada. En este caso se emplean los múltiples acoples desarrollados mediante una simulación TRACE/CTF/PARCS/FRAPTRAN. Además, en este caso se ha utilizado un modelo de núcleo definido varilla a varilla y la capacidad paralela implementada en CTF.

Los transitorios parten de análogas condiciones de funcionamiento correspondientes a un estado de plena potencia (HFP) al comienzo del ciclo (BOC), donde la potencia nominal es de 3,010 MWt y el caudal másico a través del núcleo es de 15,605.6 kg/s.

Los transitorios de inserción inadvertida de barras de control corresponden a dos pruebas reales realizadas por la central nuclear en diferentes posiciones de núcleo, el J3 y el N7 de acuerdo con el esquema de la Figura 4.15. Las inserciones simuladas de la barra de control se definen en el archivo de entrada de PARCS. Los primeros 5 s de simulación corresponden a un transitorio nulo que asegura condiciones estacionarias estables antes de la inserción de las barras. La inserción de las barras tiene una duración de 2.1 s en un

transitorio cuya duración se alarga hasta los 30 s. La Figura 4.16 muestra la secuencia temporal del movimiento de la barra de control.

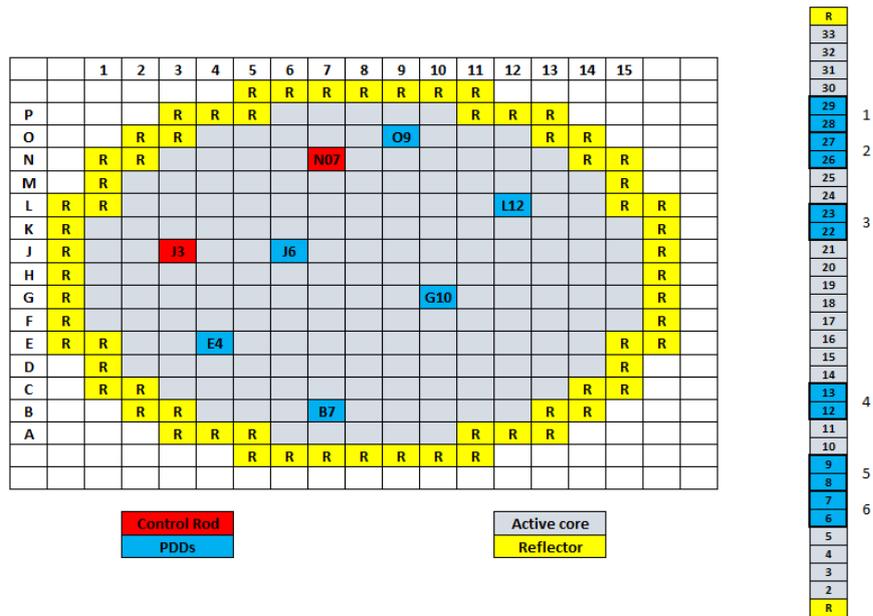


Figura 4.15 Esquema de las posiciones ocupadas por las barras de control y los detectores PDDs en el núcleo del reactor PWR.

La simulación de los escenarios se ha llevado a cabo utilizando 5 cores del clúster *Quasar*. El tiempo total de simulación acoplada asciende a 70 horas para cada transitorio de 30 s. La ejecución paralela tuvo una aceleración de 3.86 sobre el cálculo secuencial, lo que equivale a una eficiencia del 77%.

En la Figura 4.17 y la Figura 4.18 se compara la evolución de potencia total del reactor durante las caídas de las barras de control con respecto a la potencia medida en la planta utilizando los dos métodos disponibles en la propia planta nuclear. La potencia total en planta se puede medir mediante las señales de detectores de *excore* (círculos rojos) o realizando un balance térmico del refrigerante utilizando sensores de temperatura (triángulos verdes). Las señales que se han proporcionado están previamente filtradas, por lo que no se observa ruido en las representaciones gráficas de la Figura 4.17 y la Figura 4.18.

Ambos transitorios reflejan la evolución esperada de la potencia en un evento de caída de barra de control. En primer lugar, la potencia disminuye debido a la reactividad negativa introducida por la barra de control. Poco después, se recupera parte de la potencia

gracias a la reactividad positiva inducida por la disminución de la temperatura del combustible y el aumento de la densidad del moderador. Ambos transitorios únicamente se diferencian ligeramente en la cantidad de potencia que se reduce cuando la varilla de control se introduce en el núcleo. Este valor depende del denominado *valor de barra* de la barra de control testada.

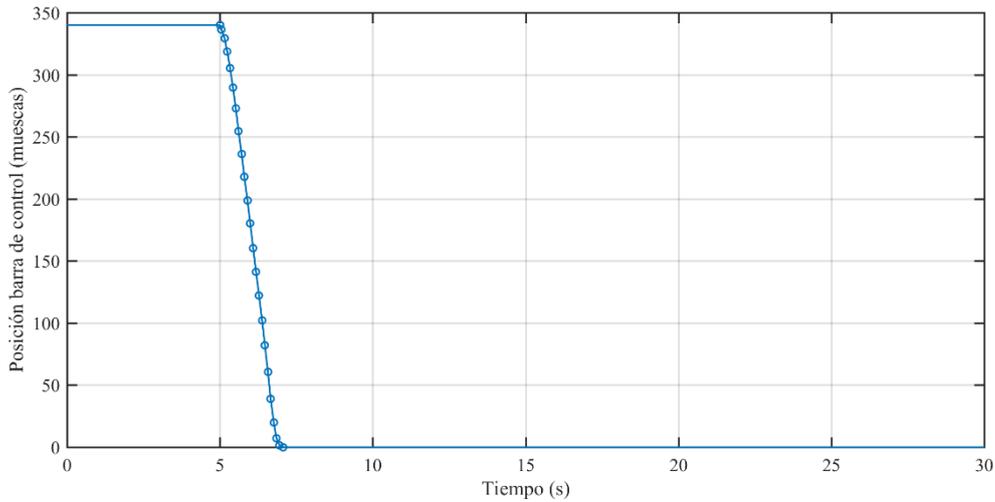


Figura 4.16 Secuencia de inserción de las barras de control J03 y N07.

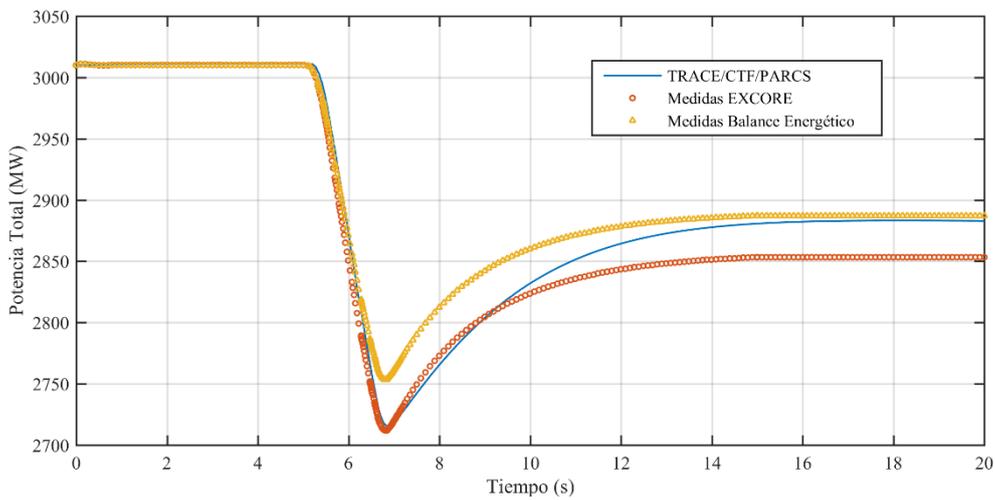


Figura 4.17 Evolución de la potencia durante la inserción de la barra de control J03.

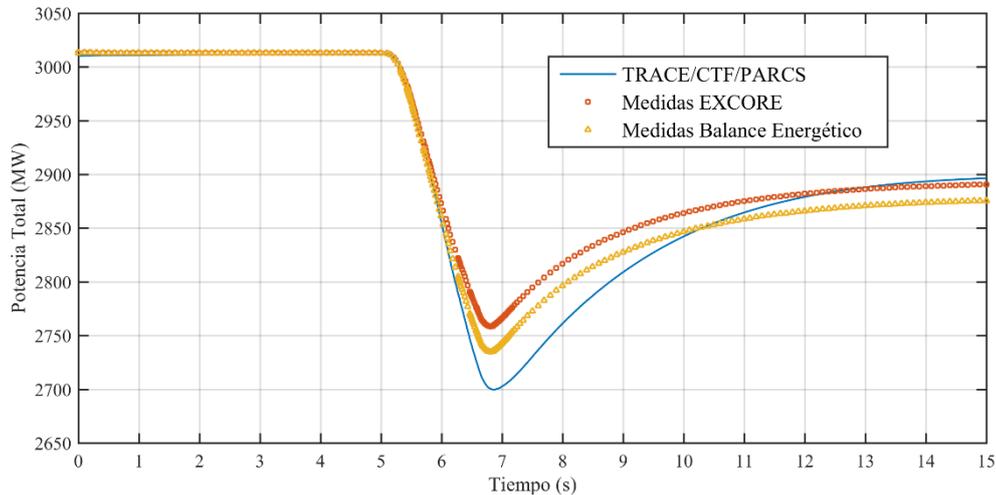


Figura 4.18 Evolución de la potencia durante la inserción de la barra de control N07.

La Figura 4.19 representa la distribución de potencia radial a nivel de varilla en el núcleo antes (izquierda) y después (derecha) de la inserción de la barra de control J03. Como puede observarse, en el cuadrante delantero izquierdo del núcleo, la forma de potencia está perturbada alrededor del área en la que se sitúa la barra de control introducida.

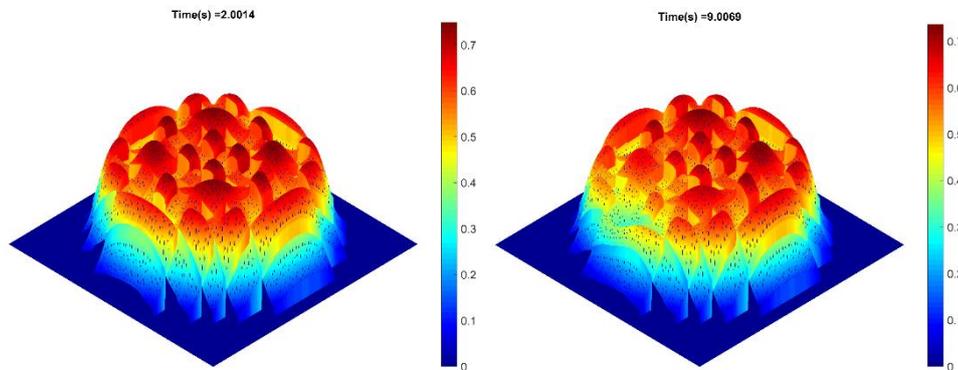


Figura 4.19 Perfil de potencia radial durante la inserción de la barra de control J03.

Una vez presentados los resultados en cuanto a la potencia total del reactor durante las pruebas de inserción de barra de control, falta realizar la verificación del código acoplado utilizando las señales de los detectores neutrónicos disponibles a través de los datos facilitados por la propia CN.

La forma en la que se distribuye la potencia del núcleo del reactor se mide en los reactores tipo PWR utilizando los denominados *Detectores de Densidad de Potencia* (PDD). Estos detectores de tipo *incore* están colocados en los tubos guía dentro del propio núcleo

del reactor. Con objeto de obtener la respuesta de estos detectores de flujo neutrónico se emplean los valores nodales calculados por PARCS. Para ello se utiliza la Ecuación 4.1.

$$P_{lD} = \frac{\phi}{\phi_0} F_{lD} \quad \text{Ecuación 4.1}$$

En la Ecuación 4.1 ϕ y ϕ_0 son el flujo térmico calculado para cada posición del detector en cada instante de tiempo y en el estacionario previo. Este cociente se utiliza para normalizar la distribución de potencia. F_{lD} es un factor de conversión entre flujo y potencia para cada detector. El valor de este factor corresponde a la potencia media dada por el detector en el caso estacionario.

Con el objetivo de evaluar el código acoplado se simulan a de nivel de detalle de varilla las señales de los detectores PDDs. Los resultados obtenidos se comparan con las señales reales de planta de algunos de estos detectores. En concreto se han seleccionado para esta comparativa los detectores J6 para el caso de la caída de barra situada en la posición J3 y el O9 para estudiar la caída de barra de control situada en la posición N07. La posición relativa de los detectores en el núcleo puede observarse en la Figura 4.16. El criterio de selección está basado en la proximidad de los detectores a la barra de control seleccionada para la prueba.

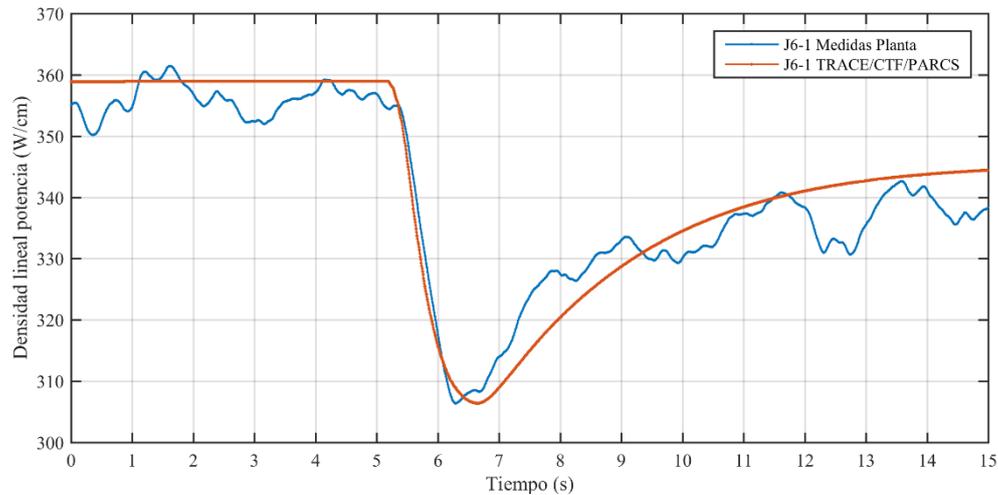


Figura 4.20 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector J6 nivel axial 1 durante la caída de la barra J03.

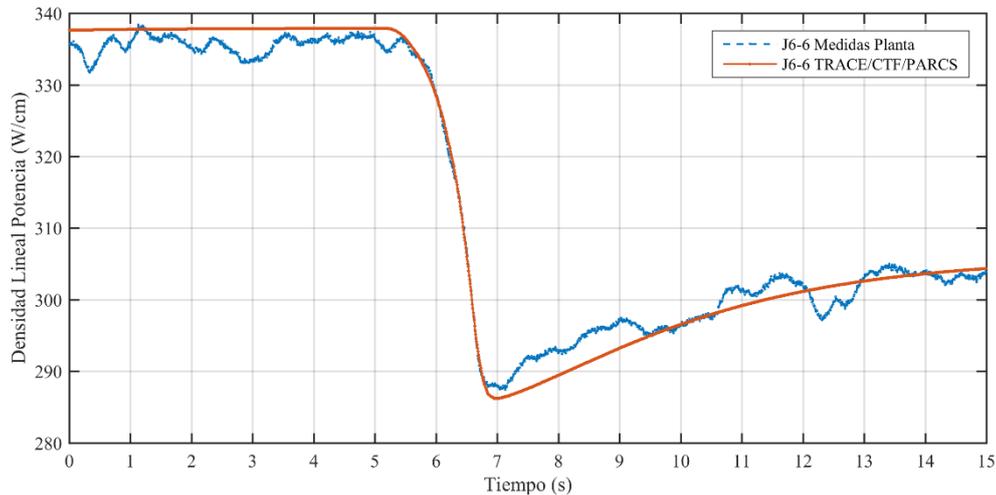


Figura 4.21 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector J6 nivel axial 6 durante la caída de la barra J03.

En la Figura 4.20 y la Figura 4.21 se presenta una comparación de los PDD situados en las posiciones J6 en los niveles axiales 1 y 6, correspondientes con la entrada y la salida del núcleo. La predicción del código acoplado TRACE/CTF/PARCS es muy próxima a la señal real en el escenario simulado, captando la tendencia de la señal real. Además, se puede concluir que como la caída en la densidad lineal de potencia calculada con el código acoplado para la barra de control J03 es idéntica a la real, la predicción del *valor de barra* es correcta.

En la Figura 4.22 y la Figura 4.23 se la comparación de la señal de los PDD situados en las posiciones O9 en los niveles axiales correspondientes con la entrada y la salida del núcleo (niveles 1 y 6). Las tendencias observadas entre las señales real y simulada son de nuevo coincidentes. El valor calculado de densidad lineal de potencia está ligeramente por debajo en la predicción de la caída de barra N07. En cualquier caso, este error es muy pequeño, del orden de magnitud del error de medida de los datos experimentales (~5 %).

Mencionar en este punto que el ruido neutrónico observado en la señal real de los detectores *incore* no se ha simulado en el código acoplado. Existe la posibilidad en PARCS de incluir ruido blanco en la simulación para obtener señales más realistas y perturbar el flujo neutrónico. Estas opciones han sido mejoradas y utilizadas para el análisis de estabilidad y ruido neutrónico en este mismo reactor [73]. No obstante, este aspecto no ha sido considerado en los análisis llevados a cabo en el presente trabajo.

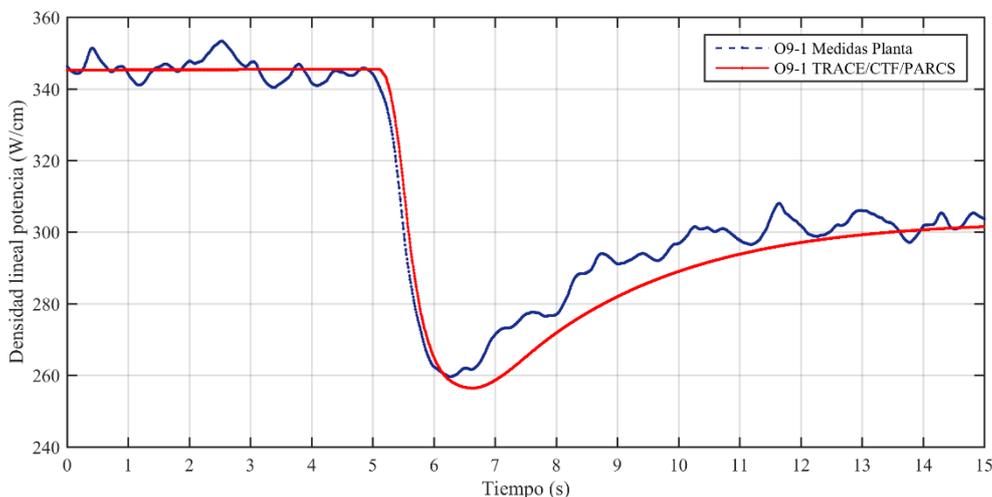


Figura 4.22 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector O09 nivel axial 1 durante la caída de la barra N07.

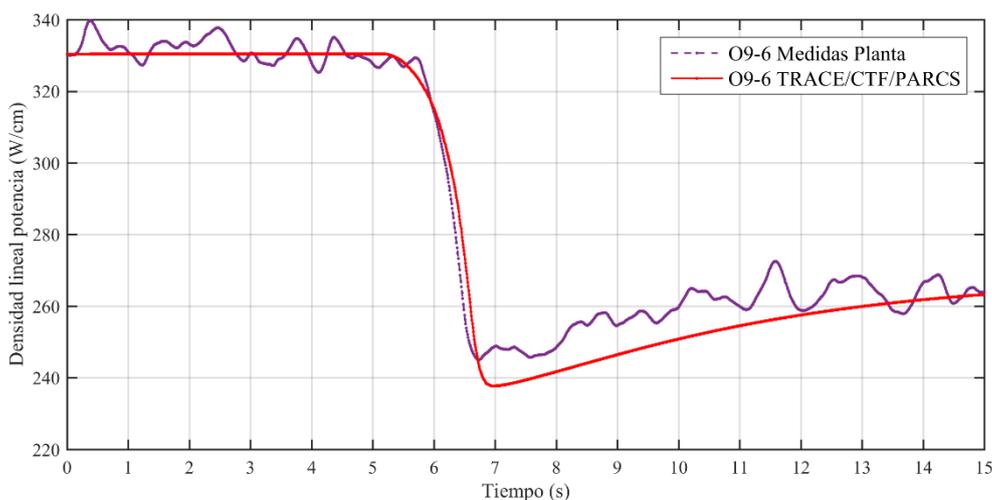


Figura 4.23 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector O09 nivel axial 6 durante la caída de la barra N07.

Además de las señales de los detectores PDDs, también se dispone de las señales reales de los 16 detectores *excore* (cámaras de ionización revestidas con boro) colocados en el escudo biológico del edificio de contención del reactor. Con objeto de simular con PARCS el comportamiento de este tipo de detectores se desarrolla un modelo de transporte simplificado para calcular la señal simulada a partir de la respuesta cinética del

núcleo. En la Figura 4.24 se muestran las 4 posiciones radiales ocupadas por los detectores *excore*, marcadas como PR1, PR2, PR3 y PR4 en dicho esquema. Cada posición tiene 2 redundancias (inferior y superior), y cada redundancia tiene 2 cámaras conectadas para formar un canal de medición.

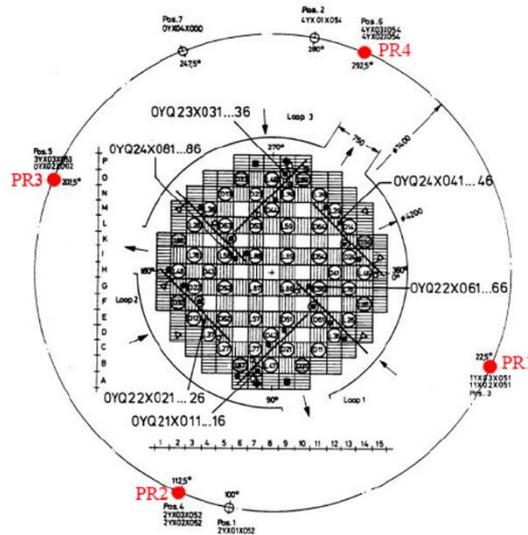


Figura 4.24 Esquema de la localización radial de los detectores *excore*.

Para simular la respuesta de los detectores *excore* en PARCS se ha aplicado un modelo de transporte radial simplificado en dos regiones como el descrito en las ecuaciones 4.2 y 4.3.

$$\phi(r) \sim \frac{1}{r} \exp(-\Sigma_r r) \quad \text{Ecuación 4.2}$$

$$\phi(r) \sim \frac{1}{r^2} \quad \text{Ecuación 4.3}$$

La Ecuación 4.2 describe el transporte de neutrones en el interior del núcleo y la vasija. La Ecuación 4.3 describe el transporte geométrico puro desde la superficie externa de la vasija hasta la ubicación de los detectores. La variable r es la distancia entre el nodo neutrónico y la superficie de la vasija y la posición del detector respectivamente. Esta distancia se mide a través de la línea recta que une el centro del nodo y el detector analizado. La sección eficaz macroscópica para el medio núcleo-vasija de la Ecuación 4.2 se toma como un valor constante igual a 0.115 cm^{-1} [74].

Una vez obtenida en la simulación la respuesta de flujo total de los detectores *excore*, esta se normaliza con sus valores de estado estacionario. El objetivo de esta normalización es reescalar la respuesta de flujo de la misma forma que se realiza la calibración de

la instrumentación de la planta nuclear. Finalmente, las señales normalizadas se pueden comparar con las mediciones reales.

Las Figura 4.25 a Figura 4.28 muestran la comparación de los detectores *excore* simulados (de PR1 a PR4 en el plano superior) frente a las mediciones reales de la planta durante el transitorio de caída de la barra de control N07. Las respuestas obtenidas tienen muy buena concordancia con las mediciones, validando la teoría de transporte simplificada aplicada para obtener las señales de dichos detectores. Los resultados de las señales en los detectores *excore* confirman que el código acoplado TRACE/CTF/PARCS puede simular de manera adecuada los transitorios de caída inadvertido de barra de control en reactores nucleares PWR.

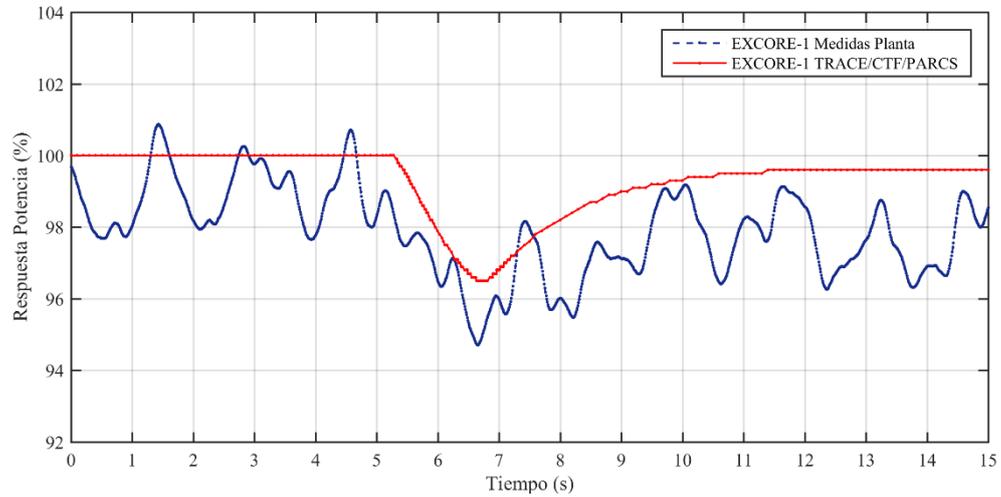


Figura 4.25 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector *excore-1* durante la caída de la barra N07.

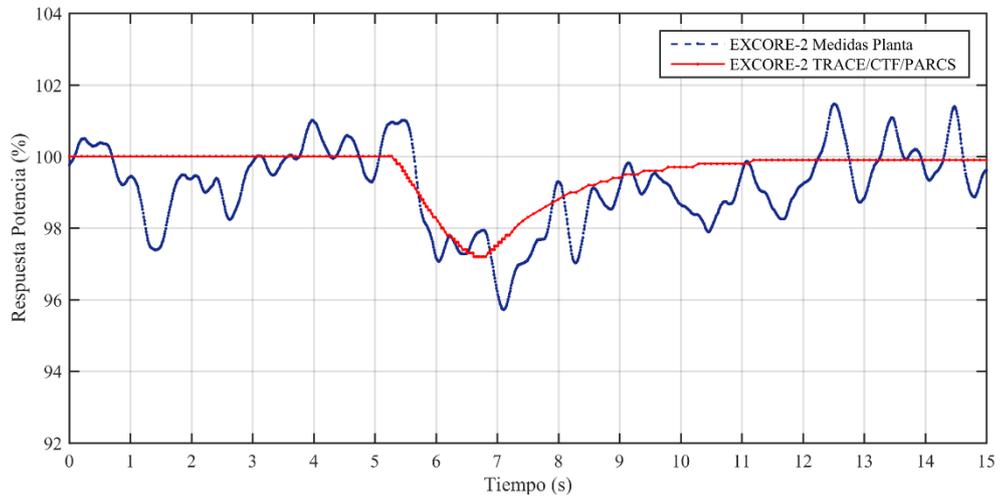


Figura 4.26 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector excore-2 durante la caída de la barra N07.

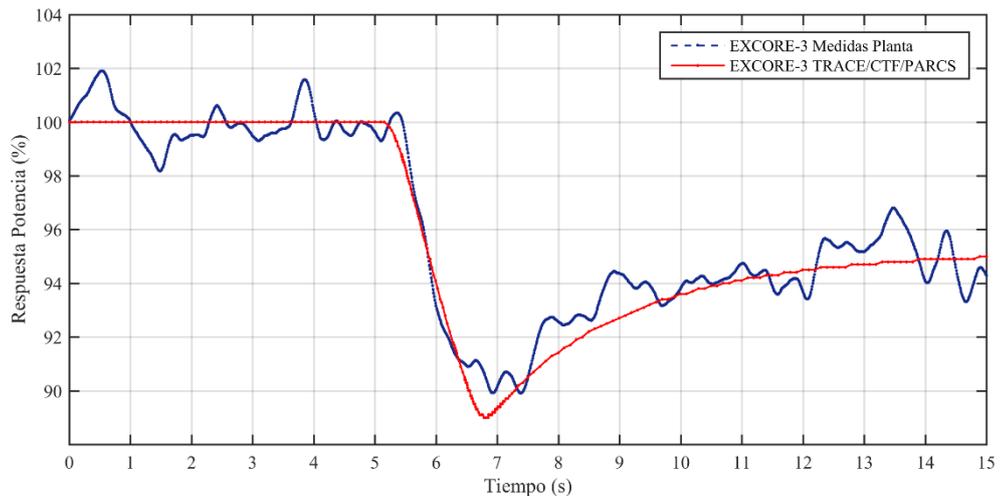


Figura 4.27 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector excore-3 durante la caída de la barra N07.

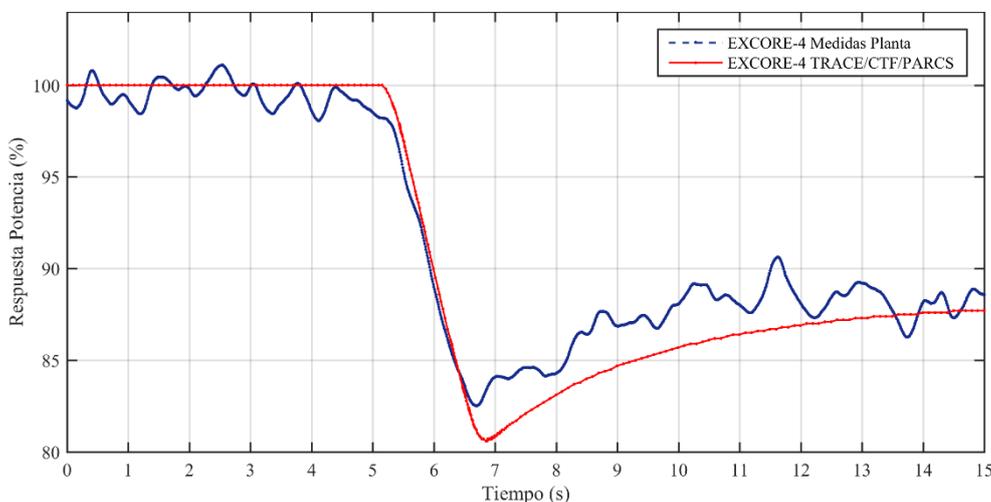


Figura 4.28 Comparación de las medidas y los resultados obtenidos mediante simulación en el detector excore-4 durante la caída de la barra N07.

4.1.5. Resultados del transitorio de inyección de boro.

En este apartado se simula un transitorio de inyección de boro en el mismo reactor PWR tipo KWU-Siemens utilizado para el estudio de los transitorios operacionales de inserción inadvertida de barras de control. Las simulaciones se llevan a cabo utilizando los códigos acoplados dispuestos en la plataforma multifísica desarrollada. En este caso se emplean los códigos acoplados TRACE/CTF/PARCS. Al ser un transitorio relativamente largo, en este caso se ha utilizado un modelo de núcleo definido a nivel de elemento combustible en CTF.

El transitorio de inyección de boro parte de análogas condiciones de funcionamiento del reactor. Estas condiciones corresponden a un estado de plena potencia (HFP) al comienzo del ciclo (BOC), siendo la potencia nominal y el caudal másico a través del núcleo de 3,010 MWt y 15,605.6 kg/s respectivamente.

El transitorio de inyección de agua borada a través del CVCS propuesto consta de 600 s. Durante la primera fase del mismo no se efectúa inyección de boro y su concentración en el refrigerante del primario permanece constante en unos 641 ppm. Esta fase de 100s es de acondicionamiento para conseguir unas condiciones estables previas a la inyección. A los 100 s se comienza la inyección de 100 kg/s de agua borada a 8000 ppm a través del CVCS. Esta inyección dura 400 s momento en el cual se cierra la válvula de inyección y se deja alcanzar un nuevo estado de potencia al reactor durante otros 100 s. La secuencia de inyección de agua borada a través del CVCS se presenta en la Tabla 4.6.

Tabla 4.6 Secuencia de inyección de agua borada a 8,000 ppm a través del CVCS.

Tiempo(s)	Caudal inyectado (kg/s)
0.0	0.0
100.0	0.0
100.1	100.0
500.1	100.0
500.2	0.0
600.2	0.0

En la Figura 4.29 se muestra la secuencia temporal de inyección de boro en el primario del reactor PWR. La inyección se efectúa a través del CVCS por lo que es esperable un cierto retardo en la llegada al núcleo. La cantidad total de agua borada inyectada durante el transitorio es de 40 Tm y a una concentración bastante alta de 8,000 partes por millón. (ppm). Es posible que la cantidad inyectada sea suficientemente alta como para detener el reactor.

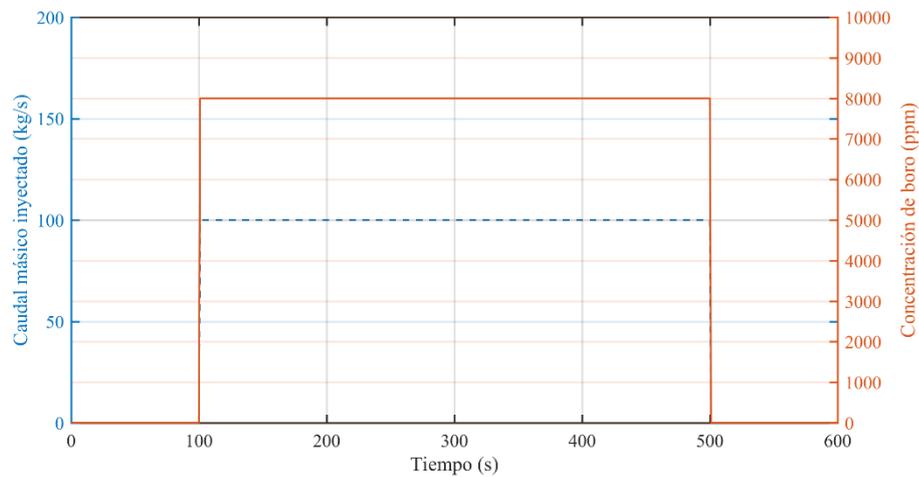


Figura 4.29 Secuencia temporal de la inyección de boro realizada a través del CVCS.

Antes de presentar los resultados cabe hablar de la generación de tablas de secciones eficaces para diferentes concentraciones de boro. La versión interna del código PARCS desarrollada en el grupo de investigación incluye modificaciones para la lectura de tablas

de secciones eficaces en formato *nemtab* a distintas concentraciones de boro [75], [76]. Estas modificaciones migradas por el autor a la versión de PARCS de la plataforma multifísica desarrollada han sido utilizadas para la lectura de secciones eficaces a diferentes concentraciones de boro. Para ello se han generado sendas tablas de secciones eficaces a 600, 1,500 y 2,500 ppm de concentración de boro. El código PARCS interpola entre los valores de dichas tablas para obtener las secciones eficaces a la concentración existente en cada nodo neutrónico.

Como resultados del transitorio simulado se presenta en primer lugar la evolución de la concentración de boro en la entrada y la salida del núcleo. En la Figura 4.30 puede observarse que tanto la concentración de boro a la entrada y la salida del núcleo experimenta una tendencia análoga y no se observan grandes oscilaciones debidas al acople TH-TH entre CTF y TRACE. Con esto puede confirmarse que la comunicación de las variables relativas a la concentración de boro entre los dominios acoplados es correcta.

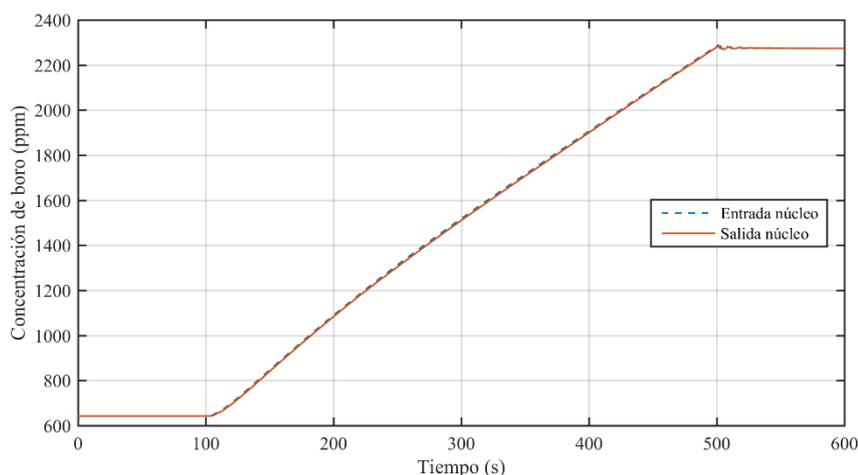


Figura 4.30 Evolución temporal de la concentración de boro en la entrada y salida del núcleo.

En la Figura 4.31 se presenta la evolución de la potencia total del reactor calculada por PARCS en función de la concentración de boro promedio en el núcleo. Se puede observar como a partir del instante 400 s del transitorio el reactor alcanza el estado de parada caliente, ya que la concentración de boro en el núcleo es lo suficientemente alta para absorber más neutrones de los creados por las reacciones de fisión más los diferidos en cada generación. Esto conlleva la subcriticidad del reactor y la parada del mismo. De la Figura 4.31 puede extraerse que es necesaria una concentración de boro de unos 1,800 ppm para volver subcrítico el reactor en el estado de ciclo actual.

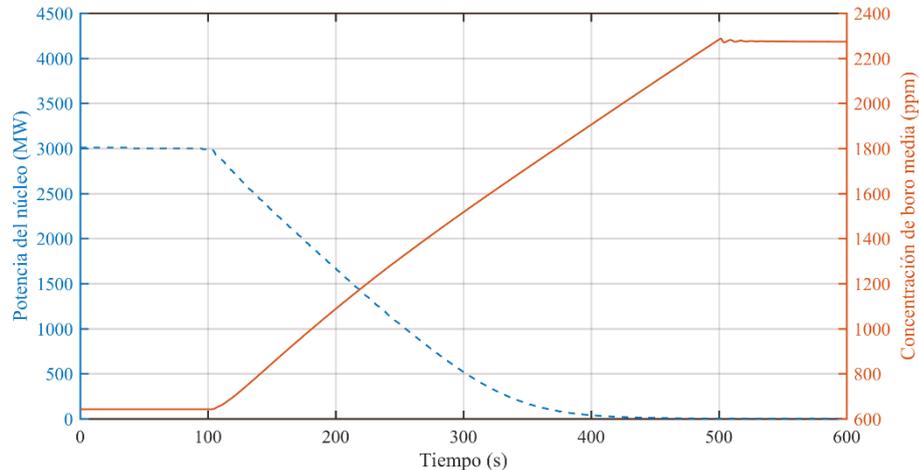


Figura 4.31 Evolución temporal de la potencia total y la concentración de boro media en el núcleo durante el transitorio de inyección de boro.

Para concluir mencionar que el código acoplado TRACE/CTF/PARCS ha sido probado frente a un transitorio de inyección de boro a través del CVCS. No se tienen medidas experimentales para comparar los resultados, por lo que se ha realizado un análisis cualitativo de los mismos. A pesar de ello, los resultados obtenidos concuerdan con el comportamiento esperado del núcleo a los niveles de potencia y concentración de boro alcanzados.

4.2. Aplicaciones a reactores BWR

4.2.1. Análisis de los transitorios de disparo de turbina de Peach Bottom Unit 2

Los códigos multifísicos se han convertido en la mejor opción para realizar simulaciones de mejor estimación (*best-estimate*) en LWR. Los códigos neutrónicos y termohidráulicos acoplados se utilizan para obtener resultados fiables en el análisis de transitorios de seguridad nuclear. Muchos de los desarrollos y mejoras de los códigos multifísicos son posibles gracias a la importante labor de validación y verificación (V&V) desarrolladas por la *Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico* (OCDE) y la *US Nuclear Regulatory Commission* (US NRC). Un ejemplo de estas actividades es el ejercicio *benchmark* organizado sobre transitorios de disparo de turbina (*Turbine Trip* (TT)) en el reactor BWR de la central nuclear de *Peach Bottom 2* [77] [78]. Estos transitorios han sido utilizados para la verificación de los acoples y la plataforma multifísica desarrollada en el presente trabajo.

Un transitorio de disparo de turbina en un BWR es un evento de presurización en el que el acoplamiento entre los fenómenos del núcleo y la dinámica del sistema juega un papel

importante. Además, los datos experimentales y datos de simulación disponibles a través de las referencias [79] y [80] hacen que el problema de propuesto sea muy valioso.

Este proyecto de evaluación comparativa se estableció con objeto de desafiar los sistemas de códigos acoplados termohidráulico/neutrónicos frente al transitorio de disparo de turbina de Peach Bottom 2 (PB-2). Se realizaron tres transitorios de disparo de turbina a diferentes niveles de potencia en el reactor nuclear de PB-2 antes del apagado para la recarga de combustible al final del ciclo 2, en abril de 1977. La segunda prueba realizada se seleccionó para esta evaluación comparativa que permite investigar el efecto del transitorio de presurización (después del cierre repentino de la válvula de parada de la turbina) sobre el flujo de neutrones en el núcleo del reactor.

Un transitorio de disparo de turbina (*Turbine Trip, TT*) se caracteriza por un cierre repentino de la válvula de parada de la turbina (TSV). Puede ser iniciado por un número determinado de fallos en las turbinas o en el sistema nuclear. Los eventos de iniciación podrían ser un alto nivel de gases incondensables en los separadores y secadores de vapor, altas vibraciones, cierre TSV realizado por el operador del reactor, bajo vacío del condensador y nivel alto de líquido del reactor. El cierre TSV causa una reducción repentina del flujo de vapor, lo que resulta en un aumento de la presión del sistema nuclear. El aumento de la presión del sistema debido al TT es mitigado por las funciones del sistema de protección del reactor. A altos niveles de potencia, un cierre en la TSV produce un disparo del reactor (SCRAM), una apertura de la válvula de baipás de la turbina (BPV) y, en algunas plantas, un disparo rápido de la bomba de recirculación (*prompt RPT*). A niveles de potencia iniciales más bajos, el SCRAM iniciado por el cierre de TSV es omitido si el nivel de potencia medido apunta a que el transitorio puede ser mitigado por el sistema de baipás de turbina. Las válvulas de seguridad y alivio (SRVs) y los BPVs ayudan a liberar la producción de vapor y a limitar el aumento de la presión del sistema nuclear. En las plantas que tienen un RPT rápido o si se alcanza el punto de consigna transitorio sin SCRAM (ATWS-RPT), el aumento del nivel del agua del reactor, debido al RPT, puede alcanzar el punto de consigna por alto nivel de líquido y disparar el sistema de alimentación. Después del disparo del sistema de agua de alimentación, el nivel del agua del reactor caerá hasta el punto de ajuste de bajo nivel, sobre el que se inician los sistemas de emergencia de alta presión.

Un transitorio TT en un reactor de tipo BWR se considera uno de los eventos más complejos a analizar porque involucra la respuesta del núcleo del reactor, las condiciones de alta presión del refrigerante, las válvulas asociadas y las tuberías en interacciones altamente complejas con variables que cambian muy rápidamente.

Como se mencionó, el transitorio comienza con un cierre súbito de TSV, que inicia una onda de presión en el sistema de vapor principal, que se transmite rápidamente a la vasija a presión del reactor. Mientras las TSV se cierran, las válvulas del sistema de baipás están taradas para abrir, permitiendo una liberación de vapor y, por lo tanto, un alivio de presión. Los SRVs pueden comenzar a abrirse en puntos de ajuste preestablecidos, proporcionando un alivio de presión adicional. La transmisión de la onda de presión requiere

una modelación detallada de la rama principal de vapor y sus válvulas asociadas para asegurar que los efectos de temporización y la magnitud de la onda de presión se pueden determinar con precisión. Esto asegura obtener una evolución temporal adecuada de la presión en cada válvula, permitiendo un modelado adecuado del flujo de vapor a través de ellas.

A medida que el aumento de la presión de vapor alcanza la vasija del reactor, su trayectoria debe ser modelada desde el domo de vapor (*steam dome*) a través de los secadores y separadores de vapor, y a través del sistema de recirculación, bombas de chorro y el núcleo. La precisión en la representación de estos sistemas asegura que las oscilaciones inducidas en la presión del núcleo, que afectan a la fracción de huecos y el caudal de fluido del núcleo, sean calculadas de manera correcta.

El ejercicio intercomparativo planteado sobre el PBTT-2 incluye tres ejercicios. El primer ejercicio propone una simulación del comportamiento temporal de los sistemas termohidráulicos de la instalación nuclear utilizando perfiles de potencia fijados mediante tablas. El segundo ejercicio propone la simulación de dos estados estacionarios mediante códigos TH-NK3D o TH-NK1-D. El primer estacionario propuesto es un caso de parada caliente (*Hot Zero Power (HZP)*), mientras que el segundo corresponde a las condiciones iniciales previas al TT. Por último, el tercer ejercicio propone la simulación con herramientas acopladas TH-NK3D de mejor estimación del evento TT.

Dentro del tercer ejercicio propuesto en el *benchmark*, el transitorio de disparo de turbina TT-2, se propusieron tres versiones extremas con el objetivo de ofrecer la oportunidad de probar mejor el acoplamiento de los códigos y el modelado de retroalimentación. Estos escenarios accidentales ficticios se definieron de la siguiente manera:

Escenario extremo 1: disparo de la turbina sin apertura de la válvula de baipás de la turbina (aumentaría el pico de potencia y proporcionaría suficiente presión para la apertura de las válvulas de seguridad y alivio).

Escenario extremo 2: disparo de turbina sin *SCRAM* (aumentaría el pico de potencia y produciría un segundo pico de potencia. La reproducción de este segundo pico es un reto para las predicciones de código acoplado).

Escenario extremo 3: escenario extremo combinado - disparo de la turbina con fallo del sistema de activación de la válvula de baipás y sin *SCRAM* del reactor. Según las especificaciones del *benchmark*, los resultados preliminares indican que este caso está muy cerca de un estado *superprompt-critical*. Esto lo convierte en un buen caso para comparaciones de código a código.

En este trabajo se desarrollan los ejercicios que tienen que ver la utilización de herramientas acopladas TH-NK3D de mejor estimación para la obtención tanto del estacionario como de los transitorios propuestos sobre el escenario base del PBTT-2.

4.2.2. Modelos desarrollados

En este apartado se presentan los modelos desarrollados para cada uno de los códigos que intervienen en los análisis de seguridad nuclear presentados en el presente trabajo relativos a las aplicaciones en reactores BWR. Al igual que en el caso de aplicación anteriormente desarrollado, el orden de presentación realizado comienza con los modelos más generales del código TRACE hasta llegar a modelos más en detalle de varilla de combustible con los códigos termomecánicos incluidos en la plataforma diseñada.

4.2.2.1 Modelo de sistema de TRACE

El modelo consiste en el sistema primario del reactor BWR/4 de diseño General Electric (GE) de Peach Bottom 2 (PB-2). El modelo TRACE fue desarrollado internamente en el grupo de investigación y es el resultado de la conversión directa de un modelo TRAC-BF1 realizado con anterioridad para la participación en el *benchmark* [81]. En el modelo, el núcleo de PB-2 está colapsado en 33 canales termohidráulicos como se muestra en la Figura 4.32. Estos canales están situados en el interior de la vasija conjuntamente con las bombas de chorro y el separador de vapor. La vasija cilíndrica se ha modelado utilizando 9 nodos axiales y 2 nodos radiales divididos en un solo sector azimutal. Los canales termohidráulicos que representan el núcleo activo están conectados entre los niveles axiales 4 y 5 en el nodo radial interno de la vasija. El anillo externo de la vasija representa el *downcomer* por el que baja el refrigerante antes de pasar por el *lower plenum* y entrar al núcleo. Un componente tipo *fill* proporciona agua al *downcomer* en el séptimo nivel axial de la vasija, simulando la entrada de agua de alimentación.

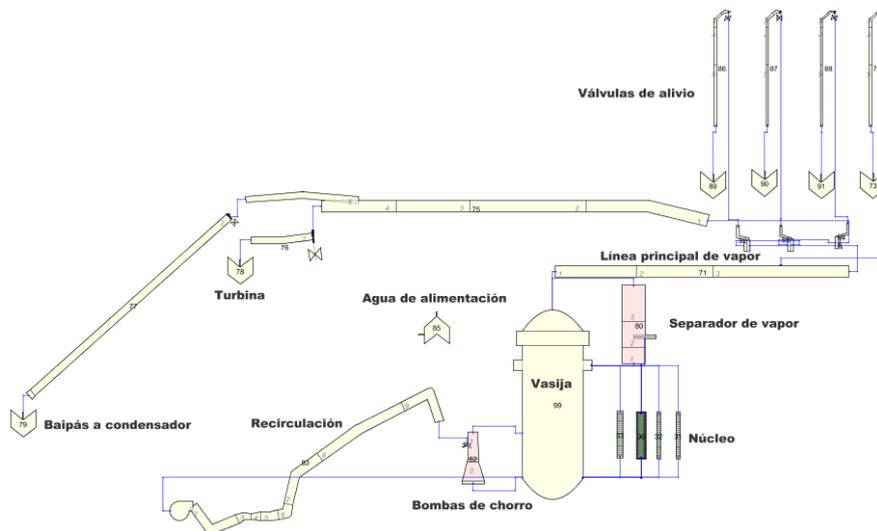


Figura 4.32 Diagrama SNAP del modelo de TRACE del reactor de Peach Bottom Unit 2.

La línea de vapor está conectada al octavo nodo axial de la vasija. La línea de vapor principal contiene cuatro grupos de válvulas de seguridad y alivio (SRVs) que conectan a través de un componente tipo *break* a la condición de contorno de la piscina de supresión. Como se puede ver en la Figura 4.32, la línea principal de vapor continua hacia la turbina modelada mediante condición de contorno de presión utilizando de nuevo el componente *break*. Antes de la turbina se encuentran dispuestas las válvulas de aislamiento de turbina (TSV) y la válvula y línea de baipás de turbina (BPV) hacia el condensador.

Información adicional sobre el procedimiento de conversión del archivo de entrada entre TRAC-BF1 y TRACE y el modelo desarrollado podría obtenerse en la siguiente referencia [82], [83].

4.2.2.2 Modelo de núcleo de CTF

El modelo de núcleo de CTF para el reactor de PB-2 se ha definido sin realizar ningún tipo de agrupamiento de los diferentes canales de combustible. Es decir, se asigna un canal hidráulico diferente a cada elemento de combustible. De acuerdo con este aspecto, los canales hidráulicos que componen el núcleo del reactor para el ciclo de combustible 2 se han realizado con respecto a los 5 tipos diferentes de diseños de combustible. La situación de los diferentes diseños de combustible en el núcleo se muestra en la Figura 4.33, en la que cada tipo de combustible presenta un color y número diferentes.

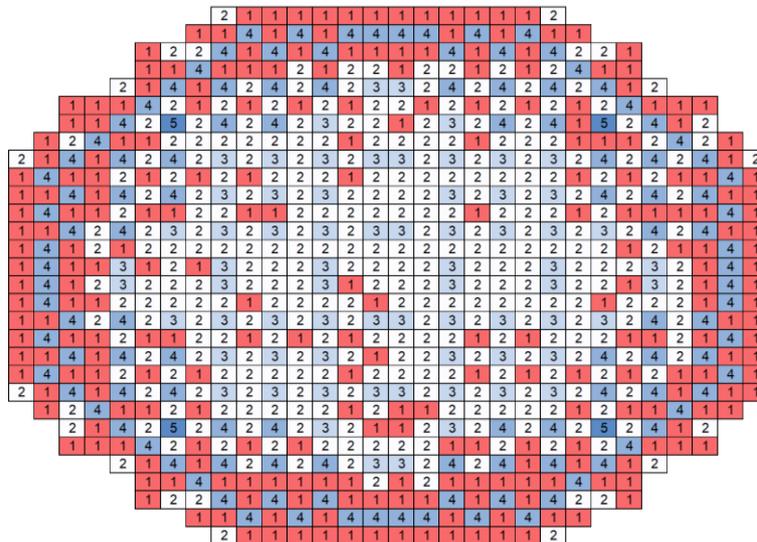


Figura 4.33 Esquema de los tipos de diseño de combustible de Peach Bottom Unit 2.

Con anterioridad a la generación del modelo colapsado a nivel de elemento combustible del núcleo, cada diseño de los citados elementos presente en el reactor en el ciclo 2 se

define como un modelo a nivel de varilla en el generador automático de archivos de entrada de CTF. Este programa informático es capaz de preprocesar la información geométrica del elemento combustible generando archivos de entrada en los que el núcleo se define a diferentes niveles de detalle. En este primer caso, como puede apreciarse en la Figura 4.34, el modelo generado es a nivel de elemento de combustible, añadiéndole alrededor del núcleo un canal hidráulico que representa el baipás.

El núcleo del reactor de PB-2 consta de 764 elementos de combustible más una región estructural externa al núcleo activo, por la que pasa el refrigerante, conocida como baipás del núcleo. Los elementos de combustible poseen una anchura (*fuel pitch*) de 15.24 cm. Radialmente el núcleo se ha dividido en 765 canales termohidráulicos, de los que 764 corresponden al núcleo activo y el restante al baipás del núcleo. En el esquema de la Figura 4.34 se representa el modelo de núcleo desarrollado en CTF, en diferentes tonos de color azul se representa la zona activa del núcleo y en rojo la región correspondiente al baipás. Axialmente el modelo se ha dividido en 26 nodos de 15.24 cm de altura.

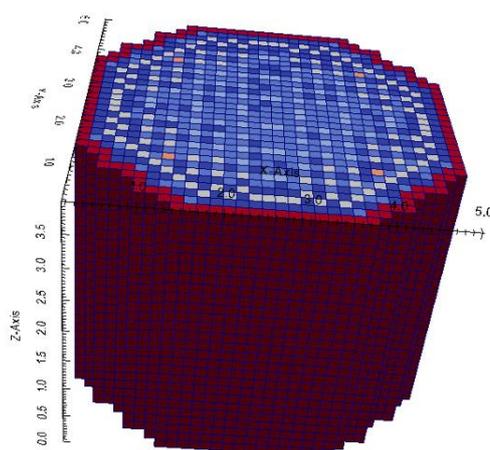


Figura 4.34 Esquema del modelo de CTF del núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.

Dentro de los elementos de combustible cargados en el núcleo los hay con matriz de 7 x 7 varillas separadas entre ellas 0.738 cm (*pin pitch*) y de 7x7 separadas en este caso 0.64 cm. Las varillas también poseen un diámetro distinto en función de la matriz que los define. En los combustibles 7 x 7 la varilla tiene un diámetro de 1.430 cm y en los 8 por 8 de 1.252 cm. La longitud activa de todas las varillas es de 3.657 m. Los elementos de combustible 7 x 7 no contienen barras de agua, mientras que los nuevos 8 x 8 cargados en el ciclo 2 si las contienen. Todos los elementos contienen diferente número de varillas de Gadolinio, absorbente de neutrones. Todos los elementos de combustible contienen de 7 rejillas espaciadoras distribuidas a lo largo de su longitud además de un cabezal inferior y superior que aglutinan estructuralmente las varillas de combustible y el canal de Inconel en cuyo interior se ordenan las varillas.

Teniendo en cuenta los aspectos geométricos, el modelo de núcleo colapsa radialmente las dimensiones para obtener un área y diámetro hidráulico equivalentes que aplican al único canal hidráulico modelado. Igualmente se modela una única varilla de combustible equivalente al número real de cada tipo de combustible. Las barras de agua y los canales del combustible también se modelan como estructuras de calor pasivas. Recapitulando las dimensiones de la malla cartesiana que constituye el modelo físico realizado, la parte hidráulica consta de 19,890 celdas computacionales y la parte térmica de 44,746 elementos en los que se tiene que efectuar el cálculo de la conducción calor.

Es momento de analizar uno de los elementos de combustible del modelo varilla a varilla de CTF. En este caso, a título ilustrativo se ha seleccionado un elemento de combustible de matriz 7 x 7 que consta de 49 canales termohidráulicos.

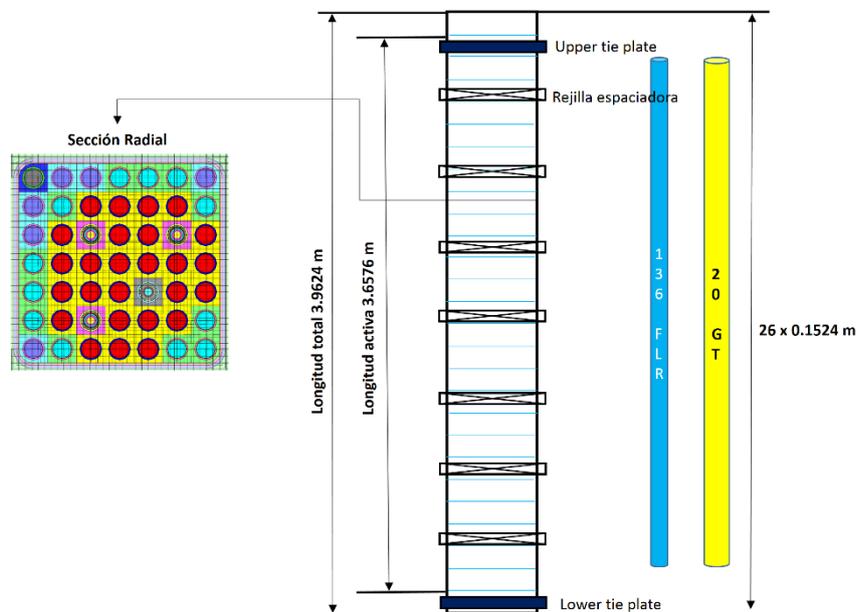


Figura 4.35 Esquema del modelo de CTF de uno de los elementos combustibles BWR cargados en el núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.

Térmicamente las varillas de combustible se representan mediante 49 estructuras de calor calefactadas y como no contiene barra de agua únicamente está la estructura de calor pasiva que representa al canal de combustible. Se han modelado las 7 rejillas separadoras mediante coeficientes de pérdidas de aplicados a cada subcanal en cada uno de los niveles axiales en los que se sitúan. También se aplican coeficientes de pérdidas de presión en los cabezales del combustible. La disposición radial de varillas de combustible dentro de la matriz de combustible se presenta en la sección radial de la Figura 4.35 conjuntamente con el esquema axial del modelo realizado.

En el caso del modelo completo de núcleo a nivel de varilla, este consta de una malla análoga a la presentada en la Figura 4.34, pero en la que cada elemento de la zona activa (celdas de la región azul) se subdivide a su vez en el número de subcanales (nodos radiales) correspondiente al diseño de combustible cargado en el núcleo. Analizando los elementos de la malla, se pueden calcular un total de 1,046,656 celdas en el dominio fluido. Por otra parte, existen 1,066,520 de elementos en la malla térmica sobre los que se debe resolver la ecuación de la conducción de calor.

4.2.2.3 Modelo neutrónico de núcleo de PARCS

El modelo neutrónico asigna un nodo radial a cada elemento de combustible. Por tanto, el núcleo está modelado mediante 764 nodos radiales en su parte activa (zona roja/rosa y azul claro en la Figura 4.36) y según el diseño del mismo existen otros 124 nodos que los rodean correspondientes al reflector (zona azul oscuro en la Figura 4.36). Axialmente, al igual que en los modelos termohidráulicos, el núcleo se divide en 26 niveles, de los que 24 corresponden a la zona activa y 2 de ellos al reflector superior e inferior. En el caso neutrónico la malla está compuesta por 23,088 elementos.

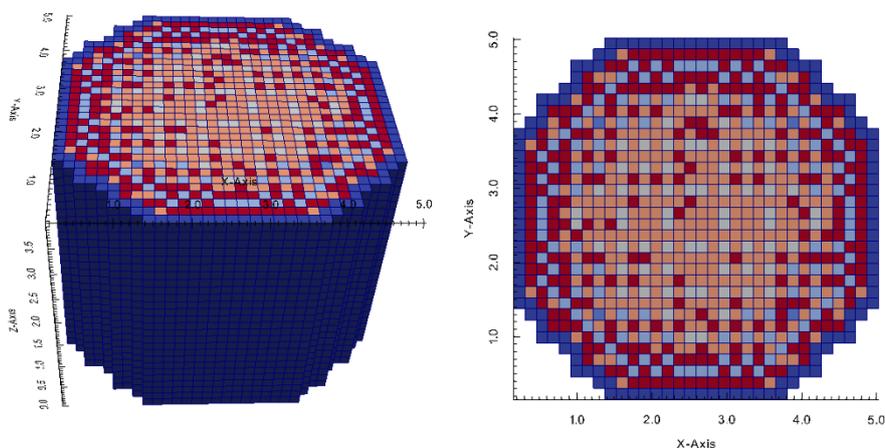


Figura 4.36 Malla neutrónica de PARCS para el núcleo del reactor de Peach Bottom Unit 2.

4.2.2.4 Modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN

Los modelos geométricos desarrollados para los códigos FRAPCON y FRAPTRAN son idénticos. Éstos describen las principales características de la varilla de combustible y los materiales que la componen incluyendo datos sobre el enriquecimiento y la densidad de compactación de las pastillas, materiales estructurales de la vaina, datos geométricos en frío, etc. En el caso del reactor de PB-2, geoméricamente existen dos tipos diferentes de varillas de combustible, las varillas de los combustibles 7 x 7 y la de los 8 x 8.

Las varillas que componen los elementos de combustible 7 por 7 presentan un diámetro externo de 1.430 cm, la vaina tiene un espesor de tan solo 0.9398 mm y la pastilla de combustible un diámetro de 1.2116 cm. Las varillas tienen una longitud total de 3.962 m de los que son activos 3.657 m. El enriquecimiento de las varillas oscila entre el 1.33 % y el 2.93 % en peso de ^{235}U .

Las varillas que componen los elementos de combustible 8 por 8 presentan un diámetro externo de 1.252 cm, la vaina tiene un espesor de 0.8636 mm y la pastilla de combustible un diámetro de 1.0566 cm. Las varillas tienen una longitud total de 3.962 m de los que son activos 3.657 m. El enriquecimiento de las varillas oscila entre el 1.45 % y el 3.01 % en peso de ^{235}U .

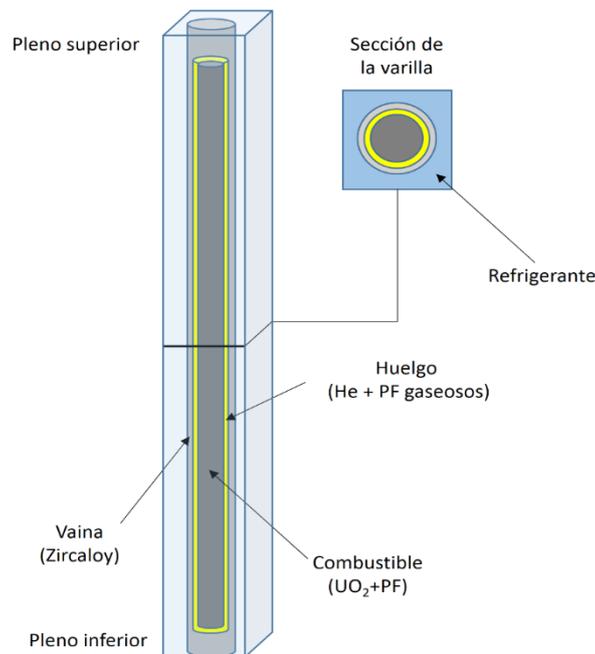


Figura 4.37 Croquis del modelo de varilla de combustible de FRAPCON/FRAPTRAN.

Partiendo de estos datos geométricos, se han desarrollado dos modelos para los códigos FRAPCON y FRAPTRAN. Cada uno de estos modelos engloba a una sola varilla de combustible rodeada por la porción de refrigerante que la baña. Radialmente la varilla se ha dividido en 18 nodos, uno representa la vaina, otro el hueco y 16 la pastilla de combustible. Axialmente se han utilizado 24 nodos además de los plenos inferior y superior seleccionados por defecto por los códigos.

Con lo que respecta al fluido que rodea a la varilla se ha definido un área nominal y diámetro hidráulico equivalente al subcanal que rodea a la varilla (anchura igual al *pin*

pitch). La estructura de calor equivalente viene también definida en el archivo de entrada en el que se proporciona el flujo lineal de potencia y los perfiles axial y radial de generación de calor en las pastillas de combustible. Cuando FRAPTRAN está acoplado con CTF, estos valores tienen que ser equivalentes en ambos códigos.

4.2.2.5 Datos y herramientas auxiliares

En este apartado se presentan los datos y herramientas auxiliares necesarios para completar los escenarios plantados por el ejercicio de intercomparación entre códigos de simulación de seguridad nuclear lanzado a través del *benchmark* de PBTT-2. Estos datos han sido obtenidos mediante procedimientos y códigos externos a los incluidos en la plataforma informática desarrollada. Al igual que en las aplicaciones a reactores PWR, los como datos adicionales se necesitan las secciones eficaces, las funciones de forma del flujo intranodal y el mapa de quemados del núcleo.

Las tablas de secciones eficaces han sido de nuevo calculadas utilizando la metodología SIMTAB. Esta metodología, desarrollada en la *Universitat Politècnica de València* en colaboración con *Iberdrola Generación Nuclear S.A.*, se alimenta con datos de los códigos CASMO4-SIMULATE3 y genera las secciones eficaces y parámetros nucleares en función de la temperatura del combustible, la densidad del moderador, la concentración de boro y la inserción de barras de control [71], [72]. Las secciones eficaces del caso de aplicación a PBTT-2 están tabuladas siguiendo la parametrización (*branches*/estructura de ramas) que se presenta en la Tabla 4.1. Además, apuntar que se han empleado 675 composiciones isotópicas homogeneizadas para representar los diferentes diseños de elementos de combustible y quemados existentes en la carga del núcleo de PB-2 en su ciclo 2.

Tabla 4.7 Parametrización de las secciones eficaces en los transitorios de PBTT-2.

CR	Temperatura combustible (K)						Densidad Moderador (kg/m ³)					
0	400	800	1200	1600	2000	2200	141	226	299	435	599	780
1	400	800	1200	1600	2000	2200	141	226	299	435	599	780

Con lo que respecta a la obtención de las funciones de forma del flujo internodal para el cálculo de reconstrucción de potencia a nivel de varilla de PARCS, se han vuelto a utilizar los valores de distribución espacial de flujo homogeneizados a dos grupos de energía procedentes de la secuencia de quemado de TRITON/NEWT de la plataforma SCALE6.2.

Para la reconstrucción de potencia en las varillas se necesita incluir las funciones de forma del flujo para cada grupo de energía y para combustible con barra y sin barra de control en el archivo de entrada de PARCS. Existe una limitación en PARCS a la hora

de introducir las funciones de forma cuando se utilizan secciones eficaces en formato *nemtab*. Esta limitación se debe a que sólo se puede introducir una función de forma para un único diseño de combustible y estado de quemado del mismo. Por este motivo se deben utilizar valores promedio de quemado y el diseño mayoritario en el núcleo para el cálculo de dichas funciones. Esta limitación afecta de manera importante a núcleo heterogéneos como el del ciclo 2 de Peach Bottom, en el que existe 5 diseños distintos de elementos de combustible cargados en el núcleo.

De nuevo se han realizado algunas suposiciones para la obtención de las funciones de forma del flujo: se utiliza el quemado medio del núcleo como punto de quemado para la obtención de las funciones; el combustible fresco inicial (antes del quemado) tiene un enriquecimiento equivalente al máximo existente en el núcleo, en este caso del 3.01 % en peso de ^{235}U , se asume simetría un cuarto en el elemento combustible.

La Figura 4.38 muestra la representación gráfica de los materiales que componen la geometría desarrollada en SCALE para los elementos de combustible con barra (derecha) y sin barra de control (izquierda). Las funciones de la forma de flujo internodal se obtienen superponiendo una malla 2-D cartesiana sobre el elemento combustible y capturando los valores de flujo para dos grupos de energía (grupo térmico y rápido).

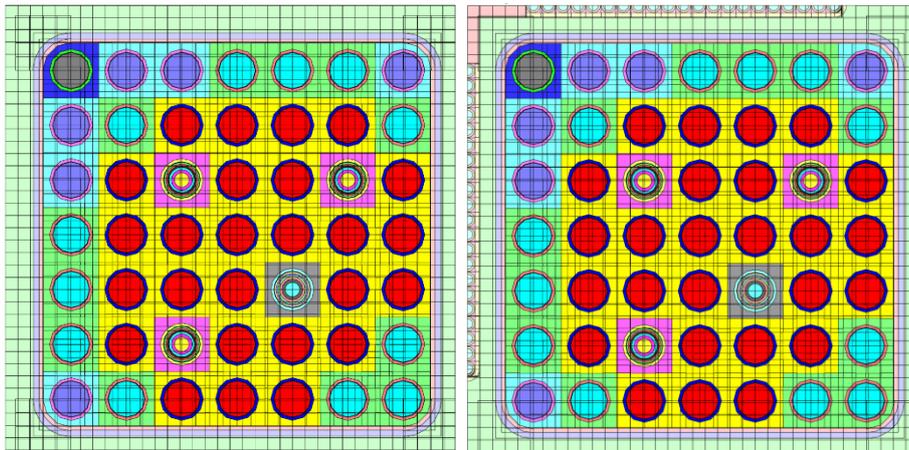


Figura 4.38 Diseño de los elementos combustible en el archivo de entrada de KENO.

Las celdas de la malla superpuesta coinciden (o son submúltiplos) de las celdas de varilla (*pin cells*) del elemento combustible. De esto modo los flujos obtenidos pueden normalizarse directamente y utilizarse como funciones de forma dependientes del grupo de energía y la inserción de barra en PARCS. Las Figura 4.39 y Figura 4.40 representan los flujos neutrónicos térmicos y rápidos calculados mediante la secuencia TRITON/NEWT en la malla superpuesta sobre los elementos de combustible.

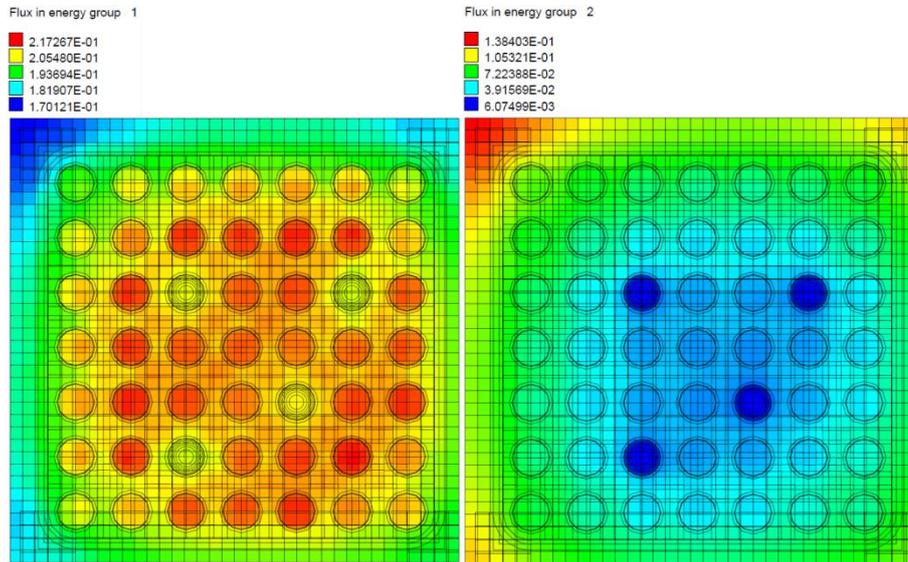


Figura 4.39 Distribución de flujos para elemento combustible BWR sin barra de control.

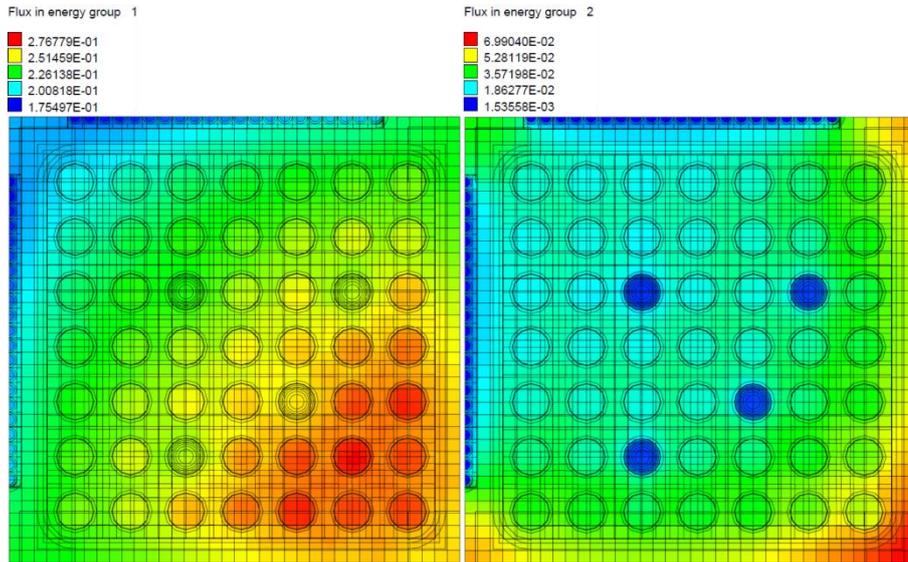


Figura 4.40 Distribución de flujos para elemento combustible BWR con barra de control.

El último conjunto de datos que debe proporcionarse a la plataforma multifísica es el mapa de quemado de los elementos de combustible cargados en el núcleo. Tanto el mapa 2-D de quemado medio de los elementos de combustible, que se representa en la Figura

4.41 para el estado inicial del núcleo de PB-2, como el mapa 3-D ha sido proveído a la plataforma a partir de los datos existentes en el código de referencia para el seguimiento del núcleo SIMULATE.

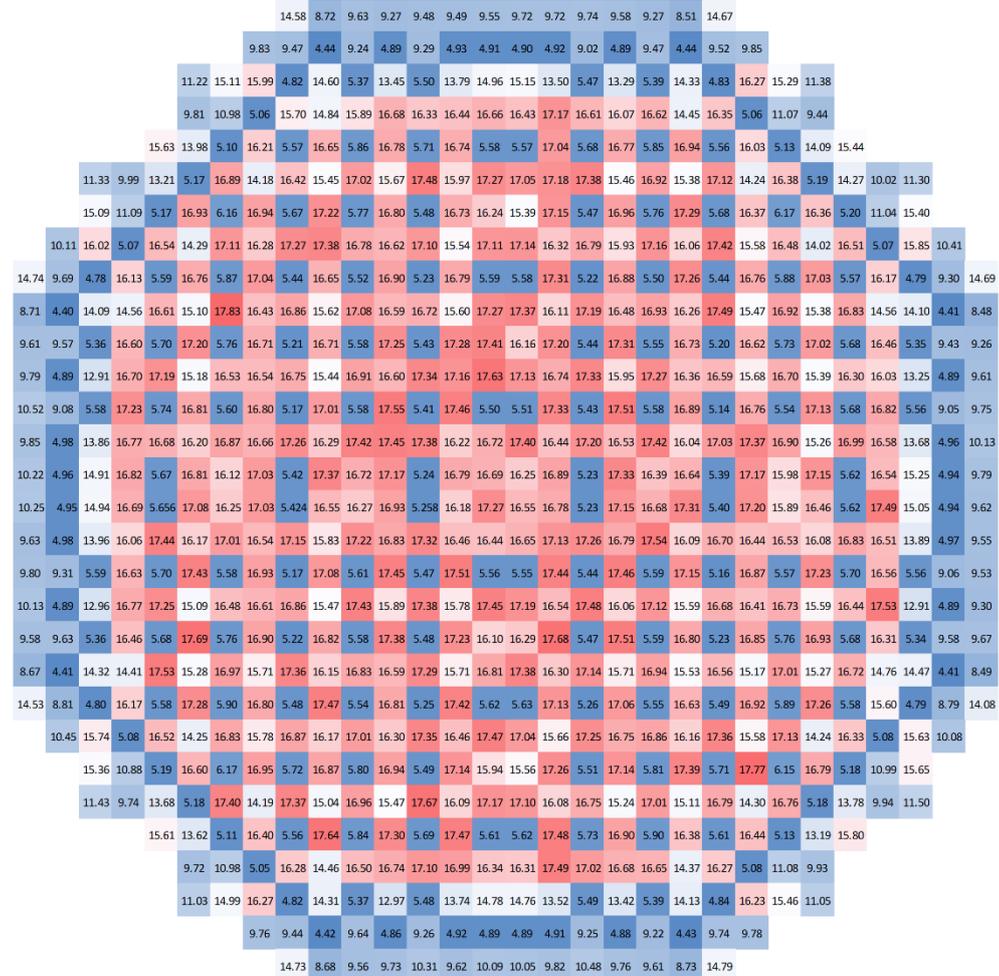


Figura 4.41 Mapa radial de quemado medio de varilla (GWD/TU) por elemento combustible.

4.2.3. Obtención del estado estacionario previo a los transitorios analizados.

En esta sección se describen los resultados tanto para los estados estacionarios de los códigos implicados en el análisis como para los casos acoplados TH-NK3D en las condiciones iniciales de PBTT-2 previas a los transitorios de caída de barra de control analizados. La potencia nominal del reactor de PB-2 es de 3,293 MWt y el flujo másico a través del núcleo de 12,915 kg/s. En la Tabla 4.4 se presentan las condiciones previas al

disparo de turbina. Las condiciones de operación inmediatamente anteriores al disparo de turbina corresponden con un caudal másico de núcleo igual a 10,445 kg/s (80.9% del caudal másico nominal) y una potencia total del reactor de 2,030 MWt (61.6% de la potencia nominal del reactor).

Tabla 4.8 Condiciones iniciales previas al transitorio PBTT-2.

Parámetro	Valor
Potencia térmica del núcleo (MW_t)	2,030
Nivel de potencia inicial (% sobre nominal)	61.65
Caudal de alimentación (kg/s)	980.26
Presión del reactor (Pa)	6,798,470
Caudal a través del núcleo (kg/s)	10445
Subenfriamiento entrada del núcleo (J/kg)	48,005.291
Caída de presión en el núcleo (Pa)	83,567.4
Calidad promedio a la salida del núcleo	0.097
Fracción de huecos promedio a la salida del núcleo	0.304

Las simulaciones que se presentan han sido realizadas de nuevo en el clúster *Quasar*, que consta de 4 nodos. Cada nodo tiene procesadores *AMD Opteron* de 32 cores a 2.4 GHz, con 96 GB de RAM. La conexión entre los nodos es *Gigabit Ethernet*.

4.2.3.1 Estado estacionario TRACE/CTF

Para asegurar que la simulación de TRACE/CTF comience desde el estado de operación de planta correcto, se debe comprobar que el código termohidráulico está inicializado a las mismas condiciones de núcleo que las calculadas con el código de referencia SIMULATE3 (S3) y a los datos proporcionados en el ejercicio de evaluación comparativa (*benchmark*).

Se ha realizado una simulación con el código acoplado TRACE/CTF hasta alcanzar las condiciones de estado estacionario. En la Tabla 4.9 se comparan los valores de referencia con los resultados obtenidos en la simulación con la plataforma multifísica. Se puede observar el mayor error afecta a la predicción de la caída de presión del núcleo. En cualquier caso, el error podría estar relacionado los diferentes factores locales de fricción aplicados en los códigos. En régimen bifásico es muy complicado obtener unos factores

de fricción que resulten adecuados para todos los regímenes de caudal circulante a través de los combustibles.

Tabla 4.9 Resumen de los resultados del estado estacionario de TRACE/CTF en PBTT-2.

Variable	PB-2	S3	TRACE/CTF	Error (%)
Caudal activo (kg/s)	10445.0	10,445.55	10,445.15	0.004
Caudal baipás (kg/s)	649.0	635.0	634.98	0.003
Potencia total (MWt)	2,030.0	2,030.2	2,030.07	0.006
Caída presión núcleo (kPa)	83.57	53.6	50.4	5.97

4.2.3.2 Estado estacionario PARCS

Con objeto de verificar las secciones eficaces y el modelo neutrónico se ha realizado una simulación de un estado estacionario con el código PARCS funcionando en solitario. Recordar en este punto que se ha utilizado la metodología SIMTAB para obtener los conjuntos de secciones eficaces para las diferentes isotopías de acuerdo con el quemado del combustible y diferencias en su diseño. Las secciones eficaces están tabuladas en función de la densidad del moderador, la temperatura del combustible y la inserción de barra de control. Es imprescindible proveer a PARCS de las condiciones termohidráulicas del núcleo. Estas condiciones de contorno para el cálculo neutrónico se obtienen, conjuntamente a la generación de secciones eficaces, a partir de los resultados de la simulación del núcleo con S3.

Generalmente para la verificación de las secciones eficaces y los modelos neutrónicos se comparan los perfiles de potencia axial colapsado y radial en el plano medio del núcleo. Otro parámetro que debe contrastarse con el código de referencia es factor de multiplicación (k_{eff}).

La Figura 4.42 muestra la buena concordancia existente entre los perfiles de potencia axial obtenidos en sendas simulaciones con S3 y PARCS. Estos resultados se refrendados con presentados en la Tabla 4.10. La comparación muestra el error absoluto (E_a) del parámetro k_{eff} en *pcm* (por cien mil) y el error cuadrático medio (RMSE) en porcentaje de la distribución de potencia radial y axial.

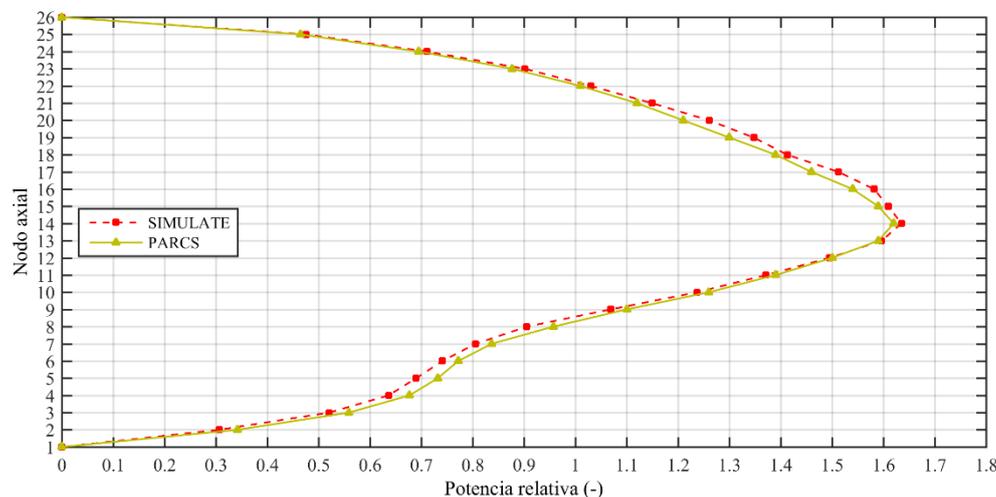


Figura 4.42 Perfil axial de potencia del estado estacionario de PARCS en PBTT-2.

En la Figura 4.43 se muestran los errores nodales cometidos en el perfil de potencia radial en el plano medio del núcleo. Como puede observarse, los errores radiales son relativamente elevados en diversas zonas del núcleo, estando estos distribuidos de manera no completamente simétrica (la zona de errores positivos (sobrepredicción) está ligeramente desplazados hacia abajo y la izquierda). El RMSE del perfil radial de potencia es del 7.36 % tal y como muestra la Tabla 4.10. Se sospecha que estos errores están inducidos por algún tipo de fallo en los factores de discontinuidad entre elementos combustibles dentro de las tablas de secciones eficaces o en la interpretación de las rotaciones de dichos factores realizadas en PARCS para tener en cuenta la ordenación de los combustibles en el núcleo.

Tabla 4.10 Resumen de los resultados del estado estacionario de PARCS en PBTT-2.

Código	k_{eff} (-)	$E_a k_{eff}$ (pcm)	RMSE perfil axial (%)	RMSE perfil radial (%)
SIMULATE3	0.99473	---	---	---
PARCSv3.2	0.99601	128	3.15	7.36

Analizados los resultados obtenidos y los errores en la distribución de potencia y la k_{eff} , se puede concluir que tanto las secciones eficaces como el modelo y opciones del archivo de entrada de PARCS son correctos. Una vez contrastada la validez con la simulación de PARCS en solitario se está en disposición de realizar cálculos acoplados.

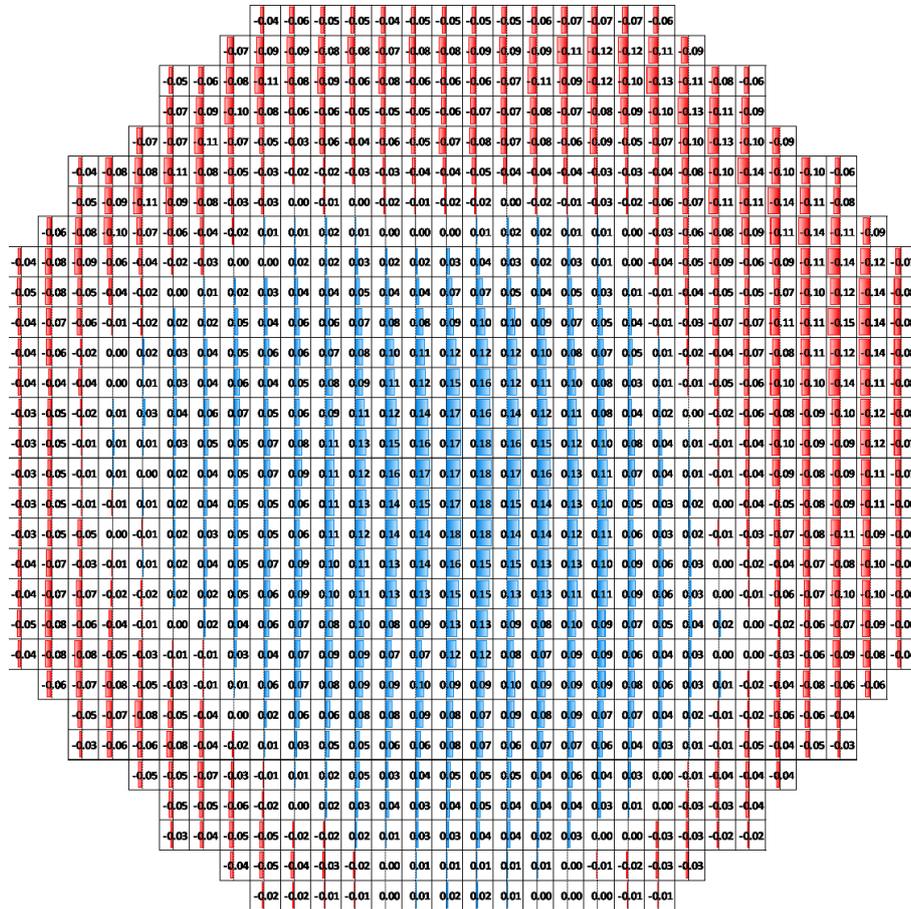


Figura 4.43 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario de PARCS en PBT-2.

4.2.3.3 Estado estacionario FRAPCON

En este apartado se presentan los resultados del estado pseudo-estacionario realizado con FRAPCON para obtener los valores de conductividad del huego en función del quemado (utilizados por CTF) y el estado de inicial para las simulaciones de FRAPTRAN. Además de los datos geométricos para cada tipo de varilla de combustible de los distintos tipos de elementos cargados en el núcleo de PB-2, se han empleado valores promedio de enriquecimiento según el tipo de combustible (2.93 y 3.01 % en peso) y promedio del núcleo para el flujo lineal de potencia (24.38 kW/m). En la Figura 4.44 se presentan en forma de gráfico los valores de conductividad del huego en función del quemado para los dos tipos de varilla presentes en el núcleo de PB-2.

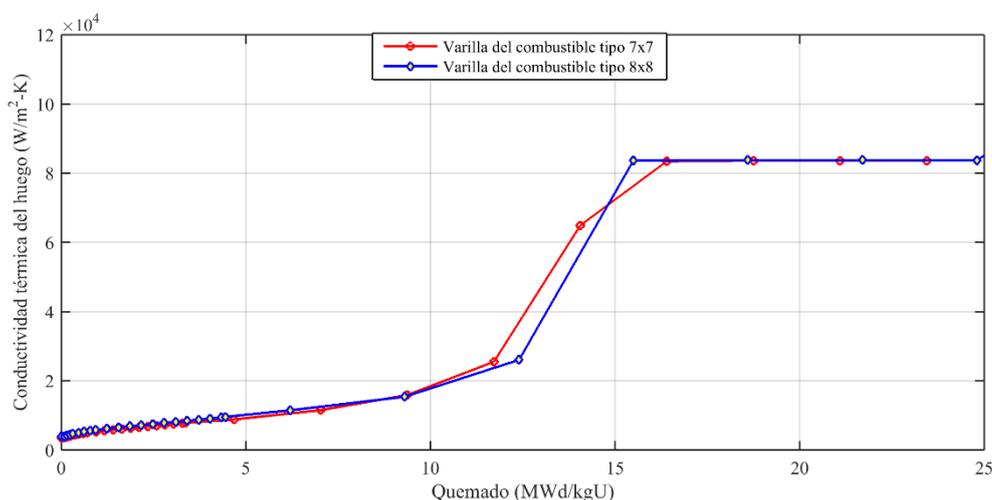


Figura 4.44 Evolución de la conductividad del hueco en función del quemado para PB-2.

4.2.3.4 Estado estacionaria acoplado TRACE/CTF/PARCS

El siguiente paso de la metodología aplicada, previo a la realización de los transitorios acoplados, contempla la resolución de un estado estacionario acoplado para proporcionar a las diferentes físicas modeladas con los códigos condiciones iniciales estables antes del comienzo del transitorio.

Para la verificación del estacionario acoplado se comparan de nuevo los resultados con el código de referencia para estacionarios y seguimiento de ciclo de núcleo, S3. El procedimiento es similar al presentado en la verificación del estacionario de PARCS en solitario. Los perfiles de potencia y el primer autovalor del problema de la ecuación de la difusión del esquema de carga del núcleo, calculados a partir de la solución nodal de TRACE/CTF/PARCS se comparan con los obtenidos en la simulación con el código de referencia.

Como puede verse en la Figura 4.45, los perfiles de potencia axial obtenidos con S3 y TRACE/CTF/PARCS presentan muy buen ajuste. Los errores relativos son siempre inferiores al 3 %. La misma conclusión puede extraerse de los errores absolutos de los perfiles de potencia radial presentados en la Figura 4.46. En general los errores nodales son inferiores al 4 %, exceptuando los nodos en la periferia del núcleo en los que alcanza valores superiores. Estos valores superiores en la periferia pueden deberse a la predicción de caudales superiores a través de los elementos combustibles que la componen.

En cualquier caso, los valores obtenidos por TRACE/CTF/PARCS para el estacionario previo al PBTT-2 pueden diferir de los calculados con el código de referencia debido a los diferentes modelos termohidráulicos que implementan. Por lo tanto, se espera que

los perfiles de potencia calculados por PARCS acoplado con CTF sean notablemente diferentes a los calculados con las condiciones de contorno de S3.

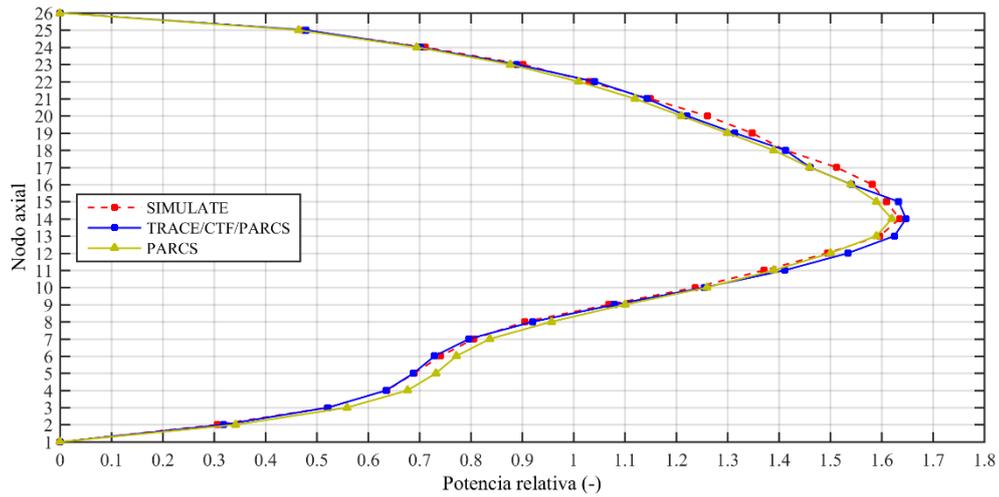


Figura 4.45 Perfil axial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.

La Tabla 4.11 presenta el resumen de los resultados obtenidos en la simulación de estado estacionario acoplado. Estos valores confirman la validez de las secciones eficaces y los modelos desarrollados para llevar a cabo las pruebas de caída de barra de control. Como puede observarse en la Tabla 4.5 el valor de la k_{eff} en la simulación acoplada es prácticamente coincidente con el obtenido con PARCS en solitario, y ambos errores respecto a la referencia están rondando las 120 pcm. Además, los errores cuadrático medios en ambos perfiles de potencia son inferiores al 4 %. Por tanto, se concluye que los resultados son excelentes y se ha conseguido un sólido punto de partida para la simulación transitoria.

Tabla 4.11 Resumen de los resultados del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.

Código	k_{eff} (-)	$E_a k_{eff}$ (pcm)	RMSE perfil axial (%)	RMSE perfil radial (%)
SIMULATE3	0.99473	---	---	---
PARCSv3.2	0.99601	128	3.15	7.36
TRACE/CTF/PARCS	0.99588	115	2.45	3.97

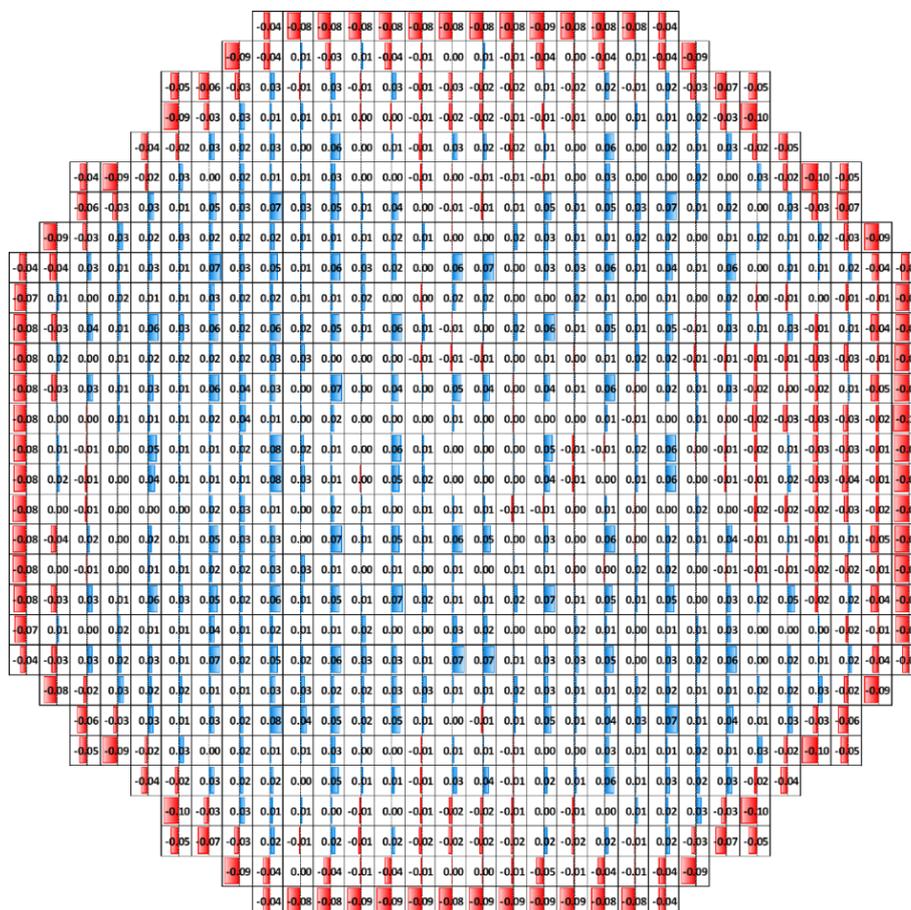


Figura 4.46 Error relativo en el perfil radial de potencia del estado estacionario acoplado TRACE/CTF/PARCS en PBTT-2.

4.2.4. Resultados de los transitorios de PBTT-2.

En esta sección se simulan los transitorios extremos propuestos en el tercer ejercicio del *benchmark* de PBTT-2. Las simulaciones se llevan a cabo utilizando los códigos acoplados dispuestos en la plataforma multifísica desarrollada. En este caso se emplean los múltiples acoples desarrollados mediante una simulación TRACE/CTF/PARCS/FRAPTRAN. Para estas simulaciones se ha utilizado un modelo de núcleo definido a nivel de elemento combustible con objeto de disminuir los tiempos de ejecución.

Como se ha mencionado con anterioridad, la propuesta para la verificación de códigos acoplados TH-NK3D planteada sobre el PBTT-2 incluye tres transitorios extremos sobre

la base de un TT. La validación de la plataforma multifísica y los diferentes acoples desarrollados ante las tres versiones extremas tienen como meta comprobar el acoplamiento de los códigos y el modelado de retroalimentación ante eventos accidentales complejos. Las secuencias propuestas para estos escenarios accidentales ficticios se definen en este apartado.

Antes de pasar a analizar cada uno de los escenarios accidentales por separado, se presentan las secuencias temporales que aplican a los componentes del modelo en estos transitorios. Como se ha mencionado con anterioridad, los sistemas de seguridad y protección que intervienen durante los escenarios propuestos son el sistema de parada de turbina (TSV), las válvulas de baipás de turbina (BPV) y el sistema de protección del núcleo. Además, en caso de no actuación por fallo de la BPV, intervendrán las válvulas de seguridad y alivio (SRVs) del reactor.

En la Tabla 4.12 se presenta la secuencia de actuación de la TSV de PB-2. Como puede observarse el tiempo de actuación de las TSV es de 96 ms. Esta secuencia temporal se aplica en todos los escenarios de disparo de turbina al comienzo del transitorio. El cierre de la TSV permite el aislamiento de la turbina y por tanto es el evento iniciador de los transitorios analizados.

Tabla 4.12 Secuencia del cierre de la TSV durante el PBTT-2.

Tiempo (s)	Fracción de Caudal
0.000	1.000
0.010	1.000
0.020	0.999
0.030	0.997
0.040	0.995
0.050	0.993
0.054	0.990
0.061	0.950
0.066	0.860
0.068	0.760
0.078	0.320

0.086	0.145
0.096	0.000
1.000	0.000
5.000	0.000

La secuencia de actuación de la válvula de baipás de la turbina con el condensador (BPV) de PB-2 se muestra en la Tabla 4.13. Como puede observarse el tiempo de actuación de BPV es más lento que la válvula de TSV, tardando 0.864 s en abrir completamente. Esta secuencia temporal aplica al segundo de los escenarios extremos de disparo de turbina. Como puede observarse en la Tabla 4.13 el retraso del comienzo de la apertura de esta válvula sobre el comienzo del transitorio es de 72 ms. Como se ha mencionado con anterioridad, la apertura de la TSV permite redirigir el caudal de la línea principal del vapor directamente hacia el condensador.

Tabla 4.13 Secuencia de apertura de la válvula de baipás de la turbina.

Tiempo (s)	Apertura de la válvula (%)	Tiempo (s)	Apertura de la válvula (%)
0.000	0.000	0.222	15.720
0.054	0.000	0.300	29.490
0.072	0.410	0.504	62.760
0.090	0.710	0.672	88.170
0.102	2.350	0.732	91.430
0.138	8.970	0.846	100.000
0.162	8.970		

En el primer escenario extremo considerado se supone que tras el cierre de la TSV actúa el sistema de protección del núcleo activándose la señal de *SCRAM*. La secuencia temporal de inserción de barras durante el *SCRAM* se presenta en la Tabla 4.14. En la Tabla 4.14 puede apreciarse que existe un retraso de 120 ms entre el cierre de la TSV y el comienzo del *SCRAM*. La inserción de los bancos de barras de control previstos durante el *SCRAM* lleva al reactor a parada estado de parada caliente tras el evento de TT.

Tabla 4.14 Secuencia de inserción del banco de barras tras el SCRAM.

Tiempo (s)	Posición banco barras control (ft)
0.000	0.000
0.120	0.000
0.160	0.094
0.247	0.500
0.354	1.000
0.457	1.500
2.500	10.200
3.080	12.000
5.000	12.000

4.2.4.1 Transitorio TRACE/CTF/PARCS: escenario extremo 1

En este apartado se presentan los resultados relativos al primer escenario extremo propuesto en el ejercicio de intercomparación del PBTT-2. Este transitorio es un disparo de la turbina sin apertura de la válvula de baipás de la turbina con el condensador. La secuencia de eventos que tiene lugar durante este transitorio se presenta en la Tabla 4.15.

Tabla 4.15 Secuencia de eventos del escenario extremo 1 de PBTT-2.

Tiempo (s)	Evento
0.000	TSV comienzo de cierre
0.096	TSV cierre completo
0.160	Comienzo del SCRAM
3.080	Fin del SCRAM

En el escenario aquí planteado se ha realizado un análisis comparativo entre los resultados de la simulación obtenidos con el código acoplado TRACE/CTF/PARCS y los resultados obtenidos con el modelo original de TRACE/PARCS en una simulación sin acoplar con CTF.

En la Figura 4.47 se presenta la evolución comparativa de la potencia, en valores relativos sobre la inicial, entre el código original TRACE y el código cuyo acople se ha desarrollado en el presente trabajo TRACE/CTF/PARCS. Como puede observarse en la Figura 4.48, el pico principal de potencia tiene lugar a unos 0.75 s del comienzo del cierre de la TSV (evento iniciador del transitorio). Los valores de amplitud del pico principal difieren considerablemente entre el código TRACE y el código acoplado TRACE/CTF/PARCS. Sin embargo, los valores calculados con este último están en concordancia con los resultados experimentales presentados en el ejercicio del *benchmark* del PBTT-2.

Las diferencias observadas entre TRACE y TRACE/CTF pueden deberse al distinto nivel de detalle que poseen los núcleos modelados con TRACE y CTF. Como se apuntó en el apartado de modelos desarrollados, el núcleo de TRACE está colapsado a 33 canales termohidráulicos, mientras que el de CTF está realizado canal a canal y consta de 765 canales termohidráulicos.

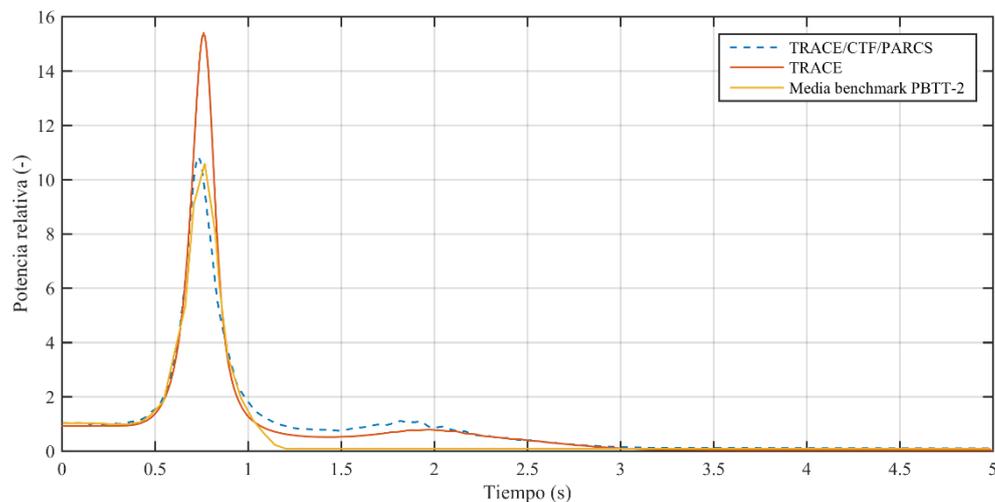


Figura 4.47 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.

En la Figura 4.48 puede apreciarse un pequeño retraso en la predicción de la potencia máxima en TRACE respecto al obtenido mediante la simulación acoplado con la plataforma multifísica.

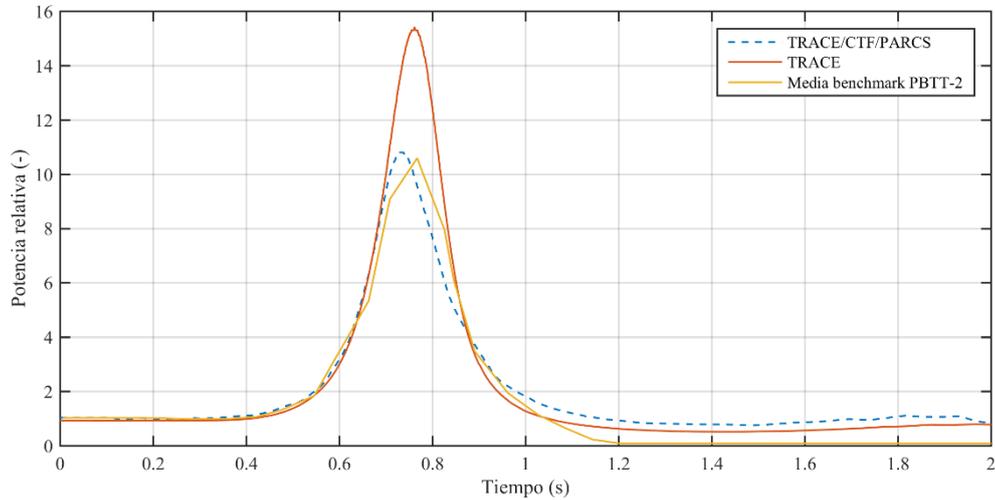


Figura 4.48 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2.

Finalmente en la Figura 4.49 se presenta la evolución comparativa de la potencia para el pico secundario del transitorio y el estado estacionario alcanzado tras el SCRAM del reactor. Como puede observarse en la Figura 4.49 la amplitud del segundo pico de potencia arrojada por la simulación con la plataforma multifísica es un poco superior al calculado por TRACE. La magnitud del segundo pico en TRACE/CTF/PARCS alcanza el valor de potencia previo al transitorio, mientras que el valor que predice TRACE se queda aproximadamente en el 80 % del valor de este valor de potencia inicial.

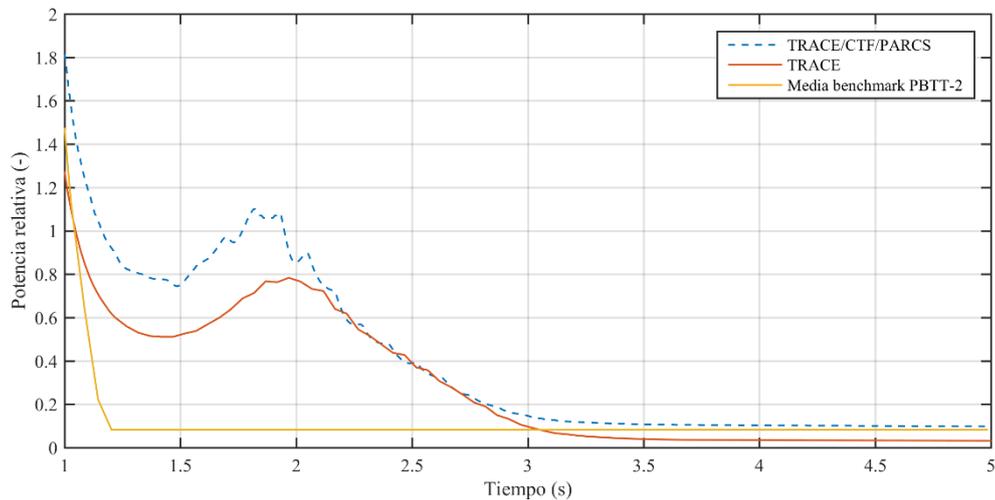


Figura 4.49 Segundo pico de potencia durante el escenario extremo 1 de PBTT-2

Por último, apuntar que en ambas simulaciones se alcanza un valor de potencia estable tras la finalización del *SCRAM*. El valor de la potencia es ligeramente diferente en ambas simulaciones, siendo superior el alcanzado con la simulación multifísica de la plataforma desarrollada. Tras el *SCRAM* se alcanza una especie de parada caliente del reactor, donde el valor de la potencia a largo plazo del núcleo debe estar dominada por el efecto del calor residual.

Respecto al seguimiento de los parámetros de seguridad limitantes, y por tanto objeto de estudio, de este tipo de transitorios de disparo de turbina hay que prestar especial atención a la presión alcanzada en la línea de vapor tras el rechazo de carga y disparo de turbina. En la Figura 4.50 se representa la evolución durante el transitorio del cociente entre la presión de diseño del sistema de refrigeración del reactor (RCS) y la presión alcanzada tras el cierre de la TSV. Como puede apreciarse en la Figura 4.50, el fallo en la apertura de la BPV de la turbina provoca un aumento de la presión por encima del límite del 110 % de la presión de diseño del RCS. Según las predicciones del código acoplado este límite se supera aproximadamente 1.4 s después del comienzo de la secuencia accidental.

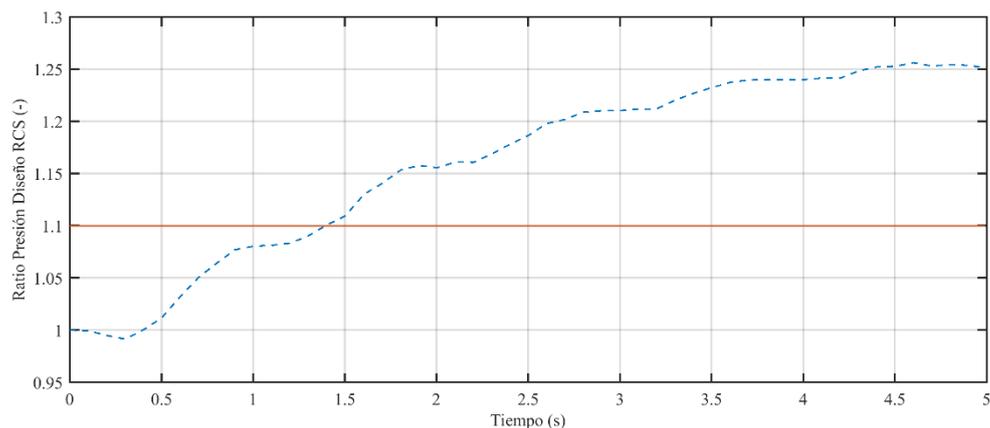


Figura 4.50 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 1 de PBTT-2

Respecto a otros parámetros a monitorear durante este tipo de secuencias accidentales, en la Figura 4.51 y la Figura 4.52 se presenta respectivamente la evolución del valor mínimo local del cociente entre el flujo crítico y el flujo real de calor (CPR) y la temperatura máxima de vaina (PCT), así como la varilla en la que se localiza en cada instante del transitorio. Como puede apreciarse, en ningún momento se superan los límites de estos valores en el escenario externo 1. Aunque es de preveer que durante eventos de disparo de turbina no se superen, al menos en los primeros segundos del accidente, los límites de seguridad en cuanto al CPR y la PCT, se ha considerado oportuno incluir las representaciones gráficas como demostración de las capacidades de la plataforma informática desarrollada.

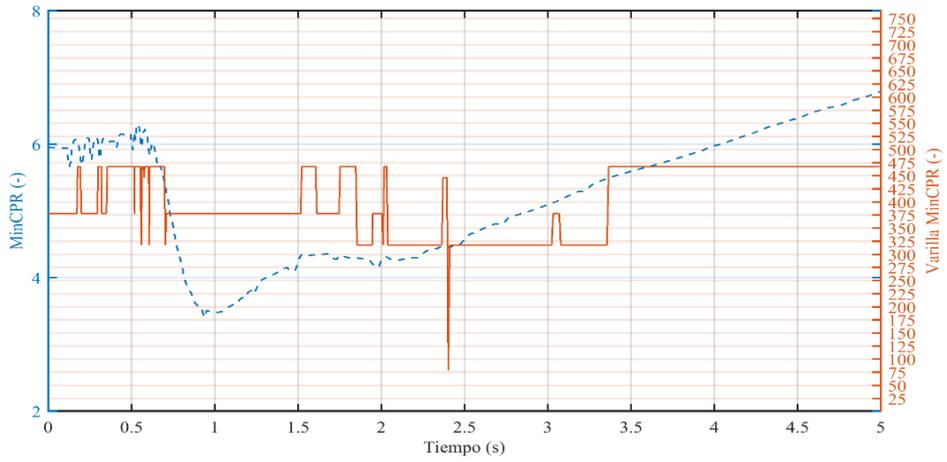


Figura 4.51 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 1 de PBTT-2

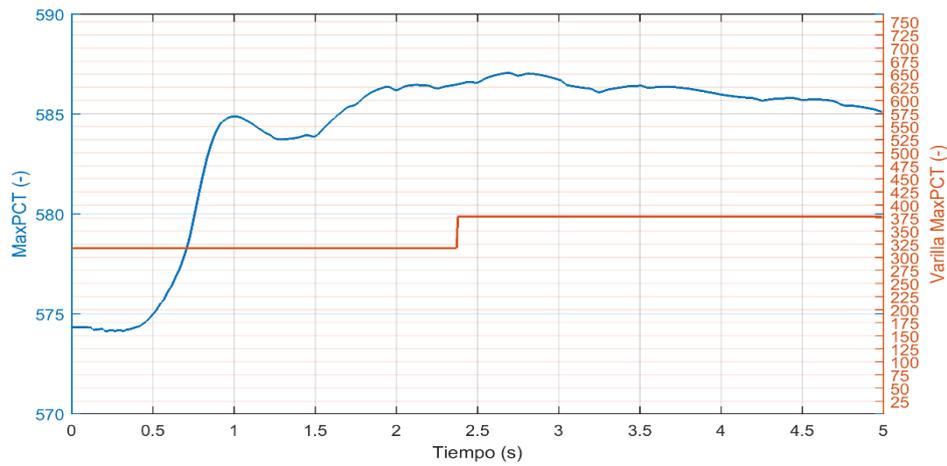


Figura 4.52 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 1 de PBTT-2

4.2.4.2 Transitorio TRACE/CTF/PARCS: escenario extremo 2

En este apartado se presentan los resultados relativos al segundo de los escenarios extremos propuesto en las especificaciones del PBTT-2. Este transitorio es un disparo de la turbina sin SCRAM. La secuencia de eventos que tiene lugar durante este transitorio se presenta en la Tabla 4.16.

Tabla 4.16 Secuencia de eventos del escenario extremo 2 de PBTT-2.

Tiempo (s)	Evento
0.000	TSV comienzo de cierre
0.060	BPV comienzo de apertura
0.096	TSV cierre completo
0.846	BPV completamente abierta

En el segundo escenario analizado se ha realizado una comparación entre los resultados de la simulación obtenidos con el código acoplado a través de la plataforma multifísica TRACE/CTF/PARCS, los resultados obtenidos con el modelo original de TRACE en una simulación sin acoplar con CTF y los resultados medios de los participantes en el *benchmark* para este ejercicio.

En la Figura 4.53 se presenta la evolución comparativa de la potencia , en valores relativos sobre la inicial. Como puede observarse en la Figura 4.48, el pico principal de potencia tiene lugar a unos 0.69 s del comienzo del cierre de la TSV (evento iniciador del transitorio). Los valores de amplitud del pico principal vuelven a diferir considerablemente entre el código TRACE y el código acoplado TRACE/CTF/PARCS. No obstante, los valores del código acoplado están más en consonancia con los resultados medios de los participantes en el *benchmark*.

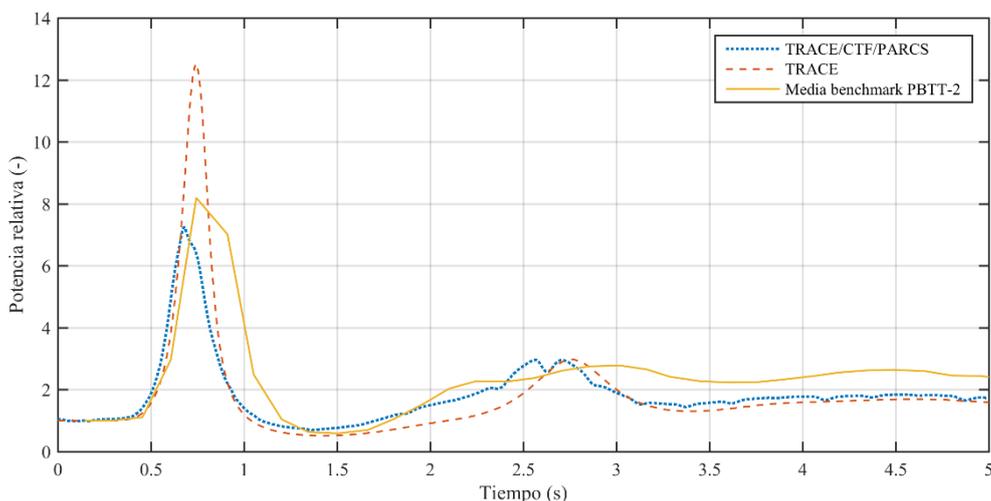


Figura 4.53 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.

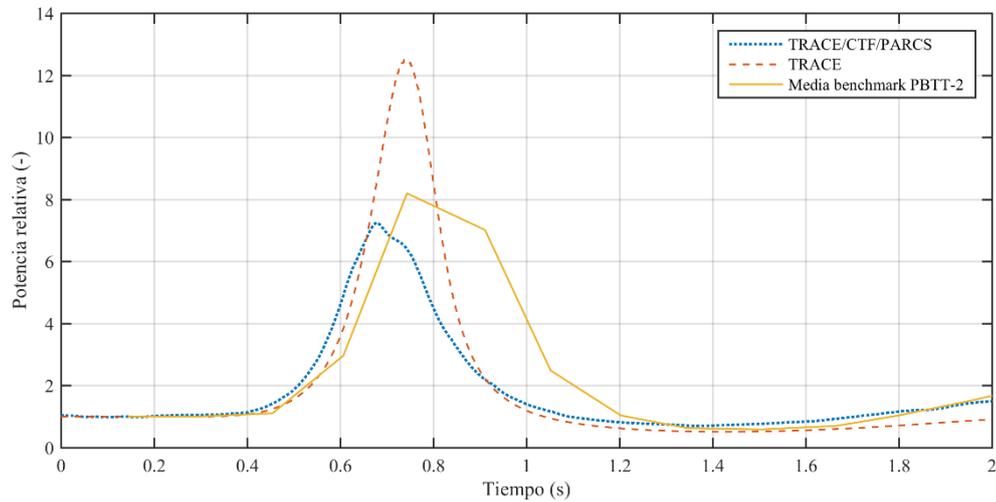


Figura 4.54 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.

En la Figura 4.53 y Figura 4.54 se observa que existe cierta tendencia de CTF/PARCS a predecir el pico principal de potencia con anterioridad a los participantes en el ejercicio de intercomparación del PBTT-2.

En la Figura 4.55 se aprecia que la amplitud del segundo pico de potencia es similar entre la simulación realizada con TRACE/CTF/PARCS y la realizada con TRACE. Como contrapartida, de nuevo la simulación acoplada que emplea el núcleo canal a canal de CTF presenta cierto adelanto en este pico secundario de potencia respecto a TRACE. Los resultados obtenidos en el segundo pico de potencia se ajustan en tendencia a los observados en la media de los resultados presentados en el *benchmark*.

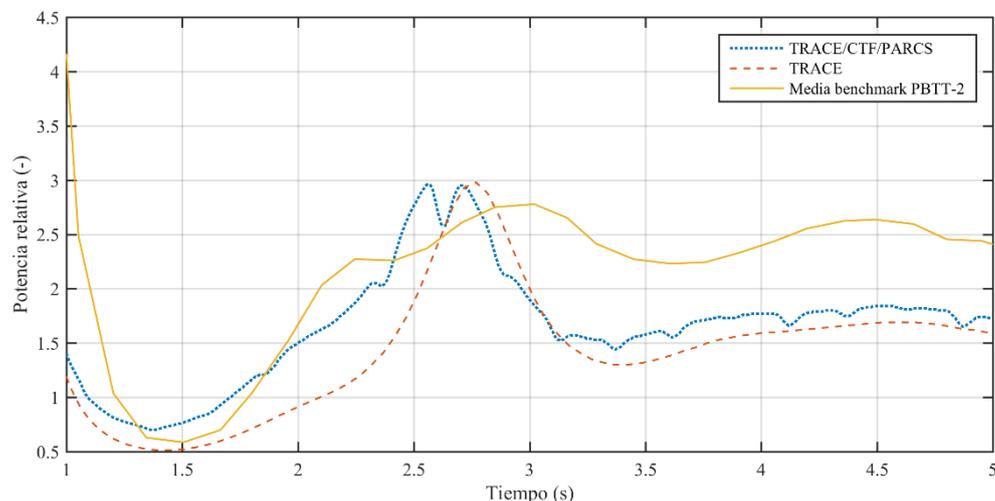


Figura 4.55 Segundo pico de potencia durante el escenario extremo 2 de PBTT-2.

Respecto al seguimiento de los parámetros de seguridad limitantes según las guías de seguridad para este tipo de evento, en la Figura 4.56 se representa la evolución del cociente entre la presión de diseño del sistema de refrigeración del reactor (RCS) y la presión alcanzada tras el cierre de la TSV. En Figura 4.56 se puede apreciar como el límite de seguridad del 110 % de la presión de diseño es de nuevo superado, debido al fallo en la señal de SCRAM del reactor que plantea este escenario. Según las predicciones del código en este caso el límite se sobrepasa aproximadamente 2.65 s después de que tenga lugar el suceso iniciador de la secuencia accidental.

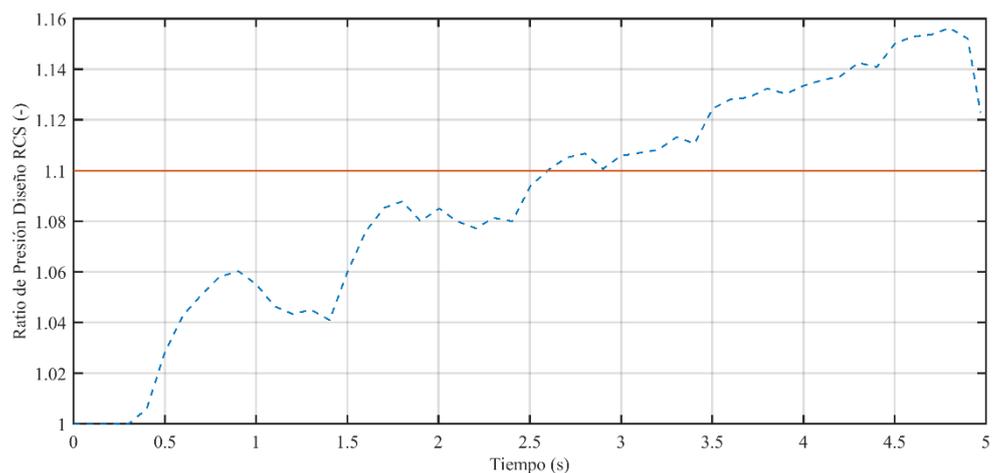


Figura 4.56 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 2 de PBTT-2

La señal simulada del CPR y la PCT se monitorean de nuevo con las herramientas implementadas en la plataforma informática desarrollada. En la Figura 4.57 y la Figura 4.58 se presentan las evoluciones de dichos parámetros. De nuevo se comprueba, como era de esperar, que en ningún momento se superan los límites de estos valores en el escenario externo 2.

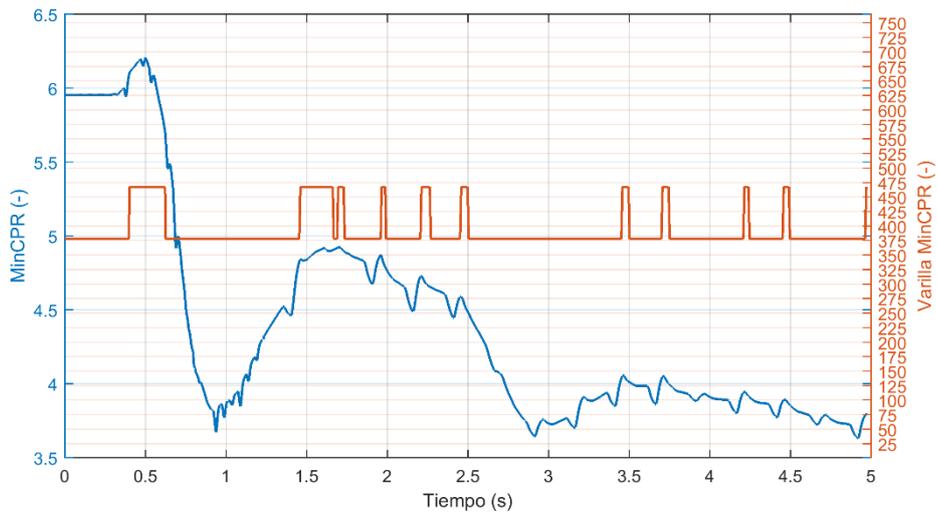


Figura 4.57 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 2 de PBTT-2

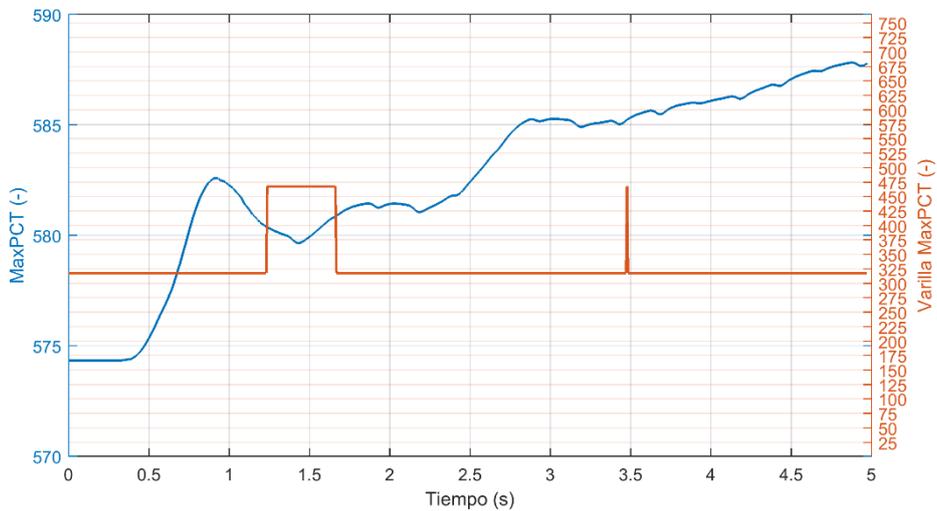


Figura 4.58 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 2 de PBTT-2

4.2.4.3 Transitorio TRACE/CTF/PARCS: escenario extremo 3

En este apartado se presentan los resultados obtenidos mediante la simulación del tercer escenario extremo propuesto en el ejercicio de intercomparación de PBTT-2. Este transitorio es un disparo de la turbina con fallo del sistema de activación de la válvula de baipás de turbina y sin *SCRAM* del reactor. La secuencia de eventos que tiene lugar durante este transitorio se presenta en la Tabla 4.17.

Tabla 4.17 Secuencia de eventos del escenario extremo 3 de PBTT-2.

Tiempo (s)	Evento
0.000	TSV comienzo de cierre
0.096	TSV cierre completo

En este último escenario accidental se ha vuelto a realizado un análisis comparativo entre los resultados de la simulación obtenidos con el código acoplado física TRACE/CTF/PARCS, los resultados obtenidos con el modelo original de TRACE en una simulación sin acoplar con CTF y el valor medio de los participantes en el ejercicio del *benchmark*.

En la Figura 4.59 se presenta la evolución comparativa de la potencia, en valores relativos sobre la inicial. Como puede observarse con mayor detalle en la Figura 4.60, el pico principal de potencia tiene lugar de nuevo a unos 0.75 s del comienzo del cierre de la TSV (evento iniciador del transitorio). Los valores de amplitud del pico principal obtenidos con TRACE/CTF/PARCS difieren considerablemente sobre los obtenidos con el código TRACE. Sin embargo, el pico obtenido con la plataforma multifísica está en concordancia con el valor medio de los resultados presentados en el *benchmark*.

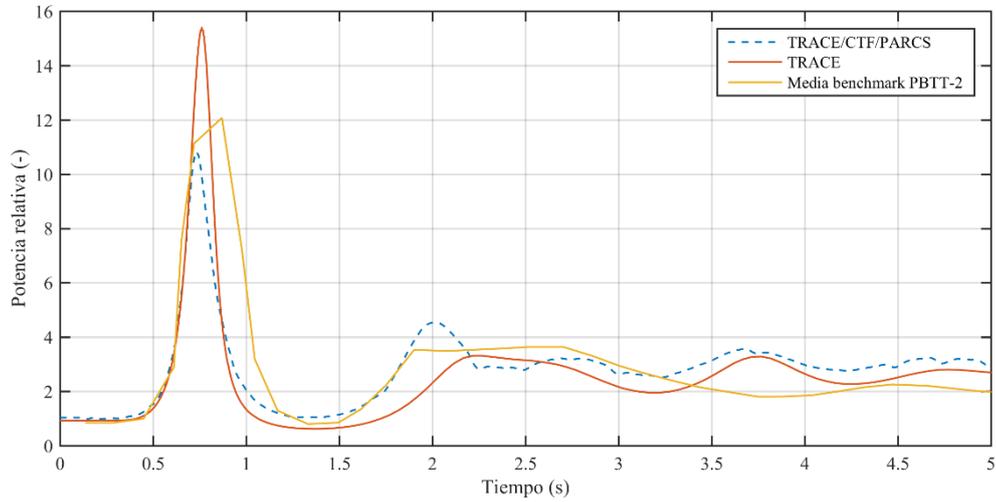


Figura 4.59 Evolución de la potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.

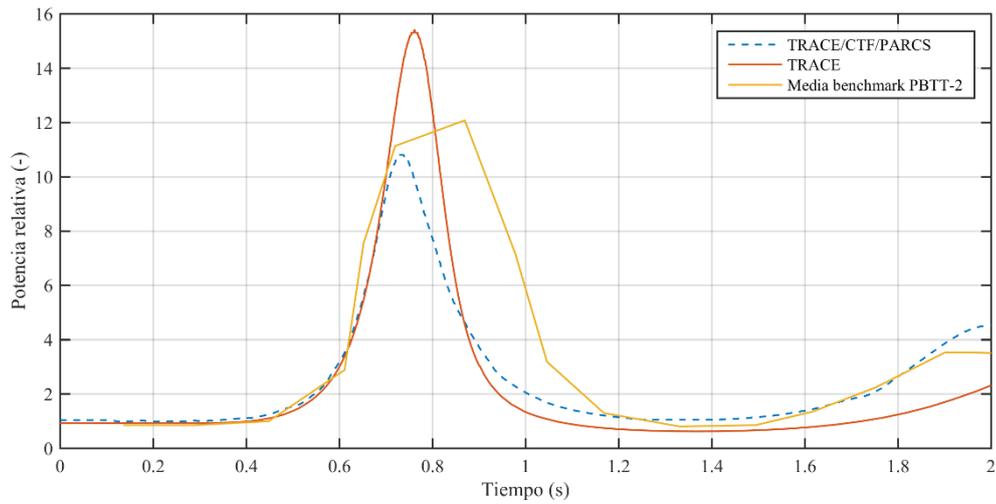


Figura 4.60 Pico principal de potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.

En la Figura 4.61 se aprecia que la amplitud y frecuencia de los picos secundarios de potencia. Como se puede apreciar resulta difícil realizar una comparativa de los picos secundarios entre los diferentes resultados obtenidos. Las diferencias se atribuyen a las diferentes predicciones de presión realizada por los códigos, que hace que se alcance el valor de presión de tarado para la apertura de las válvulas de alivio en diferentes momentos del transitorio.

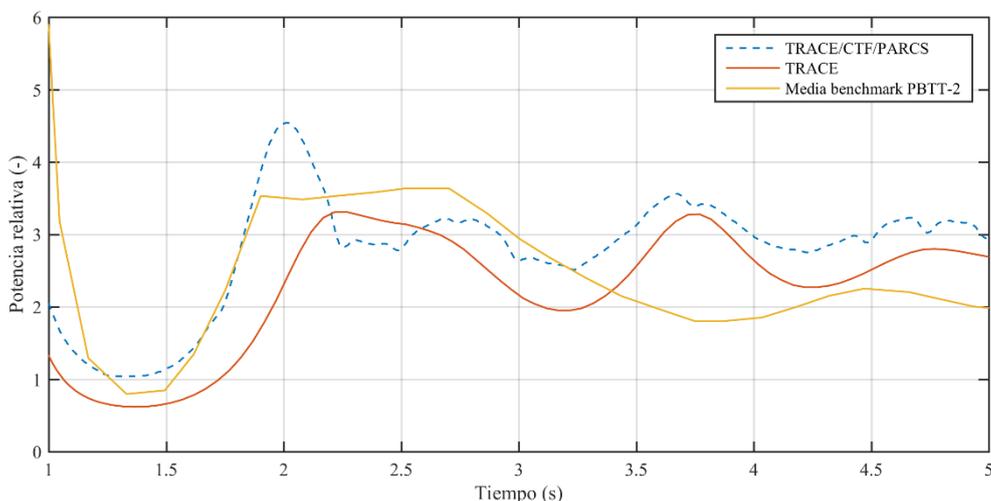


Figura 4.61 Picos secundarios de potencia durante el escenario extremo 3 de PBTT-2.

El límite de seguridad del 110 % de la presión de diseño es de nuevo superado como puede observarse en la Figura 4.62, debido al doble fallo planteado en este escenario accidental. Según las predicciones del código el límite se excede a los 1.4 s después del comienzo del transitorio. Este valor está en consonancia con lo observado en el escenario 1, y justificado con el fallo en la apertura de la válvula de baipás de turbina (BPV).

La señal simulada del CPR y la PCT se presentan en la Figura 4.63 y la Figura 4.64. Como se ha reiterado con anterioridad, es de esperar que ninguno de los límites se superen en los primeros segundos de este tipo de escenarios accidentales.

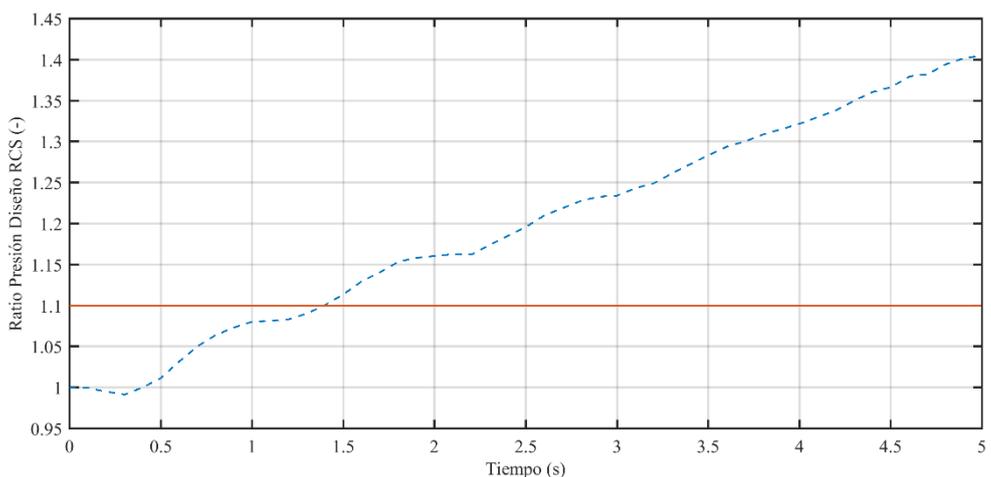


Figura 4.62 Ratio sobre la presión de diseño del RCS durante el escenario extremo 3 de PBTT-2

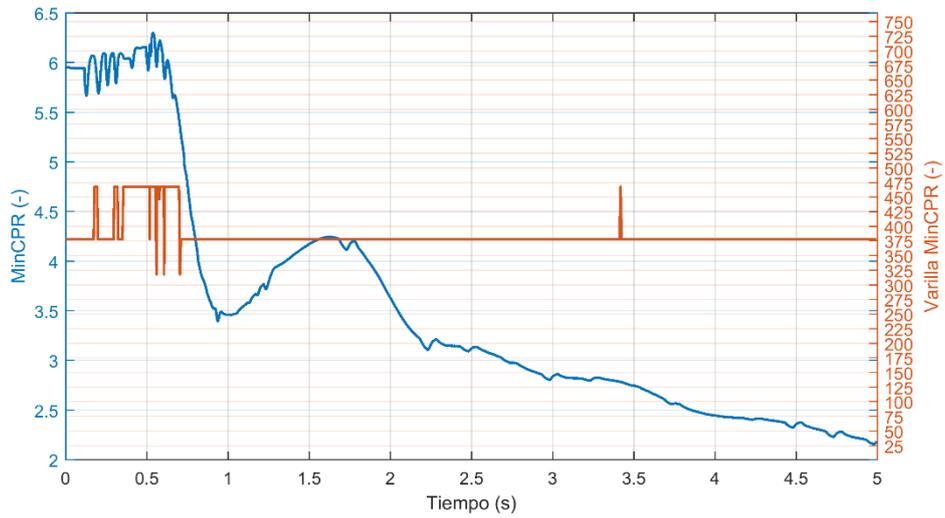


Figura 4.63 Valor y posición del MCPR durante el escenario extremo 3 de PBTT-2

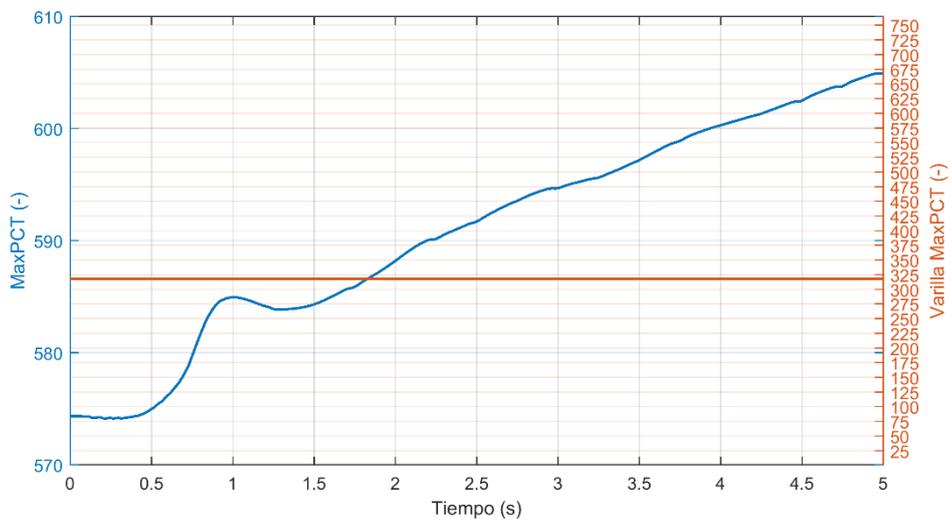


Figura 4.64 Valor y posición del MPCT durante el escenario extremo 3 de PBTT-2

Capítulo 5

Conclusiones y líneas futuras

5.1. Conclusiones

En el capítulo inicial se ponía de manifiesto las necesidades y distintos aspectos motivantes y se fijaba como objetivo de la presente tesis doctoral el desarrollar una serie de herramientas informáticas, englobadas a través de una plataforma multifísica, que permitan evaluar y analizar de forma determinista la seguridad de las Centrales Nucleares (CCNN) ante diferentes tipos de condiciones y escenarios accidentales.

La plataforma informática ha sido diseñada para realizar análisis determinista de seguridad nuclear en base a los escenarios propuestos en las guías de seguridad como accidentes base de diseño de reactores de agua ligera (LWR). Para ello se ha desarrollado una plataforma de códigos acoplados que abarcan prácticamente todas las físicas involucradas en este tipo de transitorios con la posibilidad de realizar predicciones a nivel de mejor-estimación (*best estimate*) de los límites de seguridad para los diferentes escenarios propuestos.

Numerosos trabajos científicos y normativas desarrolladas demuestran que para realizar predicciones fiables utilizando modelos que simulan el comportamiento de diferentes fenómenos físicos que pueden estar interrelacionados, como es el caso del comportamiento del núcleo del reactor, es imprescindible desarrollar el acoplamiento de los códigos de simulación. En este trabajo se han aplicado diferentes técnicas de acoplamiento interno entre los códigos termohidráulicos de sistema y subcanal, neutrónico y de comportamiento de combustible para conseguir el nivel de detalle requerido en los análisis deterministas de seguridad nuclear contemplados en las guías de referencia.

Desde el punto de vista termohidráulico, se ha desarrollado un complejo acoplamiento semi-implícito, a nivel de las ecuaciones de conservación del fluido, entre los códigos

termohidráulicos de sistema TRACE y de subcanal CTF. Con este acople se ha alcanzado el objetivo de combinar las capacidades de ambos códigos en cuanto a detalle de los modelos. Desde el punto de vista práctico resulta muy interesante la herramienta termohidráulica desarrollada ya que permite alcanzar un grado de detalle en el núcleo que aún no es posible con TRACE en solitario. Con la simulación mediante subdominios mixtos con ambos códigos acoplados, el circuito de refrigeración y los sistemas de control de la planta nuclear se modelan con TRACE y el núcleo del reactor se modela, empleando mayor detalle, con el código de subcanal CTF. Este acople ha requerido una importante labor de desarrollo y programación en ambos códigos, especialmente en aspectos relativos a la sincronización y comunicación de los cálculos acoplados. En CTF también se ha tenido que modificar el esquema de resolución de las ecuaciones de conservación para implementar el esquema de acople semi-implícito de dichas ecuaciones. Este método de acoplamiento ha resultado exitoso a tenor de los resultados presentados en el Capítulo 4 de éste trabajo.

El análisis termohidráulico con cinéticas puntuales y 1-D no es suficiente para gran parte del abanico de transitorios que se deben simular en un estudio de seguridad extenso, como es el necesario para la obtención de licencia. En numerosos transitorios contemplados en las guías de seguridad es necesaria, o al menos aconsejable, la utilización de una neutrónica 3-D. Para solventar este aspecto se ha desarrollado el acoplamiento, temporalmente explícito, del código de subcanal CTF con el simulador 3-D de núcleos mediante difusión neutrónica PARCS, en su última versión PARCSv3.2. Este acople permite realizar una correcta realimentación entre los fenómenos termohidráulicos que ocurren en el núcleo del reactor y la generación de calor nuclear. Los resultados obtenidos en diferentes aplicaciones prácticas han demostrado que el procedimiento de acople a nivel de elemento de combustible (nodal) entre CTF y PARCS es correcto.

Existe otro aspecto a destacar, dentro del acople TH-NK3D, que se ha conseguido culminar con éxito. Se trata de la opción de realizar cálculos de reconstrucción de potencia a nivel de varilla con PARCS para que esta información esté disponible en CTF y pueda alimentar a sus diferentes estructuras de calor, obteniendo estimaciones muy precisas de los límites de seguridad del núcleo, generalmente relativos a la integridad de las varillas (PCT, CPR, DNBR). De nuevo, a tenor de los resultados presentados en el Capítulo 4, ha quedado patente el correcto desempeño del acoplamiento con transitorios en los que existe una fuerte realimentación entre la termohidráulica y la neutrónica, como son la inyección de boro y el disparo de turbina.

Entre los objetivos planteados se incluía la posibilidad de utilizar códigos termomecánicos para analizar el comportamiento de las varillas de combustible nuclear. Con este fin, se ha implementado dentro de la plataforma desarrollada, el acople de CTF con el código de análisis transitorio de comportamiento de varillas de combustible nuclear FRAP-TRAN. Con esta nueva característica introducida, la plataforma desarrollada tiene la importante capacidad de calcular con gran precisión los parámetros relativos al comportamiento de la varilla de combustible y su integridad en los escenarios accidentales y

transitorios simulados. Actualmente, el acople está realizado a nivel de una única varilla, por lo que se utiliza para analizar la varilla más desfavorable en cuanto a los parámetros de seguridad limitantes en el evento seleccionado.

Con objeto de optimizar el coste computacional de las simulaciones realizadas en la plataforma informática, se analizaron los costes computacionales y la posibilidad de paralización de los códigos que la componen. Del análisis se concluyó que el código más restrictivo en cuanto a tiempo de computación era el código termohidráulico de subcanal CTF. Para abordar la paralelización de CTF se han empleado las modernas técnicas de computación de altas prestaciones basadas en la computación multiproceso. Mediante el empleo de técnicas de paralelización en subdominios axiales y la ejecución multiproceso basada en la tecnología MPI se ha conseguido optimizar el tiempo de ejecución y el uso de memoria virtual de éste código.

Entre los objetivos planteados en el inicio de la tesis doctoral estaba englobar todos los códigos acoplados desarrollados dentro de una plataforma común. Para alcanzar esta meta, todos los diferentes códigos y acoples realizados se han integrado en una única plataforma informática con la flexibilidad suficiente para analizar multitud de situaciones y eventos. La plataforma informática ha sido compilada y probada tanto con sistemas operativos Windows como en Linux. Si bien está pensada para su utilización para producción en sistemas basados en plataformas Linux.

La interacción y realimentación entre los códigos de la plataforma es interna. Se han desarrollado herramientas para el pre-procesado de información y construcción de archivos de entrada para los diferentes códigos alimentadas a través de una base de datos de elementos combustibles y parámetros necesarios para las simulaciones. Se han desarrollado algoritmos de cálculo y búsqueda dinámica de límites de seguridad durante las simulaciones y desarrollado herramientas automáticas para el post-procesado y representación gráfica de resultados. Todos estos desarrollos resultan de gran importancia para que los cálculos de seguridad nuclear realizados con la plataforma desarrollada puedan ser traceados de forma correcta y cumplan con los estándares de calidad requeridos en las simulaciones de seguridad nuclear.

La plataforma informática y los acoples se han verificado en aplicaciones PWR simulando dos tipos de eventos. El primero de los escenarios analizados está basado en una inserción inadvertida de reactividad, en este caso negativa al tratarse de una inserción de barra de control. Para la verificación de los desarrollos se disponen de datos reales de planta de dos pruebas operacionales de caída de barra de control. El segundo de los escenarios analizados consiste en un transitorio operacional ficticio de inyección de boro hasta alcanzar la subcriticidad, y por tanto el estado de parada en caliente, del reactor.

En los transitorios de reactividad (caídas de barra de control) analizados mediante el código acoplado paralelo TRACE/CTF/PARCS se obtienen resultados que se ajustan con gran precisión a los valores experimentales medidos en la propia instalación nuclear,

tanto para los detectores *incore* (PDDs) como los *excore*. Para este transitorio se ha utilizado la capacidad de análisis a nivel de varilla de combustible de todo el núcleo, utilizando para ello modelos con dicho nivel de detalle en CTF y la capacidad de reconstrucción de potencia a nivel de varilla de PARCS.

Respecto al transitorio de inyección de boro se ha comprobado que el código acoplado TRACE/CTF/PARCS intercambian adecuadamente los valores relativos a la concentración de boro y existe continuidad entre los valores transportados en ambos dominios simulados. En los resultados presentados se puede comprobar que la concentración crítica de boro está dentro del rango habitual en reactores PWR.

Respecto a la verificación de la plataforma multifísica frente a transitorios en BWR se han reproducido los tres escenarios extremos del ejercicio tipo *benchmark* desarrollado por la OCDE/NEA relativo a la central nuclear de Peach Bottom Unit 2. Los resultados obtenidos se han comparado con los de TRACE en solitario y con los valores medios obtenidos por los participantes en este ejercicio. Las tendencias observadas en todos los escenarios concuerdan con lo esperable analizando la fenomenología que tienen lugar. El comportamiento de la potencia total del núcleo se ajusta mejor a los resultados del *benchmark* que los obtenidos con TRACE en solitario, lo que confirma la importancia del nivel de detalle en la modelización del núcleo del reactor en este tipo de eventos.

5.2. Líneas futuras

En cuanto al trabajo futuro, dentro de la misma línea de investigación de la presente tesis existen diferentes áreas que han quedado abiertas y que requieren de un trabajo adicional, pero que resultan de gran interés por la posibilidad abierta de emplear la plataforma desarrollada para realizar estudios de apoyo a licencia en seguridad nuclear. En concreto se destacan las siguientes áreas a desarrollar:

- En el plano informático cabría cerrar la plataforma multifísica añadiendo una interfaz gráfica de usuario que englobe todas las herramientas auxiliares creadas, incluyendo el preprocesador de datos y elaboración de modelos y archivos de entrada, la distribución y control de ejecución de las simulaciones y el análisis de los resultados obtenidos. La interfaz gráfica debe ser capaz de proporcionar al usuario una manera cómoda de realizar análisis de diferente tipo de escenarios y transitorios. Para la construcción de los archivos de entrada la interfaz debe alimentarse de una base de datos de combustibles, parámetros y modelos, también susceptible de desarrollo como línea futura. Asimismo, la interfaz debe proporcionar flexibilidad a la hora de programar simulaciones con los diferentes códigos que integran la plataforma y de habilitar extracción y representación de resultados mediante las herramientas disponibles.
- Respecto a la ampliación de las capacidades de los códigos acoplados, se abre una interesante línea futura para la ampliación de las capacidades del acople

entre el código termohidráulico de subcanal CTF y el de análisis de comportamiento de combustible en transitorio FRAPTRAN. Esta línea surge de la actual limitación del acople de simular una única varilla de combustible nuclear. Para ampliar las capacidades del código acoplado CTF/FRAPTRAN hay que ampliar las capacidades de FRAPTRAN para que almacene en memoria los datos relativos a un número predefinido de varillas de combustible. Con esta mejora, las capacidades del acople se pueden extender a la simulación mediante FRAPTRAN de todas las varillas de combustible incluidas en el modelo de CTF. De esta forma, FRAPTRAN se encargaría de la simulación de las estructuras de calor tipo varilla nuclear de CTF, que a su vez le proporcionaría las condiciones de contorno del fluido que las rodea.

- En el apartado de documentación sería deseable desarrollar un manual de usuario y un procedimiento de utilización (guía) para todos los códigos informáticos incluidos en la plataforma, conjuntamente con la base de datos necesaria para la aplicación en el marco de cálculo a un transitorio o accidente específico. En este trabajo de documentación se debería desarrollar un procedimiento para tratar la información de entrada y salida de la plataforma, la especificación de las partes del análisis no incluido en los programas informáticos que la integran, valores de parámetros seleccionados en los archivos de entrada y otra información necesaria como especificación en el procedimiento de cálculo. La documentación de todos los procedimientos resulta indispensable para cumplir con el plan de garantía de calidad, que engloba todos los procedimientos control de documentos y pruebas de configuración de software.
- Resulta evidente que otra línea de desarrollo debe plantearse entorno a la validación de la herramienta desarrollada y los diferentes acoples que la componen. Además de las validaciones que se realizan en dentro del propio marco de desarrollo de los códigos seleccionados (por ejemplo, dentro del programa CAMP de la US NRC), debe continuarse con la validación de los diferentes códigos acoplados ante distintos tipos de escenarios accidentales hasta completar un amplio espectro de los mismos. Para la utilización de la plataforma y sus códigos acoplados a análisis determinista en seguridad nuclear, es necesario proporcionar una evaluación completa de todos los códigos frente a datos experimentales aplicables y/o soluciones exactas para demostrar que el código es adecuado para analizar los escenarios seleccionados.
- Otro abanico de aplicaciones relacionadas con el proyecto desarrollado son los cálculos de mejor estimación incluyendo el análisis de propagación de incertidumbre a través de todos los componentes (códigos) de la plataforma multifísica (*Best Estimate Plus Uncertainty*, BEPU). Los análisis de incertidumbre se realizan, en metodologías de mejor estimación, para confirmar que los códigos que forman parte del modelo de evaluación y la incertidumbre de aplicación es menor que el margen de diseño para el parámetro de seguridad (PCT, DNBR, CPR,

espesor de óxido en la vaina) limitante en el escenario analizado. Las diferentes técnicas de análisis de sensibilidad e incertidumbre basadas en el muestreo, que se están desarrollando en el seno del grupo de investigación son susceptibles de ser aplicadas, en un solo paso, a cálculos realizados con los diferentes códigos acoplados de la plataforma. De esta forma se puede cuantificar la propagación de incertidumbre total de los resultados obtenidos partiendo de la incertidumbre cuantificada en cada uno de los diferentes modelos y condiciones de contorno de los códigos utilizados. Para ello se pueden desarrollar pequeñas herramientas, seleccionadas a partir de la propia interfaz de usuario, para integrar librerías de análisis estadístico, como DAKOTA [84], de manera interna (o incluso externa) a la propia plataforma.

Se ha puesto de manifiesto que existen numerosas líneas de investigación abiertas para dar continuidad al trabajo realizado en la presente tesis. Todas las nuevas líneas de investigación propuestas están encaminadas a desarrollar una herramienta informática que pueda ser susceptible de utilización, por el propio grupo de investigación (o por empresas que adquieran una futura licencia), en cálculos deterministas de seguridad nuclear empleado metodologías de mejor estimación. Para ello se tienen que desarrollar los aspectos enumerados anteriormente.

Capítulo 6

Aportaciones

6.1. Principales Aportaciones

La presente tesis ha generado una serie de aportaciones a nivel de artículos de revista, aportaciones presentadas en congresos internacionales y congresos nacionales, e informes técnicos vinculados a proyectos I+D+i. Para facilitar el seguimiento de las diferentes contribuciones realizadas en el presente capítulo se listan subdivididas según la clasificación anterior.

6.1.1. Publicaciones en revistas indexadas JCR.

1. **Título:** Verification of the parallel pin-wise core simulator pCTF/PARCSv3.2 in operational control rod drop transient scenarios.
Autores: Enrique Ramos; Jose E. Roman; A. Abarca; Rafael Miró; Juan A. Bermejo, Alberto Ortego, Jose. M. Posada
Revista: Nuclear Science and Engineering (ISSN 0951-8320)
Volumen: 00 **Páginas:** 00-00 **Año:** 2017
DOI:10.1080/00295639.2017.1320892 (Publicado online)

2. **Título:** Control rod drop transient analysis with the coupled parallel code pCTF-PARCSv2.7
Autores: Enrique Ramos; Jose E. Roman; A. Abarca; Rafael Miró; Juan A. Bermejo
Revista: Annals of Nuclear Energy (ISSN 0306-4549.)
Volumen: 87 **Páginas:** 308-317 **Año:** 2016
DOI: 10.1016/j.anucene.2015.09.016

3. **Título:** Analysis of Thermal-hydraulic Fluctuations in Trillo NPP with CTF/PARCSv2.7 Coupled Code
Autores: A. Abarca; R. Miró; GJ. Verdú; J. A. Bermejo
Revista: Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science (ISSN 2332-8983)
Volumen: 2 **Páginas:** 021023-1 – 021023-5 **Año:** 2016
DOI: 10.1115/1.4031660

6.1.2. Presentaciones realizadas en congresos internacionales.

1. **Título:** Verification of CTF/PARCSv3.2 coupled code in a turbine trip scenario
Autores: A. Abarca, P. Hidalgo, R. Miró, G. Verdú, A. Sekhri.
Congreso: 2017 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP2017)
Lugar: Fukui and Kyoto, Japan **Fecha:** 24/04/2017
ISBN: 978-4-89047-167-6

2. **Título:** CTF working activities at Universitat Politècnica de València
Autores: P. Hidalgo, A. Abarca; R. Miró; G. Verdú;
Congreso: Fourth CTF User's Group Meeting (CTF-4)
Lugar: Erlangen, Deutschland **Fecha:** 8/05/2017

3. **Título:** Optimization of wall friction two-phase multiplier in the subchannel code CTF using the BFBT benchmark data
Autores: A. Abarca; Miró Herrero Rafael; Verdú Martín Gumersindo Jesús; A. Soler.
Congreso: International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP 2016)
Lugar: San Francisco, USA **Fecha:** 20/04/2016
ISBN: 978-0-89448-725-5

4. **Título:** CTF developments and benchmarking at the UPV
Autores: A. Abarca; R. Miró; G. Verdú;
Congreso: Third CTF User's Group Meeting (CTF-3)
Lugar: Villigen, Switzerland **Fecha:** 3/06/2016

5. **Título:** Pin Level Safety Analysis in a Reactivity Insertion Accident (RIA) Scenario with the parallel coupled code pCTF/PARCSv2.7
Autores: A. Abarca; E. Ramos; J. E. Román; R. Miró.
Congreso: 2nd Frontiers in Computational Physics Conference: Energy Sciences
Lugar: Zurich, Switzerland, **Fecha:** 5/06/2015

6. **Título:** CTF developments and benchmarking at the UPV
Autores: A. Abarca; R. Miró; G. Verdú;
Congreso: Second CTF User's Group Meeting (CTF-2)
Lugar: Madrid, Spain **Fecha:** 21/05/2015

7. **Título:** Thermal-hydraulic Fluctuations in Trillo NPP with CTF/PARCSv2.7 Coupled Code
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús
Congreso: 23rd International Conference Nuclear Energy for New Europe (NENE 2014)
Lugar: Portoroz, Slovenia **Fecha:** 11/09/2014
ISBN: 978-961-6207-37-9

8. **Título:** Improvement of the Critical Heat Flux models of COBRA-TF and Assessment against the Post-Dryout Experiments Performed at the Royal Institute of Technology
Autores: Abarca Giménez Agustín; Miró Herrero Rafael; Barrachina Celda Teresa María; Verdú Martín Gumersindo Jesús.
Congreso: International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-10)
Lugar: Okinawa, Japan **Fecha:** 18/12/2014
ISBN: 978-986-88729-1-2

9. **Título:** Validation of the subchannel code CTF against the benchmark data of the OECD/NEA PSBT.
Autores: Agustín Abarca; Rafael Miró; Hidalgo-García-Bermejo Patricio; Teresa Barrachina; Gumersindo Verdú
Congreso: ANS Reactor Physics Topical Meeting (PHYSOR 2014). The Role of Reactor Physics towards a Sustainable Future
Lugar: Kyoto, Japan **Fecha:** 3/10/2014
ISBN: 978-0-89448-095-9

10. **Título:** Current status of the CTF developments and benchmarking at the UPV
Autores: Abarca Giménez Agustín; Barrachina Celda Teresa María; Miró Herrero Rafael; Verdú Martín Gumersindo Jesús
Congreso: First CTF User's Group Meeting (CTF-1)
Lugar: München, Deutschland **Fecha:** 16/05/2014

11. **Título:** High fidelity analysis of BWR fuel assembly with COBRA-TF/PARCS and TRACE codes.
Autores: Abarca Giménez Agustín; Miró Herrero Rafael; Barrachina Celda Teresa María; Verdú Martín Gumersindo Jesús
Congreso: 6th International Nuclear Atlantic Conference (INAC 2013)
Lugar: Recife, Pernambuco, Brazil **Fecha:** 29/11/2013
ISBN: 978-85-99141-05-2

12. **Título:** A parallelization approach to the COBRA-TF thermal-hydraulic subchannel code.
Autores: Ramos Peinado Enrique; Abarca Giménez Agustín; Román Moltó José Enrique; Miró Herrero Rafael
Congreso: Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013)
Lugar: París, France **Fecha:** 31/10/2013
ISBN: 978-15-84887-95-9

13. **Título:** Paralelization of thermalhydraulic sub-channel code COBRA-TF using Krylov methods of the PETSc toolkit.
Autores: Ramos Peinado Enrique; Abarca Giménez Agustín; Román Moltó José Enrique; Miró Herrero Rafael; Barrachina Celda Teresa María; Verdú Martín Gumersindo Jesús
Congreso: Mathematical Modelling in Engineering & Human Behaviour 2012
Lugar: Valencia, España **Fecha:** 7/09/2012
ISBN: 978-84-695-6701-2

14. **Título:** A procedure for coupling thermal-hydraulic subchannel and neutronic codes using COBRA-TF and PARCS
Autores: Abarca Giménez Agustín; Miró Herrero Rafael; Barrachina Celda Teresa María; Verdú Martín Gumersindo Jesús
Congreso: Nuclear Atlantic Conference - 2011: INAC2011/XVII ENFIR/X ENAN/II ENIN
Lugar: Belo Horizonte, Brasil **Fecha:** 28/10/2011
ISBN: 978-85-99141-04-5

15. **Título:** Boron injection transient analysis with RELAP5/PARCS v2.7 coupled code
Autores: A. Abarca; T. Barrachina; R. Miró; G. Verdú; C. Pereira
Congreso: 8th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-8)
Lugar: Shangai, China **Fecha:** 10/10/2010
ISBN: 978-15-84887-9-19

6.1.3. Presentaciones realizadas en congresos nacionales.

1. **Título:** Conversión del modelo termohidráulico-neutrónico del circuito primario de un PWR de RELAP5 a TRACE.
Autores: F. López-Cerón Nieto; A. Abarca Giménez; Miró Herrero Rafael; Verdú Martín Gumersindo Jesús.
Congreso: 42 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Santander, España **Fecha:** 30/09/2016
ISBN: 978-84-617-4660-6

2. **Título:** Optimización del Multiplicador Bifásico de Fricción en el Código Termohidráulico de Subcanal CTF.
Autores: A. Abarca; Miró Herrero Rafael; Verdú Martín Gumersindo Jesús; A. Soler; Concejal-Bermejo Alberto
Congreso: 42 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Santander, España **Fecha:** 30/09/2016
ISBN: 978-84-617-4660-6

3. **Título:** Verificación de los Modelos de Critical Heat Flux a Flujo Axial de Potencia no uniforme en el Código Termohidráulico de Subcanal CTF.
Autores: A. Abarca; Miró Herrero Rafael; Verdú Martín Gumersindo Jesús; A. Soler; Concejal-Bermejo Alberto.
Congreso: 42 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Santander, España **Fecha:** 30/09/2016
ISBN: 978-84-617-4660-6

4. **Título:** Análisis a Nivel de Varilla de Combustible de un Accidente de Inserción de Reactividad con el Código Acoplado Paralelo pCTF/PARCSv2.7.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Ramos Peinado, Enrique; Román Moltó, José Enrique; Miró Herrero, Rafael.
Congreso: 41 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: La Coruña, España **Fecha:** 23/09/2015
ISBN: 978-84-608-2453-4

5. **Título:** Análisis de Fluctuaciones Termo-Hidráulicas en un Reactor PWR con el Código Acoplado CTF/PARCSv2.7.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 41 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: La Coruña, España **Fecha:** 23/09/2015
ISBN: 978-84-608-2453-4

6. **Título:** Validación del Código Acoplado CTF/PARCSv2.7 ante un Transitorio de Caída de Barra de Control.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 41 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: La Coruña, España **Fecha:** 23/09/2015
ISBN: 978-84-608-2453-4

7. **Título:** Visualización en 3-D de PARCS y COBRA-TF mediante el uso del paquete de herramientas VTK.
Autores: Gomez-Zarzuola-Quel, Consuelo; Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 41 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: La Coruña, España **Fecha:** 23/09/2015
ISBN: 978-84-608-2453-4

8. **Título:** Mejoras en la versión paralela del código termohidráulico de subcanal COBRA-TF.
Autores: Ramos Peinado Enrique; Abarca Giménez Agustín; Román Moltó José Enrique; Miró Herrero Rafael.
Congreso: 40 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Valencia, España **Fecha:** 01/10/2014
ISBN: 978-84-697-1656-4

9. **Título:** Validación del código de subcanal CTF por medio de los resultados experimentales del benchmark PSBT de la OECD/NEA.
Autores: Hidalga-García-Bermejo, Patricio; Miró Herrero, Rafael; Barrachina Celda, Teresa María; Abarca Giménez, Agustín; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 40 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Valencia, España **Fecha:** 01/10/2014
ISBN: 978-84-697-1656-4

10. **Título:** Validación del Modelo de Crítico Heat Flux de COBRA-TF frente a los Experimentos de Post-Dryout realizados por el Royal Institute of Technology.
Autores: A. Abarca; Rafael Miró; T. Barrachina; G. Verdú.
Congreso: 40 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Valencia, España **Fecha:** 01/10/2014
ISBN: 978-84-697-1656-4

11. **Título:** Paralelización mediante paso de mensajes del código COBRA-TF de simulación nuclear.
Autores: Ramos Peinado, Enrique; Román Moltó, José Enrique; Abarca Giménez, Agustín; Miró Herrero, Rafael.
Congreso: XXIV Jornadas de Paralelismo
Lugar: Madrid, España **Fecha:** 17/09/2013
ISBN: 978-84-695-8330-2

12. **Título:** Análisis de alta fidelidad de un elemento BWR con los códigos COBRA-TF/PARCS y TRACE.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Miró Herrero, Rafael; Barrachina Celda, Teresa María; Verdú Martín, Gumersindo Jesús; A. Soler.
Congreso: 39 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Reus, España **Fecha:** 24/09/2013
ISSN: 1137-2885

13. **Título:** Aproximación paralela del código termohidráulico de subcanal COBRA-TF.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Ramos Peinado, Enrique; Román Moltó, José Enrique; Miró Herrero, Rafael.
Congreso: 39 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Reus, España **Fecha:** 24/09/2013
ISSN: 1137-2885

14. **Título:** Validación del código acoplado COBRA-TF/PARCSv2.7 ante un transitorio de inyección de boro.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 39 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Reus, España **Fecha:** 24/09/2013
ISSN: 1137-2885

15. **Título:** Procedimiento para el acople del código termohidráulico de subcanal COBRA-TF y el neutrónica PARCS v2.7.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 38 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Cáceres, España **Fecha:** 18/10/2012
ISSN: 1137-2885

16. **Título:** Simulación de un núcleo PWR con el código acoplado COBRA-TF/PARCS v2.7.
Autores: Abarca Giménez, Agustín; Barrachina Celda, Teresa María; Miró Herrero, Rafael; Verdú Martín, Gumersindo Jesús.
Congreso: 38 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española
Lugar: Cáceres, España **Fecha:** 18/10/2012
ISSN: 1137-2885

Referencias

- [1] IAEA-International Atomic Energy Agency, Fundamental Safety Principles SF-1, Vienna: IAEA, 2016.
- [2] OECD Nuclear Energy Agency, «OECD/NEA/CSNI/R(96)17 CSNI Integral Test Facility Validation Matrix for the Assessment of Thermal-Hydraulic codes for LWR LICA and Transients,» de *Committee on the Safety of Nuclear Installations.*, 1996.
- [3] N. Martin, A. Hebert y G. Marleau, «DRAGON solutions to the 3D transport benchmark over a range in parameter space,» *Annals of Nuclear Energy*, pp. Vol. 37, 8, 1107-1114, 2010.
- [4] J. Uhle y B. Aktas, «USNRC Code Consolidation and Development Program,» de *OECD – CSNI workshop on Advanced Thermal-Hydraulic and Neutronic Codes: Current and Future Applications*, Barcelona, 2000.
- [5] K. N. Ivanov, R. Macian-Juan, A. Irani y A. J. Baratta, «Features and Performance of a Coupled Three-Dimensional Thermal-Hydraulic/Kinetics TRAC-PF1/NEM PWD Analysis Code,» *Annals of Nuclear Energy*, 2000.

- [6] D. Bertolotto, A. Manera, S. Frey, H. M. Prasser y R. Chawla, «Single-phase mixing studies by means of a directly coupled CFD/system-code tool,» *ANNALS OF NUCLEAR ENERGY*, pp. Volume: 36, Issue: 3, Pages: 310-316, 2009.
- [7] CASL-Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors, «CASL is a DOE Energy Innovation Hub for,» 2010. [En línea]. Available: <http://www.casl.gov/about-casl.shtml>.
- [8] A. Liñán, «La Mecánica de Fluidos en el Siglo XX,» de *Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, Madrid, 2000.
- [9] G. G. Stokes, «On the Theories of the internal friction of fluids in motion and on the equilibrium and motion of elastic solids,» de *Trans. Camb. Phil. Soc.*, 1845.
- [10] P. J. Roache, *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, Hermosa, 1998.
- [11] F. H. Harlow y A. A. Amsden, «A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds,» *J. Comput. Phys.* 8, pp. 197-213, 1971.
- [12] Patankar S. V., «A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations,» *J. Numer. Heat Transfer, Vol. 4*, pp. pp. 409-425, 1981.
- [13] H. K. Versteeg y W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method.*, Longman Group Ltd, 1995.
- [14] J. R. Raphson, *Analysis Aequationum Universalis*, Londres, 1690.
- [15] H. A. v. d. Vorst, *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Utrecht University: Cambridge University Press, 2003.
- [16] J. J. Duderstadt y M. William, *Transport Theory*, New York: Wiley Interscience Publication, 1979.
- [17] E. Lewis y W. Miller, *Computational Methods of Neutron Transport*, American Nuclear Society, 1993.
- [18] G. I. Marchuk y V. I. Lebedev, *Numerical Methods in the Theory of Neutron Transport.*, Taylor & Francis, 1986.
- [19] A. Bernal, J. E. Roman, R. Miró, D. Ginestar y G. Verdú, «Development of a finite volume inter-cell polynomial expansion method for the neutron diffusion equation,» *Journal of Nuclear Science and Technology, Vol 53, Issue 8.*, pp. 1212-1223, 2016.

-
- [20] A. Vidal-Ferràndiz, R. Fayer, D. Ginestar y G. J. Verdú, «Solution of the Lambda modes problem of a nuclear power reactor using a h-p finite element method,» *Annals of Nuclear Energy*, 2014.
- [21] T. Ise, T. Yamazaki y Y. Nauwra, «Application of the Finite Element Method to the Three-Dimensional Neutron Diffusion Equation,» Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai, Japan, 1978.
- [22] T. Downar, Y. Xu y V. Seker, «PARCS v3.0 U.S. NRC Core Neutronics Simulator. Theory Manual,» Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, University of Michigan, Ann Arbor, MI, 2012.
- [23] P. Knabner y L. Angermann, *Numerical Methods for Elliptic and Parabolic Partial Differential Equations*, New York: Springer-Verlag New York, Inc, 2003.
- [24] K. S. Smith, «Nodal Method Storage Reduction by Nonlinear Iteration,» *Trans. Am. Nucl. Soc.*, pp. 44, 265, 1983.
- [25] Y. Saad, «Iterative Methods for Sparse Linear Systems,» *PWS Publishing Company*, pp. 144-299, 1996.
- [26] H. Finnemann, F. Bennewitz y M. R. Wagner, «Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations,» *Atomkernenergie*, 30, pp. 123-128, 1977.
- [27] K. S. Smith, «An Analytic Nodal Method for Solving the 2-Group, Multi-Dimensional, Static and Transient,» *Nuc. Eng. Thesis, Dept. of Nuc. Eng., MIT*, 1979.
- [28] H. G. Joo, G. Jiang y T. J. Downar, «A Hybrid ANM/NEM Interface Current Technique for th Nonlinear Nodal Calculation,» *Proc. ANS Conf. Math. Comp., Saratoga, NY*, 1997.
- [29] P. J. Turinsky, «NESTLE: A Few-Group Neutron Diffusion Equation Solver Utilizing,» *EGG-NRE-11406*, 1994.
- [30] T. M. Sutton, «Wielandt Iteration as Applied to the Nodal Expansion Method,» *Nucl. Sci.*, 98, pp. 169-173, 1998.
- [31] R. A. Shober y A. F. Henry, «Nonlinear Methods for Solving the Diffusion Equation,» M.I.T. Report (MITNE-196), 1976.
- [32] R. A. Shober, «A Nodal Method for Solving Transient Few-Group Neutron Diffusion Equations,» ANL-78-51, Argonne National Laboratory, 1978.

- [33] W. Werner, H. Finneman y S. Langenbuch, «Two- and Three- Dimensional BWR Kinetics Problem,» *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 23, pp. 215-217, 1976.
- [34] H. Finnemann y M. Wagner, «A New Computational Technique for the Solution of Multidimensional Neutron Diffusion Problems,» de *International Meeting of Specialists on Methods of Neutron Transport Theory in Reactor Calculations*, Bologna, Italy, 1975.
- [35] A. F. Henry y R. N. Sims, «A Coarse Mesh Nodal Diffusion Method Based on Response Matrix Considerations,» Ph. D. Thesis, Department of Nuclear Engineering, M.I.T., Cambridge, 1977.
- [36] Smith K. S., «Nodal Method Storage Reduction By Non-Linear Iteration,» *Transactions of the American Nuclear Society*, 44., p. 265, 1983.
- [37] K. S. Smith, «QPANDA An Advanced Nodal Method for LWR Analyses,» *Transactions of American Nuclear Society*, p. 265, 1985.
- [38] K. R. Rempe y K. S. Smith, «Testing and Applications of the QPANDA Nodal Method,» *Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics*, p. 861, 1987.
- [39] K. Rempe, K. Smith y A. Henry, «SIMULATE-3 Pin Power Reconstruction: Methodol-,» de *Proc. Int. React. Phys. Conf.*, Jackson Hole, Wyoming, USA, 1988.
- [40] R. Boer y H. Finnemann, «Fast Analytical Flux Reconstruction Method for Nodal Space-,» *Annl. Nucl. Ener.*, 91, p. 123, 1985.
- [41] K. Koebke y M. Wagner, «The Determination of the Pin Power Distribution in a Reactor Core on the Basis of Nodal Coarse Mesh Calculations,» *Atomkernenergie*, 30, 2, p. 136, 1977.
- [42] Y. Liu, A. Meliksetain y A. Casadei, «Pin Power Prediction in the Westinghouse Advanced Nodal Code,» *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 53, p. 246, 1986.
- [43] J. F. Méndez-Castrillón, «Reconstruction of Three-Dimensional Flux Shapes from Nodal Solutions,» *Nuclear Engineering Thesis, Department of Nuclear Engineering, M.I.T.*, 1984.
- [44] K. R. Rempe, K. S. Smith y A. F. Henry, «SIMULATE-3 Pin Power Reconstruction: Methodology and Benchmarking,» de *Proc. of the International Reactor Physics Conference*, Jackson, WY, 1988.

-
- [45] K. Koebke y H. L. Hetzelt, «On the Reconstruction of Local Homogeneous Neutron Flux and Current Distributions of Light Water Reactors for Nodal Schemes,» *Nucl. Sci. Eng.*, 91, p. 123, 1985.
- [46] U. Rohde, S. Kliem, U. Grundmann, S. Baier, Y. Bilodid, S. Duerigen, E. Fridman, A. Gommlich, A. Grahn, L. Holt, Y. Kozmenkov y S. Mittag, «The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications,» *Progress in Nuclear Energy*, pp. 170-190, 2016.
- [47] P. J. Turinsky, R. M. K. Al-Chalabi, P. Engrand, H. N. Sarsour, F. X. Faure y W. Guo, «NESTLE 5.2.1: Few-group Neutron Diffusion Equation Solver Utilizing the Nodal Expansion Method for Eigenvalue, Adjoint, Fixed-Source Steady-State and Transient Problems,» Electric Power Research Center. North Carolina State University, Raleigh, NC, USA., 2003.
- [48] Hébert A., «Trivac: A Modular Diffusion Code for Fuel Management and Design Applications,» *Nuclear Journal of Canada*, pp. 325-331, 1987.
- [49] S. Langenbuch, «QUABOX/CUBBOX-HYCA, Ein dreidimensionales Kernmodell mit parallelen Kuhlkanalen für Leichtwasserreaktore,» GRS-A-926, 1984.
- [50] R. Miró, D. Ginestar, G. Verdú y D. Hennig, «A Nodal Modal Method for the Neutron Diffusion Equation. Application to BWR Instabilities Analysis,» *Ann. Nucl. Energy*, pp. 1171-1194, 2002.
- [51] R. Miró, Métodos Modales para el Estudio de Inestabilidades en Reactores Nucleares BWR, Valencia: Tesis Doctoral. Universidad Politècnica de València, 2002.
- [52] G. Verdu, D. Ginestar, V. Vidal y J. L. Muñoz-Cobo, «3D Lambda-Modes of the Neutron-Diffusion Equation,» *Annals of Nuclear Energy*, pp. pp. 405-421, 1994.
- [53] U.S. Nuclear Regulatory Commission, «NUREG-0800, NUREG-75/087 / Standard Review Plan for the Review of Safety Analysis Reports for Nuclear Power Plants. LWR Edition,» U.S. Nuclear Regulatory Commission, 2004.
- [54] W. G. Luscher, K. J. Geelhood y I. E. Porter, «Material Property Correlations: Comparisons between FRAPCON-3.5, FRAPTRAN-1.5, and MATPRO,» PNNL-19417 Rev.2, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA., 2015.
- [55] F. Garzarolli, D. Jorde, R. Manzel y P. G. Smerd, «Review of PWR Fuel Rod Waterside Corrosion Behavior,» EPRI NP-2789, Project 1250 Final Report, Electric Power Research Institute, Palo Alto, CA., 1982.

- [56] K. J. Geelhood, W. G. Luscher y C. E. Beyer, «FRAPCON-3.4: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup,» NUREG/CR-7022, Volume 1, 2011.
- [57] K. J. Geelhood, W. G. Luscher, C. E. Beyer y J. M. Cuta, «FRAPTRAN 1.4: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods,» NUREG/CR-7023, Volume 1, 2011.
- [58] M. Kramman. y H. Freeburn, «SCORE--The EPRI Steady-State Core Reload Evaluator Code: General Description,» EPRI NP-5100, EPRI, Palo Alto, California, 1987.
- [59] Y. Rashid, R. O. Montgomery y A. J. Zangari, «FREY-01: Fuel Rod Evaluation System, Vol. 1: Theoretical and Numerical Bases, Revision 3, Final Report,» EPRI NP-3277, EPRI, Palo Alto, CA, 1994.
- [60] J. D. Hales, S. R. Novascone, G. Pastore, D. M. Perez, B. W. Spencer y R. L. Williamson, «BISON Theory Manual. The Equations Behind Nuclear Fuel Analysis,» INL/EXT-13-29930 Rev.3, Idaho National Laboratory, 2016.
- [61] B. Wirth, C. Stanek, B. Kendrick, R. Montgomery, R. Williamson, J. Holes, D. Gasten y R. Martineau, «High Fidelity Fuel Performance Model Development,» CASL-U-2012-0054-000, Consortium for Advanced Simulation of LWRs, 2012.
- [62] S. Balay, J. Brown, K. Buschelman, D. G. William, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, B. F. Smith y H. Zhang, «PETSc Web page,» 2011. [En línea]. Available: <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [63] S. Balay, J. Brown, K. Buschelman, D. G. William, D. Kaushik, M. G. Knepley, L. C. McInnes, B. F. Smith y H. Zhang, «PETSc Users manual,» ANL-95/11 - Revision 3.3, Argon National Laboratory, 2012.
- [64] S. Balay, D. G. William, D. Kaushik, L. C. McInnes y B. F. Smith, Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries, E. Arge and A. M. Bruaset and H. P Langtangen, 1997.
- [65] Y. Saad, «SPARSKIT - A basic tool-kit for sparse matrix computations (Version 2),» 2009. [En línea]. Available: <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT>.
- [66] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd Edition, Society for Industrial and Applied Mathematics., 2003.
- [67] C. Armour-Brown, C. Borntreager, T. Hughes y P. Jovanovic, «Valgrind,» 2016. [En línea]. Available: valgrind.org.

-
- [68] U.S. Nuclear Regulatory Commission, «NUREG/CR-6742-Phenomenon Identification and Ranking Tables (PIRTs) for Rod Ejection Accidents in Pressurized Water Reactors Containing High Burnup Fuel,» U.S. Nuclear Regulatory Commission, Laboratory, Los Alamos National, 2001.
- [69] F. López-Cerón, *Conversion of Primary Side of PWR from RELAP5 to TRACE*, Chalmers University of Technology, Gothenburg: Department of Physics Division of Subatomic and Plasma Physics, 2016.
- [70] 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,» Tesis Doctoral, Universitat Politècnica de València, Valencia, 2004.
- [71] R. Miró, «Parameterization of nuclear cross-sections for coupled neutronic-thermalhydraulic codes,» de *PHYSOR-2006, ANS Topical Meeting on Reactor Physics*, Vancouver, BC, Canada., 2006.
- [72] A. Abarca, R. Miró, G. J. Vedú y J. A. Bermejo, «Analysis of Thermal-hydraulic Fluctuations in Trillo NPP with CTF/PARCS v. 2.7 Coupled Code,» *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science*, 2016.
- [73] H. Tochihara, E. Ochiai y T. Hasegawa, «Re-evaluation of spatial weighting factors for EX-CORE neutron detectors,» *Nuclear Technology*, pp. 310-317, 1982.
- [74] R. Miró, T. Barrachina, A. Abarca y G. Verdú, «Implementation of control rod movement and boron injection options by using control variables in RELAP5 / PARCSv2.7 coupled code,» *Progress in Nuclear Energy*, pp. 53, pp. 1084 - 1090, 2011.
- [75] A. Abarca, T. Barrachina, R. Miró, G. J. Verdú y C. Pereira, «Boron injection transient analysis with RELAP5/PARCS v2.7 coupled code,» de *8th International Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-8)*, Shangai, China, 2010.
- [76] J. Solis, K. Ivanov, B. Sarikaya, A. Olson y K. W. Hunt, «Boiling Water Reactor Turbine Trip (TT) Benchmark - Volume I, Benchmark Specification,» NEA/NSC/DOC, 2001.
- [77] B. Akdeniz, K. N. Ivanov y A. M. Olson, «Boiling Water Reactor Turbine Trip (TT) Benchmark - Volume IV: Summary Results of Exercise 3,» OECD/NEA/NSC/DOC(2010)1, ISBN 978-92-64-99137-8, 2010.
- [78] N. H. Larsen, «Core Design and Operating Data for Cycles 1 and 2 of Peach Bottom 2,» EPRI NP-563, June 1978.

- [79] L. A. Niemi y R. O. Carmichael, «Transient and Stability Tests at Peach Bottom Atomic Power Station Unit 2 at End of Cycle 2,» EPRI NP-564, June 1978.
- [80] R. Miró, A. Jambrina, C. Mesado, T. Barrachina y G. Verdú, «NUREG/IA-0461, TRAC-BF1 to TRACE Model Semi-Automatic Conversion. PBTT Example,» U.S. Nuclear Regulatory Commission, 2015.
- [81] C. Mesado, «PBTT model from TRAC-BF1 to TRACE conversion.,» de *The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal - Hydraulics, NURETH-15*, Pisa, Italy, 2013.
- [82] R. Miro, A. Jambrina, C. Mesado, T. Barrachina y G. Verdú, «NUREG/IA-0461 TRAC-BF1 to TRACE Model Semi-Automatic Conversion. PBTT Example,» Nuclear Regulatory Commission, 2016.
- [83] National Technology and Engineering Solutions of Sandia, LLC, «DAKOTA Explore and predict with confidence,» 2017. [En línea]. Available: <https://dakota.sandia.gov/>.
- [84] INSAG, *The Safe Management of Sources of Radiation: Principles and Strategies*, Austria: IAEA, 1999.