



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial

Estudio y desarrollo de un modelo termo-hidráulico de un
reactor nuclear PWR para verificación del código
FEMFFUSION

Trabajo Fin de Máster

Máster Universitario en Ingeniería Industrial

AUTOR/A: Bueno Fillon, Luis

Tutor/a: Vidal Ferràndiz, Antoni

Cotutor/a: Verdú Martín, Gumersindo Jesús

CURSO ACADÉMICO: 2022/2023

RESUMEN

Para garantizar la seguridad de un reactor nuclear es crucial la posibilidad de realizar simulaciones con modelos que se asemejen a la realidad. El estudio de accidentes, la propuesta de mejoras para la planta y otros casos deben ser estudiados con modelos, ya que la realización en planta sin un previo estudio puede poner en riesgo su seguridad. Numerosos centros de investigación proponen casos de estudio de reactores ya resueltos con modelos fiables para que se pueda verificar la validez de otros métodos de cálculo. Para ello se propone un reactor nuclear PWR con datos de partida, y se pide sacar el valor de variables características.

En este Trabajo de Fin de Máster se estudia el estado estacionario de un reactor 3D PWR (Pressure Water Reactor) siguiendo el *3D LWR Core Transient Benchmark (3DLWRCT)*.

En primer lugar, se resuelve las ecuaciones de transporte neutrónico mediante las ecuaciones de difusión y el código FEMFFUSION. El *benchmark* propone directrices para la resolución del problema como el uso de la teoría de dos grupos o los métodos de cálculo de ciertas variables. En segundo lugar, se acopla un modelo termo-hidráulico que permita modelizar la extracción del calor generado por el núcleo del reactor. Esta transferencia de calor se realiza con un intercambiador de calor de agua ligera entre el circuito primario y el secundario. Varias variables del modelo neutrónico, como las secciones eficaces, dependen de la temperatura del reactor, y esta última depende de la potencia del reactor. Luego es necesario el acoplamiento de estos dos modelos para poder llegar a la solución del problema estacionario. En el presente trabajo se realizará una comparación de los resultados obtenidos con otros modelos y códigos de diferentes centros de investigación.

Palabras clave: Reactor nuclear; Neutrónica; Modelo termohidráulico; Reactor de agua a presión;

RESUM

Per a garantir la seguretat d'un reactor nuclear és crucial la possibilitat de realitzar simulacions amb models que s'assemblen a la realitat. L'estudi d'accidents, la proposta de millores per a la planta i altres casos han de ser estudiats amb models, ja que la realització en planta sense un previ estudi pot posar en risc la seua seguretat. Nombrosos centres d'investigació proposen casos d'estudi de reactors ja resolts amb models fiables perquè es pugui verificar la validesa d'altres mètodes de càlcul. Per a això es proposa un reactor nuclear PWR amb dades de partida, i es demana traure el valor de variables característiques.

En aquest Treball de Fi de Màster s'estudia l'estat estacionari d'un reactor 3D PWR (*Pressure Water Reactor*) seguint el *3D LWR Core Transient Benchmark (3DLWRCT)*.

En primer lloc, es resol les equacions de transport neutrònic mitjançant les equacions de difusió i el codi *FEMFUSION*. El *benchmark* proposa directrius per a la resolució del problema com l'ús de la teoria de dos grups o els mètodes de càlcul d'unes certes variables. En segon lloc, s'acobla un model termo-hidràulic que permet modelitzar l'extracció de la calor generada pel nucli del reactor. Aquesta transferència de calor es realitza amb un bescanviador de calor d'aigua lleugera entre el circuit primari i el secundari. Diverses variables del model neutrònic, com les seccions eficaces, depenen de la temperatura del reactor, i aquesta última depèn de la potència del reactor. Després és necessari l'acoblament d'aquests dos models per a poder arribar a la solució del problema estacionari. En el present treball es realitzarà una comparació dels resultats obtinguts amb altres models i codis de diferents centres d'investigació.

Paraules clau: Reactor nuclear; Neutrónica; Model termohidráulico; Reactor d'aigua a pressió;

ABSTRACT

To guarantee the safety of a nuclear reactor, it is crucial to be able to carry out simulations with models that resemble reality. The study of accidents, the proposal of improvements for the plant and other cases must be studied with models, since the realization in plant without a previous study can jeopardize its safety. Numerous research centers propose case studies of reactors already solved with reliable models so that the validity of other calculation methods can be verified. For this purpose, a PWR nuclear reactor is proposed with starting data, and the value of characteristic variables is requested.

In this Master's Thesis, the steady state of a 3D PWR (Pressure Water Reactor) reactor is studied following the 3D LWR Core Transient Benchmark (3DLWRCT).

First, the neutron transport equations are solved using the diffusion equations and the FEMFUSION code. The benchmark proposes guidelines for solving the problem such as the use of the two-group theory or the methods of calculating certain variables. Secondly, a thermo-hydraulic model is coupled to model the extraction of the heat generated by the reactor core. This heat transfer is carried out with a light water heat exchanger between the primary and secondary circuits. Several variables of the neutron model, such as the effective cross sections, depend on the reactor temperature, and the latter depends on the reactor power. The coupling of these two models is then necessary in order to arrive at the solution of the stationary problem. In the present work a comparison of the results obtained with other models and codes from different research centers will be made.

Keywords: Nuclear reactor; Neutronics; Thermohydraulic model; Pressurized water reactor;

DOCUMENTOS CONTENIDOS EN EL TFM

- Memoria
- Presupuesto
- Anexos

ÍNDICE DE LA MEMORIA

1	Introducción	10
1.1	Motivación.....	10
1.2	Objetivos.....	11
2	Antecedentes	12
3	Descripción de central nuclear PWR	16
3.1	Descripción general de la instalación	16
3.2	Núcleo del reactor	18
3.3	Elementos de control de reactividad	20
4	Ecuaciones del transport neutrónico	22
4.1	Conceptos generales	22
4.2	Secciones eficaces	23
4.3	Moderador.....	24
4.4	Ecuación de la difusión	26
5	Funcionamiento programa FEMFFUSION	32
6	Modelo inicial propuesto por el Benchmark NEACRP.....	34
6.1	Geometría y materiales iniciales	34
6.2	Barras de control	35
6.3	Distribución de materiales.....	37
6.4	Secciones eficaces	38
6.5	Grupos de energía y de desintegración.....	40
7	Modelo termo-hidráulico	42
7.1	Balance de entalpía en el volumen de control V1	45
7.2	Balance de masa en el volumen de control V2	51
7.3	Balance de energía en el volumen de control V2	51
7.4	Propiedades termodinámicas del agua	58
7.5	Condiciones iniciales y de contorno	60
8	Régimen estacionario.....	63
8.1	Ecuaciones del modelo estacionario	63
8.2	Diferencias finitas	64

8.3	Resolución del sistema	66
9	Resolución modelo neutrónico acoplado al termo-hidráulico	71
9.1	Método de Bisección	72
10	Resultados	74
10.1	Solución estacionaria del modelo termo-hidráulico para P=2775MW	74
10.2	Solución estacionaria del modelo termo-hidráulico para P=2775W	78
10.3	Solución estacionaria del modelo global para P=2775W	80
11	Conclusión y líneas futuras.....	82
12	Referencias	83

ÍNDICE DEL PRESUPUESTO

1	Introducción	86
2	Coste de mano de obra	86
3	Coste de Hardware	87
4	Coste de Software	87
5	Presupuesto global	87

ÍNDICE DE LOS ANEXOS

1	Relación del trabajo con los objetivos de desarrollo sostenible (ODS) de la agenda 2030 90	
---	--	--

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 - Producción de energía mundial según tipo de reactor nuclear en 2018 (International Atomic Energy Agency [IAEA], 2021)	13
Figura 2.2 - Energía generada por país en 2021 (Khttab, K., 2021)	13
Figura 2.3 - Emisiones acumuladas de CO2 evitadas en el mundo gracias a la energía nuclear (International Energy Agency [IEA], 2018).....	14
Figura 2.4 - Producción de energía mundial en 2018 por tipo de energía verde (IEA, 2018)	14
Figura 2.5 - Cobertura peninsular de la demanda en 2021 (Red Eléctrica de España [REE], 2013)	15
Figura 3.1 - Esquema de una central nuclear de tipo PWR (Nuclear Regulatory Commission [NRC], 2017)	17
Figura 3.2 - Esquema de un elemento combustible (Jang, M y otros, 2016)	18
Figura 3.3 - Esquema de un elemento combustible (Magan y otros, 2011)	19
Figura 3.4 - Esquema del proceso de fabricación de un pellet (www.world-nuclear.org).....	19
Figura 3.5 - Esquema de las barras de control en un reactor (www.world-nuclear.org).....	21
Figura 4.1 - Esquema reacción nuclear en cadena (LAMARSH, y otros, 2001).....	22
Figura 4.2 - Esquema de un flujo neutrónico (LAMARSH, y otros, 2001)	23
Figura 6.1 - Esquema de posición de barras de control en el reactor (NEARCP).....	36
Figura 6.2 - Composición del plano radial 1 (tapa inferior) a la izquierda y el plano radial 18 (tapa superior) a la derecha.	37
Figura 6.3 - Composición del plano radial 2 (izquierda) y de los planos radiales 3-17 (derecha). (Carreño Sánchez, 2020)	38
Figura 7.1 - Esquema de sección transversal del flujo de agua para una varilla	43
Figura 7.2 - Esquema del modelo propuesto.....	44
Figura 7.3 - Esquema de los volúmenes de control del modelo.....	44
Figura 7.4 - Esquema de coordenadas cilíndricas.....	47
Figura 7.5 - Densidad del dióxido de uranio en función de la temperatura.....	49
Figura 7.6 - Densidad del He-4 en función de la temperatura a 10 y 20 bares	50
Figura 7.7 - Esquema de las superficies del modelo	53
Figura 7.8 - Esquema de la sección transversal para el cálculo número de Nusselt	55
Figura 7.9 - Número de Reynolds en función de la temperatura del agua	57
Figura 7.10 - Número de Prandtl en función de la temperatura del agua	57
Figura 7.11 - Coeficiente de convección del agua en función de la temperatura	58
Figura 7.12 - Entalpía del agua en función de la temperatura a 155bar	59
Figura 7.13 - Densidad del agua en función de la temperatura a 155bar	60
Figura 8.1 - Esquema del algoritmo de resolución del sistema	70

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2.1 - Centrales nuclear activas en España en 2022 (Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, 2022)	15
Tabla 4.1 - Potencia de moderación y razones de moderación de algunos materiales	25
Tabla 4.2 - Esquema de la longitud extrapolada (LAMARSH, y otros, 2001)	27
Tabla 4.3 - Tabla de grupos de energía de neutrones (www.nuclear-power.com).....	30
Tabla 5.1 - Parámetros de entrada para el archivo '.prm' (Vidal-Ferrándiz y otros, 2021)	32
Tabla 6.1 - Capas a lo largo del reactor.....	34
Tabla 6.2 - Tipos de materiales del reactor	35
Tabla 6.3 - Secciones eficaces en condiciones de referencia	39
Tabla 6.4 - Variación de secciones eficaces de material de sistema de control.....	39
Tabla 6.5 - Valores de variables de referencia.....	40

Tabla 6.6 - Grupos de energía	41
Tabla 6.7 -Constantes de desintegración.....	41
Tabla 7.1 - Datos geométricos del modelo	43

MEMORIA

1 Introducción

1.1 Motivación

Las fuentes no renovables son líderes mundiales en la producción de energía en el mundo. Sin embargo, esto presenta varios problemas, ya que los combustibles fósiles se encarecen con el tiempo mientras que las emisiones de CO₂ no cesan de aumentar. Las energías renovables desempeñan un papel fundamental en la solución para un desarrollo sostenible. Este tipo de fuentes de energía se basan en fuentes inagotables y tienen emisiones de CO₂ reducidas. Cabe destacar que la emisión de carbón no es totalmente nula para las energías renovables ya que se ha de tener en cuenta el ciclo completo de vida de la instalación.

Desde la primera central nuclear conectada a red en la Unión Soviética en 1954 la energía nuclear ha conseguido desmarcarse y ha conseguido ser la cuarta fuente de energía mundial que más produce en 2021. La energía nuclear permite la producción de una gran cantidad de energía comparado con las energías renovables y además no depende totalmente de las condiciones meteorológicas del entorno. Las desventajas de esta fuente de energía es la seguridad ya que se puede dar el caso de accidentes muy graves para la población cercana. Es por tanto fundamental invertir en este tipo de energía para conseguir un mix energético autosuficiente, seguro y libre de emisiones de carbón. Entre otras razones personales, los motivos principales de realizar el Trabajo de Fin de Máster sobre la energía nuclear son los siguientes:

- La energía nuclear es libre de emisiones de CO₂ (sin contar el ciclo de vida de la instalación entera y el proceso de construcción).
- La energía nuclear permite de producir grandes cantidades de energía barata.
- La disponibilidad de esta fuente de energía es muy grande al no depender de condiciones externas. En España se trata de la tecnología que tiene más horas productivas anuales.
- Muchos países trabajan en este tipo de energía y es una tecnología que no cesa de avanzar y de volverse una fuente de energía más eficiente y segura. Países como Francia o Suecia dependen mayoritariamente del nuclear, lo cual muestra que es una opción válida.

1.2 Objetivos

Para que la energía nuclear pueda ser una fuente eficiente y segura en el mix energético mundial es fundamental que se lleven a cabo trabajos de investigación y desarrollo. Sin embargo, muchas ideas de mejora de una central tienen que poder verificarse sin realizarlas en una instalación real. Como se ha visto en algunos accidentes nucleares como en Chernóbil en 1986, el intento en directo de mejorar la eficiencia de la central puede causar terribles accidentes. Para ello se requieren simulaciones que se asemejen lo mejor posible a la realidad.

Muchos centros de investigación proponen casos de estudio de reactores nucleares, de los cuales se conoce el comportamiento real, para poder probar y verificar los programas de simulación desarrollados.

En este Trabajo de Fin de Máster se estudia el comportamiento de un reactor PWR (*Pressure Water Reactor*) en tres dimensiones siguiendo el *3D LWR Core Transient Benchmark (3DLWRCT)*. Este último es el *benchmark* propuesto para comprobar códigos que permitan describir el comportamiento de la central según varios casos propuestos.

Se pretende poder encontrar el estado estacionario del reactor propuesto por el *benchmark*. Se tienen que plantear las ecuaciones que puedan formar un modelo que describa el reactor.

En particular se requiere un modelo neutrónico acoplado a un modelo termo-hidráulico para poder resolver las ecuaciones

En primer lugar, se plantea el modelo neutrónico a partir del programa *FEMFUSSION (Vidal, 2019)*. Este programa permite conseguir los flujos neutrónicos en el reactor a partir de ciertos datos como las secciones eficaces. Estas últimas dependen de las condiciones termo-hidráulicas del reactor, por lo que se requiere complementar este modelo con un modelo termo-hidráulico. En segundo lugar, se propone el modelo que describe el enfriamiento del núcleo del reactor por el refrigerante del sistema.

Mediante la elaboración de este proyecto se pretenden cumplir los siguientes objetivos:

- Obtención de la distribución radial de la temperatura del núcleo del reactor y la distribución axial de la temperatura y velocidad del refrigerante del sistema a partir del modelo termo-hidráulico.
- Obtención de la concentración de boro crítica para el estacionario del caso A1 con un error relativo menor a 5%.
- Obtención de la distribución del flujo neutrónico rápido y flujo neutrónico térmico para el caso A1 estacionario del *benchmark* a partir del programa *FEMFUSSION* y el modelo termo-hidráulico.

2 Antecedentes

El siglo XX fue sin duda alguna un siglo de revolución científica, en particular en el mundo de la física. El trabajo de numerosos físicos e ingenieros dieron lugar al nacimiento de la energía nuclear. Desde la primera reacción en cadena de neutrones realizada en el CP-1 por Enrico Fermi en diciembre de 1942, la tecnología nuclear no ha cesado de crecer hasta llegar a ser la cuarta fuente de energía mundial en 2021.

2.1.1 Tipos de reactores nucleares

Una central nuclear térmica es una instalación que permite generar energía a partir de combustible nuclear. Este último se hace fisionar produciendo calor que permite completar un ciclo termodinámico. Sin embargo, existen varios tipos de reactores presentados a continuación:

- **Boiling Water Reactor (BWR):** Se trata de un reactor en el que el refrigerante y moderador es agua ligera. El combustible usado es U-235. El agua atraviesa desde la parte inferior de la vasija del reactor en dirección axial y se calienta llegando a convertirse en vapor en cierto punto. Las barras de control se introducen desde la parte inferior del reactor para poder actuar en la parte líquida del agua.
- **Pressurized Water Reactor (PWR):** Al igual que los reactores BWR el refrigerante y moderador es agua ligera. Sin embargo, se sube considerablemente la presión del agua (suele ser a 155 bar) para que el agua nunca llegue al estado de vapor. Esto simplifica mucho la instalación ya que no se tiene que tratar con fluidos bifásicos. Las barras de control se introducen esta vez desde la parte superior de la vasija.
- **Light Water Graphite Moderated Reactor (LWGR):** A diferencia de los dos reactores mencionados anteriormente, se usa grafito como moderador y agua ligera como refrigerante. Aunque el material sea barato, este es inflamable y su calidad como moderador es baja.
- **Gas Cooled Reactor (GCR):** En este caso el moderador sigue siendo grafito mientras que el refrigerante es CO₂ en forma gaseosa. Este refrigerante permite temperaturas de salida más elevadas que con el agua, sin embargo la calidad de la transferencia es pobre y se requieren elevadas presiones para su funcionamiento.
- **Pressurized Heavy Water Reactor (PHWR):** Este reactor tiene la particularidad de usar agua pesada como refrigerante. A diferencia de los reactores mencionados anteriormente, el refrigerante pasa por unos tubos horizontales para refrigerar el núcleo del reactor y las barras de control se introducen horizontalmente.
- **Fast Breeder Reactor (FBR):** No tiene moderador ya que hay únicamente neutrones rápidos y el refrigerante es sodio líquido. Este reactor se caracteriza por su capacidad a generar más material fisible que el que consume.

Estos son los tipos de reactores más utilizados en el mundo. Sin embargo, un reactor destaca entre el resto: el reactor PWR. Como se observa en la figura 1.1, la gran mayoría de las centrales en funcionamiento son de tipo PWR (302 centrales en el mundo) seguido de las centrales de tipo BRW (63 centrales).

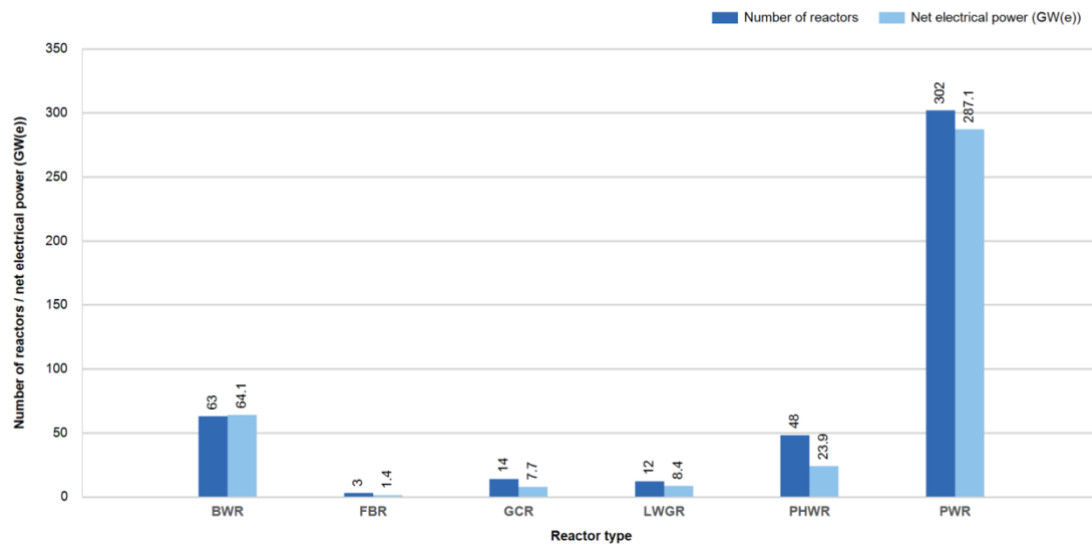


Figura 2.1 - Producción de energía mundial según tipo de reactor nuclear en 2018 (Internacional Atomic Energy Agency [IAEA], 2021)

Hoy en día se tiene varias direcciones de investigación como los pequeños reactores nucleares (SMR) para poder descentralizar la generación de energía. Además cabe destacar el desarrollo de los reactores de IV generación que presentan mejores en cuanto a seguridad, eficiencia y sostenibilidad.

2.1.2 Marco internacional

La generación de energía a partir de centrales nucleares es una tecnología que ha evolucionado a lo largo de los años y ha acabado expandiéndose por el mundo entero. Entorno a 10% de la generación de energía mundial se hace a partir de centrales nucleares. Muchos países han enfocado su desarrollo energético alrededor del sector nuclear. Como se observa en la figura 2.2, Francia es el país más dependiente de la tecnología nuclear con 71% de la energía proveniente este sector y España se encuentra a 22% ocupando el puesto 14.

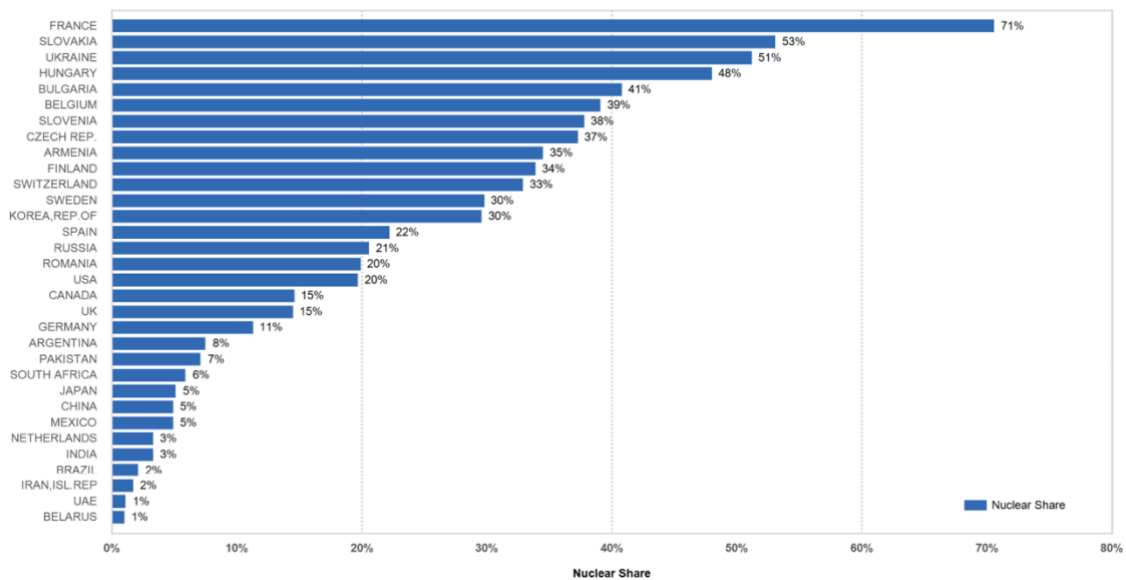
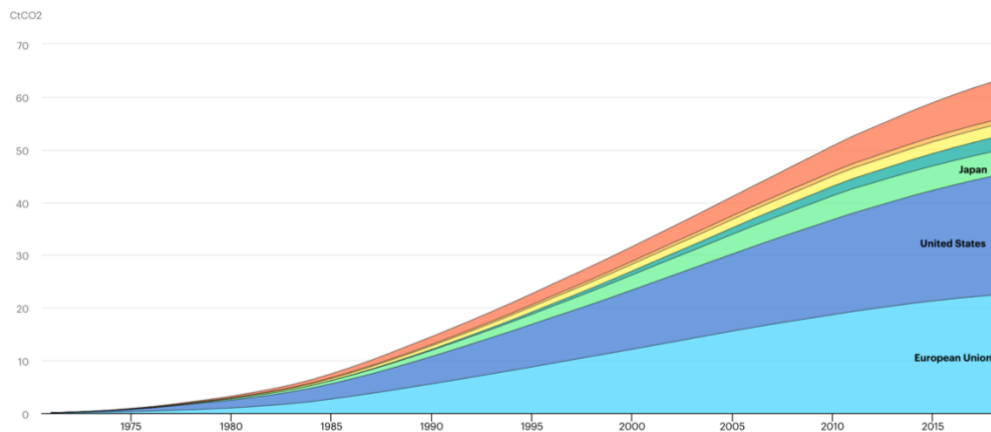


Figura 2.2 - Energía generada por país en 2021 (Khttab, K., 2021)

Cada vez más países adquieren esta tecnología, lo que permite tener energía barata y sin emisiones de CO₂. En la figura 2.3 se muestra las emisiones acumuladas de CO₂ evitadas gracias a centrales nucleares desde 1971 hasta 2018. Se observa que las reducciones de emisiones no cesan de crecer ya que se han ido construyendo muchas centrales a lo largo de estos años, reemplazando así centrales térmicas de combustible fósil. Además, Estados Unidos y Europa desempeñan un papel importante en la transición ecológica con la tecnología nuclear, lo cuál se puede observar en la figura 2.3, ya que son los que más han ahorrado en emisiones de CO₂. Estos se desmarcan de los demás llegando a alrededor de 45CtCO₂ evitados en 2018.



IEA. All Rights Reserved

Figura 2.3 - Emisiones acumuladas de CO₂ evitadas en el mundo gracias a la energía nuclear (International Energy Agency [IEA], 2018)

Por último cabe destacar la importancia de la energía nuclear dentro las energías renovables. Se trata de una energía disponible a todas horas que permite llegar a producciones de energía elevadas a precio bajo. En la figura 2.4 se observa que se trata de la segundo mayor fuente de producción sin emisiones en todo el mundo por debajo de la hidráulica. La producción de energía nuclear es superior a la suma de todas las renovable sin contar la hidráulica. Se trata de una tecnología que no cesa de mejorar y permite una solución viable para la generación sostenible y eco-responsable.

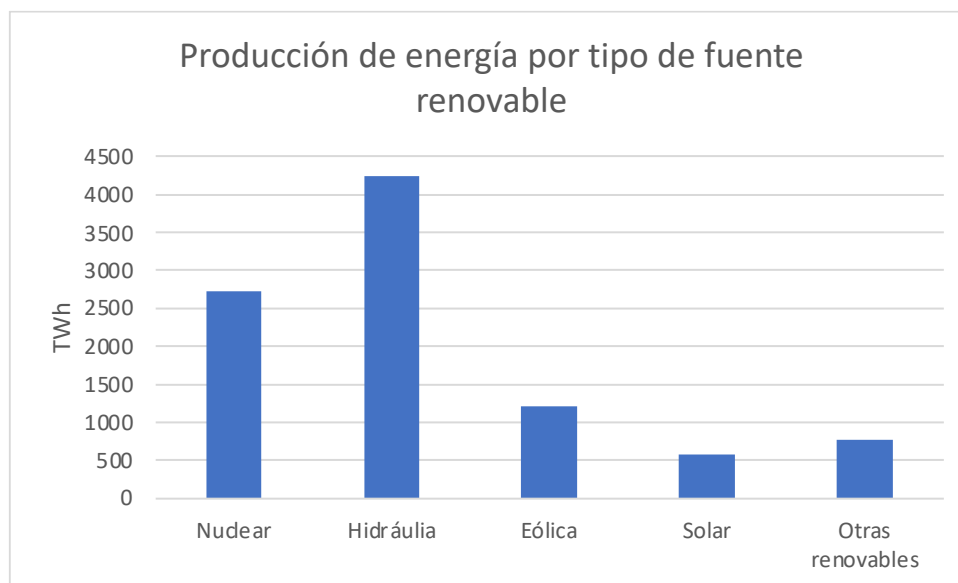


Figura 2.4 - Producción de energía mundial en 2018 por tipo de energía verde (IEA, 2018)

2.1.3 Marco nacional

Se tienen 437 instalaciones nucleares activas en el mundo, 180 en Europa 5 en España. De las 5 centrales, dos de ellas (Almaraz y Ascó) tienen dos reactores, luego se pueden contar 7 reactores en total. En la tabla 2.1 se muestra la lista de las centrales nucleares españolas en funcionamiento. Se observa que todos los reactores son PWR menos la central de Cofrentes que es un BWR. A parte de estas centrales, se tienen dos reactores en desmantelamiento (José Cabera y Vandellós I) y la central nuclear de Santa María de Garoña cerrada definitivamente.

REACTOR	POTENCIA ELÉCTRICA (MW)	TIPO	AÑO INICIO EXPLOTACIÓN COMERCIAL
Almaraz I	1,049.40	P.W.R.	1983
Almaraz II	1,044.50	P.W.R.	1984
Ascó I	1,032.50	P.W.R.	1984
Ascó II	1,027.21	P.W.R.	1986
Cofrentes	1,092.02	B.W.R.	1985
Vandellós II	1,087.14	P.W.R.	1988
Trillo	1,066.00	P.W.R.	1988
TOTAL	7398.77	P.W.R.	1988

Tabla 2.1 - Centrales nuclear activas en España en 2022 (Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, 2022)

Contando la potencia instalada en 2021, la energía nuclear representa únicamente 6.6% de los tipos de energía en 2021. Sin embargo, en la figura se puede observar que en 2021 21.8% de la cobertura peninsular de la demanda proviene de instalaciones nucleares. Las 5 centrales nucleares españolas son la segunda fuente de energía más importante en el país por detrás de la eólica en cuanto a cobertura.

Se muestra entonces la seguridad que proporciona la central nuclear, al no depender de fuentes intermitentes y variables de un año a otro. Bien que la potencia instalada no sea tan elevada, la producción no depende de las condiciones climáticas ni de la hora del día.

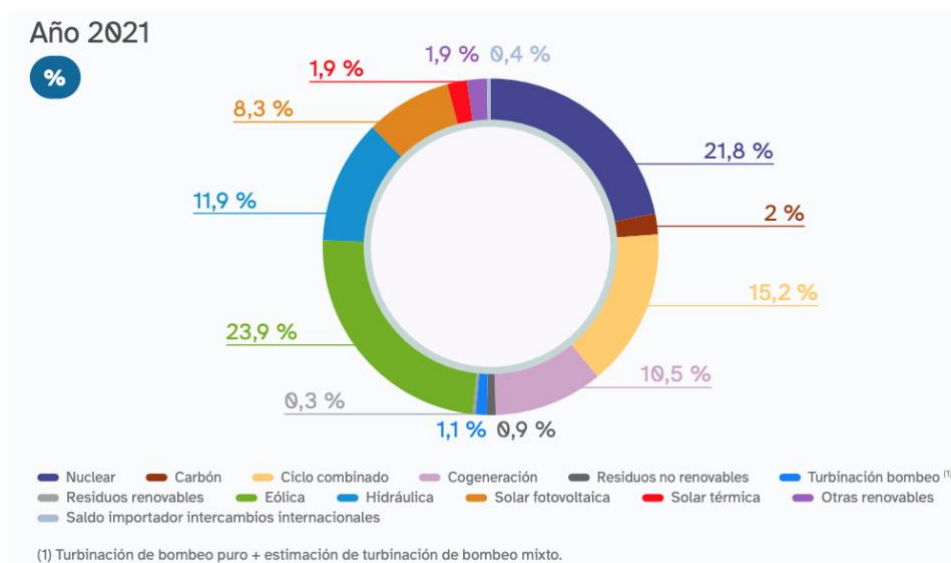


Figura 2.5 - Cobertura peninsular de la demanda en 2021 (Red Eléctrica de España [REE], 2013)

3 Descripción de central nuclear PWR

3.1 Descripción general de la instalación

En este trabajo de Fin de Máster se estudia un reactor PWR, el reactor más usado tanto nivel nacional como mundial. Una central nuclear de este tipo tiene distintos componentes para formar un ciclo termodinámico tal y como se presenta en la imagen 3.1. El ciclo termodinámico se realiza con varios circuitos de refrigerante: el primario y el secundario.

El circuito primario tiene principalmente tres elementos: el reactor, el presionador, el generador de vapor y la bomba de recirculación. Este circuito contiene agua ligera que pasa directamente por el reactor, por lo que está altamente contaminada y no puede tener contacto con el exterior. Se puede dividir el circuito en dos partes: la rama fría que se encuentra entre la salida generador de vapor y la entrada reactor, y la rama caliente que se encuentra entre la salida del reactor y la entrada del generador de vapor. Se trata de un circuito cerrado. Los elementos del circuito primario son los siguientes:

- El reactor nuclear es donde se produce la fisión y la generación de calor. Este calor se transmite al refrigerante del sistema, calentándolo a cierta temperatura. Esto se produce siempre con el agua en estado líquido, ya que la presión del agua es suficientemente alta como para que el agua no entre en estado de vapor. Es una de las características principales del PWR, el agua está entorno a 155 bar para asegurar un caudal monofásico en funcionamiento normal de la planta.
- El presionador del sistema se encuentra entre la salida del reactor y la entrada al intercambiador y permite mantener la presión deseada en el circuito primario. Constituye un punto donde el agua está saturada y permite por tanto mantener la presión. En condiciones normales de funcionamiento se tiene 60% de líquido y 40% de vapor en el presionador. En caso de alcanzar presiones superiores a la de diseño por sobrecalentamiento y evaporación del agua, el presionador consta de una válvula de alivio para liberar el exceso de vapor. Existe tanto un sistema de control de nivel como de presión.
- El generador de vapor es un intercambiador entre el circuito primario y secundario permite calentar el agua del circuito secundario enfriando a su vez el circuito primario. Este elemento se puede dividir en dos partes, el intercambiador de calor y el separador de vapor. Generalmente el agua del circuito primario pasa por tubos en U calentando así el agua del circuito secundario. El vapor de agua producido pasa a través de unos separadores de humedad y un secador antes de ser utilizado en el circuito secundario.
- Finalmente, la bomba de recirculación permite compensar las pérdidas de carga por fricción y por gravedad que sufre el refrigerante al pasar por el reactor y el resto del sistema. Estas bombas se ubican en la rama fría del sistema y suelen ser centrífugas de una sola etapa de tipo vertical. Cabe destacar que en general las centrales PWR tiene varios lazos de refrigeración para el circuito primario y que cada uno de los lazos tiene su propia bomba.

Por otro lado, el circuito secundario representa el ciclo termodinámico similar al de una central térmica. Este circuito puede ser igualmente de agua, pero a una presión mucho menor ya que se quiere evaporar el agua de este circuito. Como se observa en la figura 3.1, el agua pasa por el generador de vapor para convertirse en vapor de agua y así pasar por el sistema de turbinas.

Después el vapor de baja presión pasa por el condensador para producir agua líquida de baja presión. Esta última se recircula con una bomba antes de llegar al generador de vapor. Al igual que el circuito primario, se trata de un circuito cerrado.

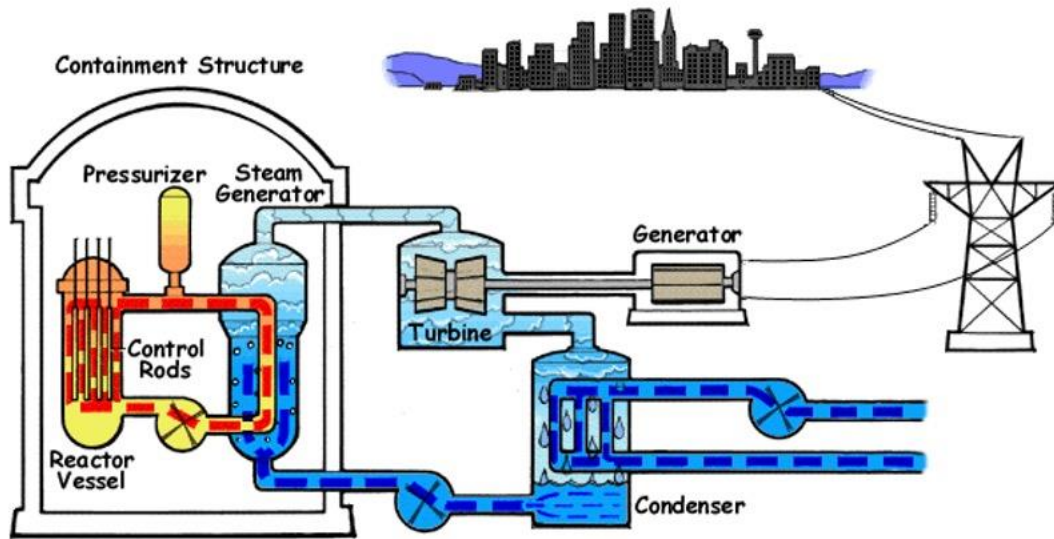


Figura 3.1 - Esquema de una central nuclear de tipo PWR (Nuclear Regulatory Commission [NRC], 2017)

Existen otros sistemas en la instalación que permiten asegurar la seguridad de la planta en caso de accidente LOCA (Loss Of Coolant Accident) llamados Sistemas de inyección de Seguridad (ECCS). Un accidente de tipo LOCA ocurre cuando se tiene pérdida de refrigerante en el sistema primario. Una pérdida de refrigerante provoca una pérdida de presión, con lo que el agua empieza a evaporar y el reactor se enfría cada vez menos. Si no se controla, esto puede llevar a fundir el núcleo del reactor y provocar un accidente nuclear de gran importancia.

Existen tres sistemas de inyección de seguridad principales:

- El sistema de inyección de alta presión (HPIS) es un sistema que permite inyectar agua a presión en la rama caliente del circuito primario. Este sistema es el primero en activarse y suele ser suficiente para cubrir roturas pequeñas que dan lugar a fugas de poco caudal de agua. El agua inyectada suele llevar ácido bórico disuelto para controlar la reactividad del sistema.
- El sistema de inyección por acumulador es el siguiente sistema en activarse en caso de que el HPIS no se haya podido activar o que la despresurización haya sido demasiado rápida para que el HPIS tenga efecto. En este caso se inyecta agua borada a presión desde unos acumuladores.
- Finalmente queda el sistema de inyección de baja presión (LPIS). Este sistema se activa en caso de gran rotura y permite inyectar agua a la rama fría del sistema. El agua inyectada va directamente al reactor para poder refrigerarlo hasta que se pueda solucionar la causa del accidente.

Por otro lado, la contención de una central nuclear es el recinto cimentado que sirve de blindaje para impedir la fuga de radiaciones o elementos radioactivos al exterior. El circuito primario y sus elementos se encuentran en dicho blindaje ya que tienen todos elementos radioactivos, incluyendo el mismo refrigerante.

En este Trabajo de Fin de Máster se pretende estudiar más en detalle el reactor. Este último está formado por una vasija que actúa como carcasa del núcleo del reactor. Además este vasija permite soportar la presión ejercida por el refrigerante y dentro se encuentran los elementos combustibles, elementos estructurales de soporte, las barras de control, el blindaje térmico y otros elementos.

3.2 Núcleo del reactor

El núcleo del reactor es donde se encuentra el combustible nuclear y por tanto dónde se genera el calor del reactor. El núcleo está formado de varios elementos combustibles (*fuel assembly*) como el de la figura 3.2

Cada elemento combustible es una unidad rígida y estructuralmente independiente del resto formada por varias varillas. En el caso de un reactor PWR, estas varillas suelen distribuirse formando un rectángulo de 17x17 varillas.

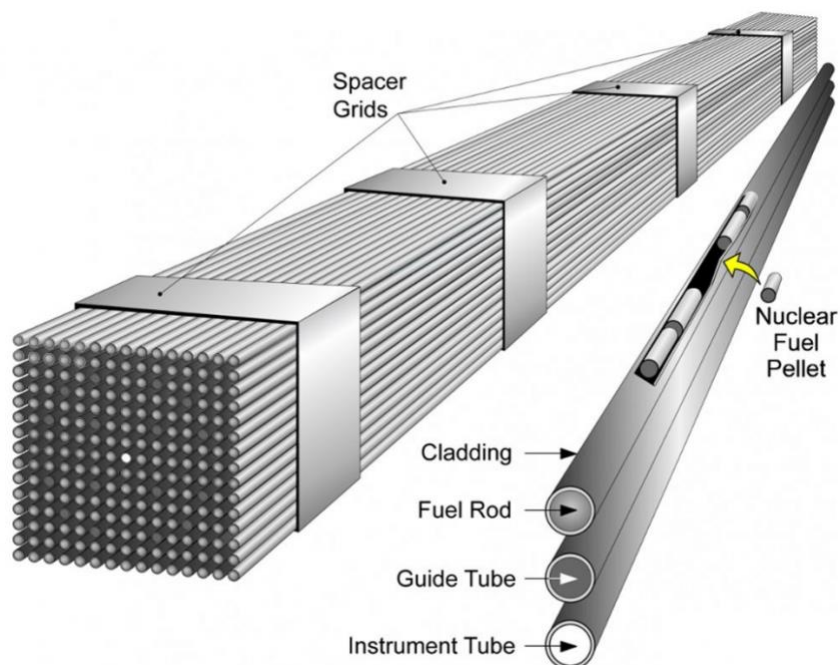


Figura 3.2 - Esquema de un elemento combustible (Jang, M y otros, 2016)

Como se muestra en la figura 3.3, no todas las varillas de un *fuel assembly* tienen la misma función. Los tipos de varilla se pueden clasificar en los siguientes grupos:

- Varillas de combustible
- Varillas de veneno combustible (BA: *Burnable Absorber Rod*)
- Barras de control
- Varillas de instrumentación

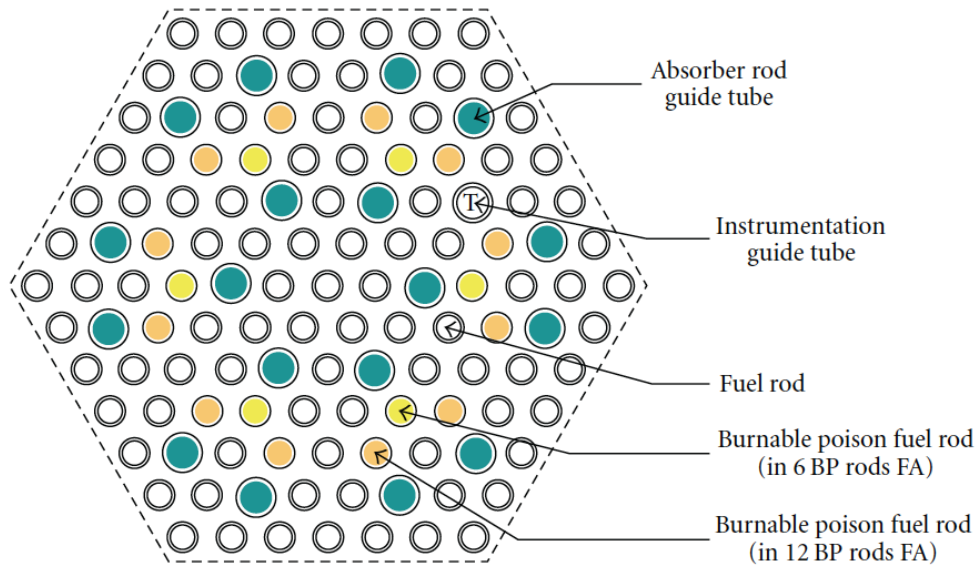


Figura 3.3 - Esquema de un elemento combustible (Magan y otros, 2011)

Las varillas de combustible están compuestas de una protección cilíndrica (*cladding*). El *cladding* es un cilindro hueco de cierto espesor que está hecho de materiales como aluminio, acero inoxidable o aleaciones de Circonio (Zirkaloy). Esta es la opción más usada en la industria nuclear.

La figura 3.2 muestra una varilla combustible y se puede observar que cada una de ellas contiene *pellets*. Estos últimos son cilindros de combustible nuclear prensado que suelen tener como dimensiones 1cm de altura y de diámetro. Se suelen agrupar 400 *pellets* por varilla combustible.

En el esquema 3.4 se muestra el proceso simplificado de fabricación de las pastillas de combustible de UO₂. En los reactores PWR se usa como combustible dióxido de uranio (UO₂). Sin embargo, se suele transportar como hexafluoruro de uranio UF₆ o trióxido de uranio en estado gaseoso en función del enriquecimiento del U-235. Seguidamente se puede convertir este gas en dióxido de uranio en polvo con dos métodos: en seco o húmedo. A partir del UO₂ en polvo se crean las pastillas de cerámica de combustible (*pellets*). Para ello, en un primer paso, se homogeniza la pastilla para asegurar las dimensiones y superficies deseadas. En segundo lugar, se añaden aditivos como el U₃O₄ para asegurar una buena microestructura y densidad del material. En esta etapa se añaden los venenos combustibles.

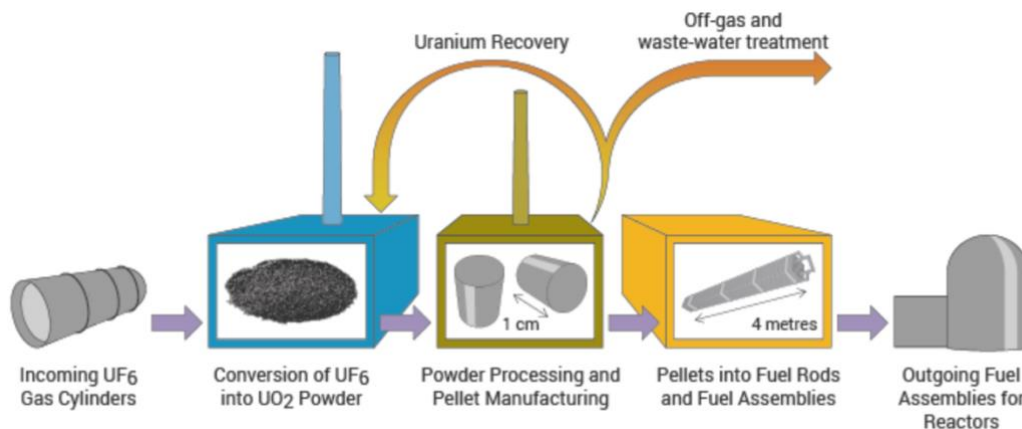


Figura 3.4 - Esquema del proceso de fabricación de un pellet (www.world-nuclear.org)

Cabe destacar que se suele dejar una capa de Helio-4 entre el *cladding* y los *pellets*. La presión del gas depende del tipo de reactor: para reactores BWR se tiene el Helio entre 3 a 10 bares y para reactor PWR entre 10 y 20 bares. La presencia del gas a presión permite ejercer presión al interior de la varilla de combustible evitando así que el *cladding* no tenga que soportar tanto esfuerzo por las presiones externas debidas al refrigerante (entorno a los 150 bares para los PWR).

Por otro lado, se puede tener algunas varillas de instrumentación en algunos *fuel assembly* para obtener información del reactor y poder realizar una monitorización continua del elemento combustible de la planta. La ubicación de los sensores y otros elementos de monitorización es de gran importancia para el buen control de la planta.

Finalmente existen varillas de veneno combustible y barras de control. Estos dos son elementos de control de reactividad del reactor.

3.3 Elementos de control de reactividad

El control de reactividad es un objetivo crucial para el diseño de una planta nuclear. Si no se controla, el reactor puede llegar a un estado supercrítico y llegar al quemado del núcleo si no se refrigera adecuadamente. Si el reactor es supercrítico, la reacción en cadena produce más neutrones de los que necesita para tener una población de neutrones constante. El número de neutrones crece de manera exponencial con el tiempo, lo que provoca una sobreproducción de fisiones que pueden elevar la temperatura del reactor fuertemente en un intervalo de tiempo reducido.

En las centrales PWR se suele tener una reactividad negativa formando un reactor subcrítico. Esto permite un mejor control de la central ya que en caso de que el reactor alcance una temperatura por encima de las condiciones de diseño, los márgenes de tiempos de maniobra de seguridad son más grandes.

Existen varias formas de controlar la reactividad del reactor, pero todas se basan en introducir en el reactor elementos que tengan una gran sección eficaz de absorción. Así estos elementos podrán absorber gran parte de la población neutrónica producida y así reducir la tasa de producción de neutrones en el reactor. Este control de reactividad se puede realizar a partir de tres métodos diferentes: barras de control, veneno combustible (*burnable absorber*) y veneno soluble en el refrigerante.

Como se ha mencionado anteriormente, los elementos de seguridad que inyectan refrigerante en caso de LOCA suelen usar agua borada. La idea es disolver ácido bórico en el agua, para que así el refrigerante también participe a la bajada de la reactividad del reactor.

Por otro lado, se tienen las barras de control que pasan por algunos de los elementos combustibles. En dichos elementos combustible se introduce un haz de barras cilíndricas conteniendo cada una un material absorbente. En general se usa una aleación Ag-In-Cd como material absorbente.

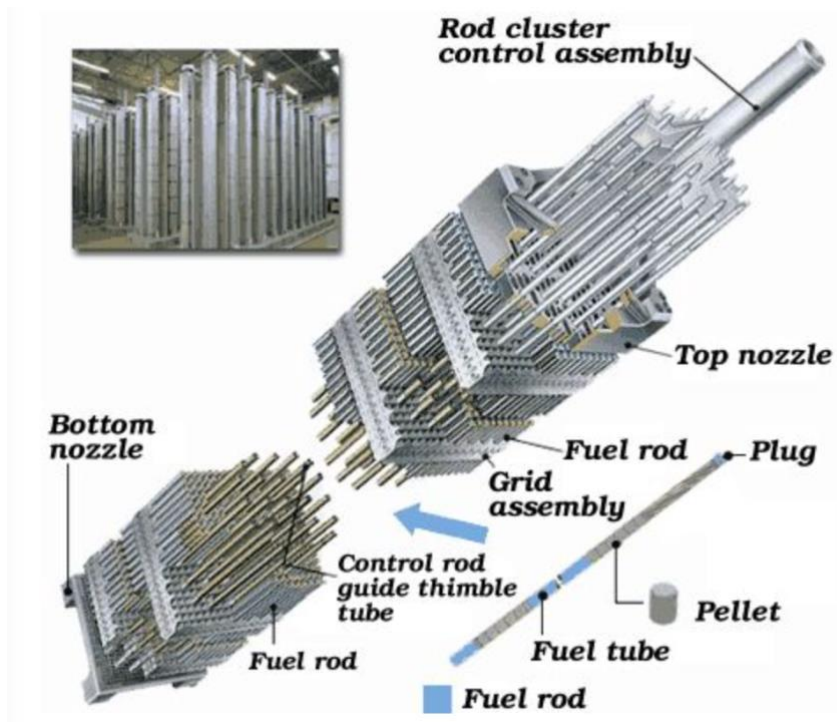


Figura 3.5 - Esquema de las barras de control en un reactor (www.world-nuclear.org)

Las barras de control se sitúan en la parte superior del núcleo y bajan por gravedad. En la figura 3.5 se puede observar en la parte superior el haz de barras de control que se introduce en el *fuel assembly*. En función del nivel de reactividad deseado se puede modificar la altura de estas varillas. En caso de accidente nuclear se realiza un *scram* que consiste en bajar completamente todas las barras de control para intentar bajar la reactividad al máximo y así disminuir la producción de calor.

Esto es posible ya que el reactor es PWR y el agua es monofásica. En caso de trabajar con un BWR, las barras de control se sitúan en la parte inferior y suben en función del grado de reactividad deseado, ya que arriba del reactor no hay agua líquida, vapor de agua.

Por último, se tiene el veneno combustible. En ciertas varillas de combustible se tienen *pellets* con los que se ha mezclado BA (*Burnable Absorber*) como aditivo. Estos elementos contienen en general Gd₂O₃ o boro. A diferencia de las barras de control, no se puede controlar la cantidad de material absorbente que se pone en el reactor. Este veneno combustible conseguir una reactividad más baja al inicio de la vida útil del combustible. Más adelante, este veneno combustible decae en nucleidos con una sección eficaces de absorción pequeña.

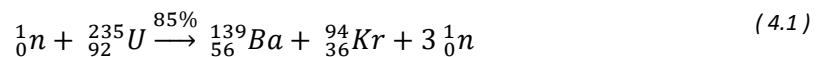
Esto es muy útil para las puestas en marcha de las centrales nucleares, ya que permite que la temperatura vaya aumentando sin un exceso de reactividad del reactor.

4 Ecuaciones del transport neutrónico

4.1 Conceptos generales

La producción de calor de un reactor nuclear se debe a la fisión de un elemento. La fisión es una reacción nuclear en la que un neutrón colisiona con un nucleido fisionable dividiéndolo en varios nucleidos. Este proceso es exotérmico y provoca la generación de otras partículas como neutrones y fotones. En el caso de usar UO₂ como combustible, el nucleido en cuestión es el isótopo U-235. Existen varios isotopos del Uranio que se pueden encontrar en la naturaleza, el más abundante es el U-238 (99.2742% de abundancia natural), sin embargo, este no es fisionable. Al diseñar el combustible nuclear el uranio suele estar enriquecido de U-235 ya que este es el isótopo que interesa para la reacción nuclear.

Cabe destacar que la fisión no es la única interacción nuclear posible. Estas reacciones tienen una probabilidad de ocurrencia. En el caso del U-235, se pueden dar dos casos dando lugar a dos reacciones.



La reacción 4.1 es una reacción de fisión, en la que el neutrón colisiona con el U235 para formar dos nucleidos (Bario y Kriptón) y tres neutrones y liberar calor al exterior. La reacción 4.2 es una interacción de absorción en la que el nucleido absorbe el neutrón y libera un fotón. Para que la fisión tenga lugar, el neutrón debe tener una energía cinética superior a la energía de unión del nucleido con el que va a colisionar.

En un reactor nuclear ocurre una reacción en cadena de fisiones. Como se observa en la reacción 4.1, cuando el U-235 fisiona, produce 3 neutrones que pueden a su vez colisionar con otros nucleidos y provocar fisiones. La figura 4.1 muestra un esquema de una reacción nuclear en cadena.

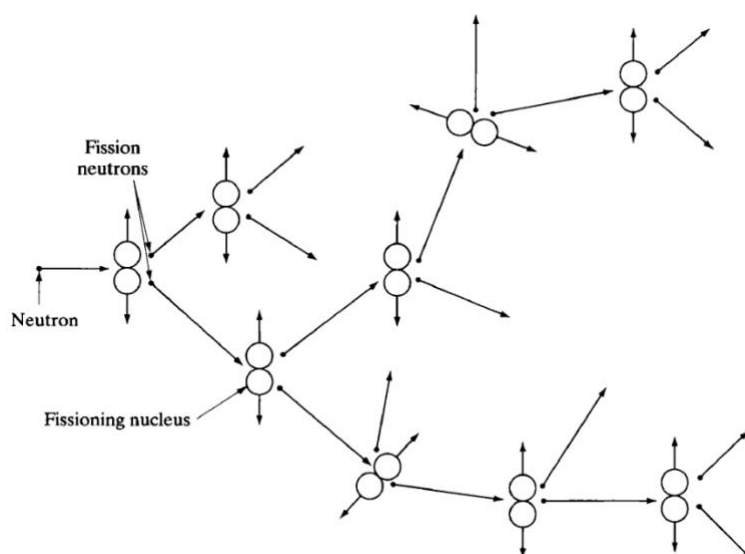


Figura 4.1 - Esquema reacción nuclear en cadena (LAMARSH, y otros, 2001)

4.2 Secciones eficaces

Como se ha mencionado anteriormente existen distintos tipos de interacciones entre los neutrones y la materia.

- La **dispersión elástica**. Esta interacción corresponde a la colisión elástica de un neutrón con un núcleo blanco. En este caso la energía cinética total se conserva y la máxima transferencia de energía cinética se obtiene cuando la colisión es frontal.
- La **dispersión inelástica**. En este caso, después de la colisión el núcleo sale en un estado excitado, por lo que la energía cinética no es la misma antes y después de la interacción. Este tipo de colisión solo puede ocurrir si el neutrón tiene una energía suficientemente grande, como mínimo superior a su primer estado excitado. La energía del primer estado excitado disminuye con el número atómico, por lo que los núcleos pesados tienen más probabilidad de tener una colisión inelástica.
- La captura o **absorción**. En esta interacción el núcleo absorbe el neutrón para así formar un isótopo distinto. Durante esta interacción el nuevo isótopo se desexcita por lo que emite un fotón.
- La **transmutación**. Esta interacción ocurre cuando un neutrón arranca un protón del núcleo con el que interactúa para formar un núcleo a su vez. Al perder un protón, el núcleo blanco se convierte en otro elemento.
- La **fisión** es la reacción más importante para el reactor nuclear. En este caso el neutrón incidente divide el núcleo blanco en varios núcleos producto y neutrones. Como se ha mencionado anteriormente, este proceso genera calor al exterior.

Para medir la probabilidad de ocurrencia de estas interacciones se definen las secciones eficaces. En el caso de tener una intensidad I de neutrones que incide con una superficie A , se tienen IA neutrones por segundo en total que inciden contra el blanco. Si el blanco es un volumen de área A y espesor X relleno con N núcleos por unidad de volumen, se tienen NAX núcleos en el volumen en total. Se observa que la cantidad que neutrones que colisionan con los núcleos de este volumen es proporcional a la cantidad de neutrones incidentes contra el blanco. El factor de proporcionalidad es la sección eficaz microscópica. Esto se puede resumir en la siguiente ecuación:

$$\text{colisiones/s} = \sigma INAX \quad (4.3)$$

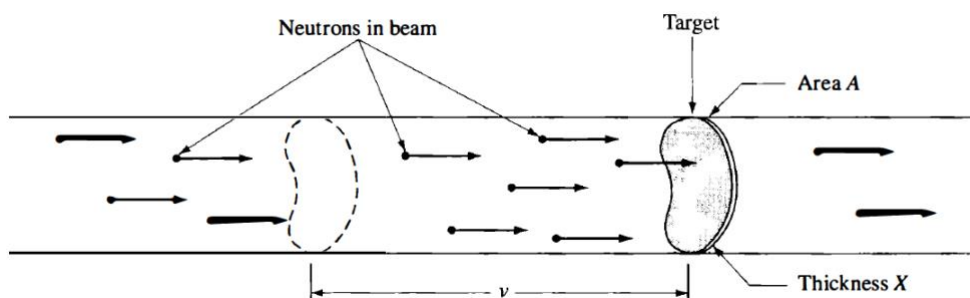


Figura 4.2 - Esquema de un flujo neutrónico (LAMARSH, y otros, 2001)

Se puede decir que σ es la superficie equivalente donde todos los neutrones incidentes colisionarían. La sección eficaz microscópica tiene unidades de superficie y se usa habitualmente el barn $b = 10^{-24} \text{cm}^2$.

A la hora de colisionar, pueden ocurrir cualesquiera de las interacciones mencionadas anteriormente, luego la sección eficaz total σ_T es la suma de las secciones eficaces de las interacciones posibles.

$$\sigma_T = \sigma_a + \sigma_d + \sigma_f + \sigma_{tr} \quad (4.4)$$

Donde σ_a es la sección eficaz de absorción, σ_d la sección eficaz de dispersión elástica e inelástica, σ_f la sección eficaz de fisión y σ_{tr} la sección eficaz de transmutación. A efectos prácticos es interesante definir la sección eficaz macroscópica $\Sigma = N\sigma$ en cm^{-1} . El número total de colisiones por segundo y unidad de volumen F es igual a:

$$F = \Sigma_T I \quad (4.5)$$

4.3 Moderador

El moderador de un reactor nuclear es el material por donde va a ocurrir la fisión y difusión de los neutrones. Existen dos características principales necesarias para un buen moderador:

- Alta capacidad de ralentizar los neutrones
- Baja capacidad de absorción de neutrones

En primer lugar, el moderador tiene que tener una buena capacidad para ralentizar los neutrones, es decir, tiene que haber muchas colisiones elásticas y pérdida de energía en cada choque para que el neutrón se ralentice.

Para el estudio de reactores nucleares es muy corriente usar el concepto de letargia en vez de energía. A la hora de colisionar elásticamente con un núcleo blanco, un neutrón tiene una energía inicial E y una energía menor después de choque E' . La energía máxima después de choque es la energía inicial del neutrón, ya que este no puede ganar energía con el choque. Por otro lado a energía mínima E'_{min} viene dada por:

$$E'_{min} = \alpha E \quad (4.6)$$

Siendo α el factor de colisión que depende únicamente del número atómico A del núcleo blanco.

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2 \quad (4.7)$$

Se define la letargia u dependiente de la energía E y una energía de referencia E_0 como:

$$u = \ln \left(\frac{E_0}{E} \right) \quad (4.8)$$

Por otro lado, se define la propiedad ξ como el valor medio de la variación de letargia en una colisión.

$$\xi = \langle \Delta u \rangle = \left\langle \ln \left(\frac{E_0}{E'} \right) - \ln \left(\frac{E_0}{E} \right) \right\rangle = \left\langle \ln \left(\frac{E}{E'} \right) \right\rangle \quad (4.9)$$

El valor medio se calcula a partir de la probabilidad que el neutrón pase de la energía E a la energía E' después de la colisión. Se tiene:

$$\xi = \int_{\alpha E}^E \ln \left(\frac{E}{E'} \right) P(E \rightarrow E') dE' \quad (4.10)$$

Donde la probabilidad de pasar de una energía a otra depende únicamente de la energía inicial y el factor de colisión.

$$P(E \rightarrow E') = \begin{cases} \frac{1}{E(1-\alpha)}, & \alpha E < E' < E \\ 0, & E' < \alpha E \end{cases} \quad (4.11)$$

Integrando por partes la ecuación se obtiene

$$\xi = 1 + \frac{\alpha \ln \alpha}{1 - \alpha} \quad (4.12)$$

Finalmente se define a la potencia de moderación $\bar{\xi}$ como la media ponderada de ξ en función de la sección eficaz de dispersión $\sigma_{d,i}$ y el número de núcleos por volumen $[A_i]$ de los distintos isótopos del núcleo.

$$\bar{\xi} = \frac{1}{\Sigma_d} \left[\sum_{i=1}^{N_{isotopos}} \xi_i \sigma_{d,i} [A_i] \right] \quad (4.13)$$

La potencia de moderación permite describir la energía que se pierde por choque elástico en un moderador, y por tanto la capacidad a ralentizar los neutrones en el reactor. . Por otro lado, para describir la capacidad de no absorción del moderador, se define la razón de moderación rm como:

$$rm = \frac{\bar{\xi} \Sigma_d}{\Sigma_a} \quad (4.14)$$

La potencia de moderación y la razón de moderación permiten describir la utilidad de un material como moderador. En la tabla 4.1 se presentan los valores de estos dos indicadores para algunos materiales pertinentes para los reactores nucleares.

Material	ξ	rm
H2O	0.920	71
D2O	0.509	5670
Be	0.207	143
Grafito	0.158	192
U-238	0.008	0.0092

Tabla 4.1 - Potencia de moderación y razones de moderación de algunos materiales

Se observa que el agua pesada tiene la mejor capacidad de no absorción mientras que el agua ligera tiene la mejor capacidad a ralentizar los neutrones. En las centrales nucleares tradicionales se usa agua ligera como moderador ya que se tiene un buen compromiso entre las dos variables.

4.4 Ecuación de la difusión

4.4.1 Ecuación para 1 grupo

Se plantea el balance de la población neutrónica en un reactor. La variación de la densidad de neutrones $n(\vec{r}, t)$ varía en función del tiempo por términos que se ven en el balance 4.XXX.

$$\int_V n(\vec{r}, t) dV = - \int_S \vec{j} \cdot d\vec{S} + \int_V \bar{\nu} \Sigma_f \Phi(\vec{r}, t) dV - \int_V \Sigma_a \Phi(\vec{r}, t) dV \quad (4.15)$$

En primer lugar, se tienen los neutrones fuga del reactor, que se desplazan por difusión. Se define el vector corriente de tal manera que $\vec{j} \cdot d\vec{S}$ es el número de neutrones que atraviesan la superficie dS por segundo. Al tratarse de un proceso de difusión, se usa la ley de Fick para describir los neutrones que salen del volumen de control por difusión. La constante de difusión D se puede calcular a partir de la sección eficaz de transporte como $D = \frac{1}{3\Sigma_{trans}}$.

$$\vec{j} = -D\vec{\nabla}\Phi \quad (4.16)$$

Por otro lado, se tienen los neutrones creados por fisión. Se define el flujo neutrónico $\Phi(\vec{r}, t)$ como el número de neutrones por segundo y unidad de superficie. Si se multiplica el flujo neutrónico por la sección eficaz de fisión se obtiene el número de fisiones por segundo y unidad de superficie. Se introduce el valor $\bar{\nu}$ que corresponde al número medio de neutrones producidos por fisión. Así el término $\bar{\nu}\Sigma_f\Phi(\vec{r}, t)$ corresponde al número de neutrones creados por fisión por segundo y unidad de superficie.

Finalmente se tienen en cuenta los neutrones absorbidos que se pierden. Para ello se multiplica el flujo neutrónico por la sección eficaz macroscópica de absorción.

Teniendo en cuenta que $\Phi = nv$ y la ley de Fick se reescribe la ecuación 4.15 como

$$\int_V \frac{1}{v} \Phi(\vec{r}, t) dV = \int_S D\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}, t) \cdot d\vec{S} + \int_V \bar{\nu}\Sigma_f \Phi(\vec{r}, t) dV - \int_V \Sigma_a \Phi(\vec{r}, t) dV \quad (4.17)$$

Si se considera un volumen de control V cerrado, por lo que se puede aplicar el teorema de divergencia y pasar a un balance diferencial.

$$\frac{1}{v} \Phi(\vec{r}, t) = \nabla(D\vec{\nabla}\Phi(\vec{r}, t)) + \bar{\nu}\Sigma_f \Phi(\vec{r}, t) - \Sigma_a \Phi(\vec{r}, t) \quad (4.18)$$

Se tiene una condición inicial que indica que el flujo inicial debe ser independiente del tiempo y una condición de contorno. En general se coge como condición que el flujo se anule en los límites del volumen de control más la distancia extrapolada.

$$\Phi(\vec{r}, 0) = \Phi_0(\vec{r}) \quad (4.19)$$

$$\vec{\nabla}\Phi(\vec{r} = \vec{r}_e, t) = 0 \quad (4.20)$$

La define $\vec{r} = r_e + d$ siendo d la distancia extrapolada y r_e el límite del reactor. La condición de contorno se impone un poco más lejos del final del reactor para que la solución de difusión se aproxime al comportamiento real del reactor. Si se asume que dentro del reactor se tienen un medio difusivo pero que fuera está el vacío (donde ya no es válida la difusión), para que la solución se asemeje a la real se impone la condición de contorno un poco más lejos. Esto se ve reflejado en el esquema 4.XXX.

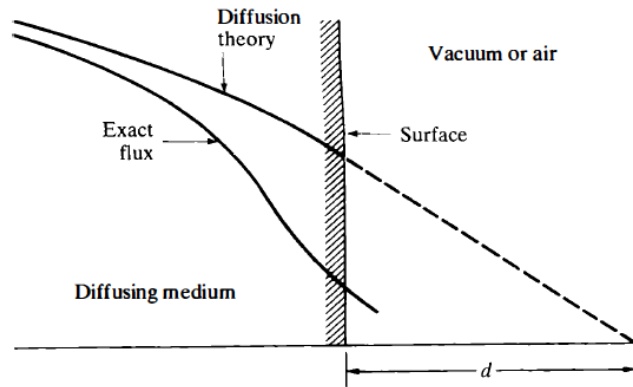


Tabla 4.2 - Esquema de la longitud extrapolada (LAMARSH, y otros, 2001)

4.4.2 Reactor crítico homogéneo

Se dice que un reactor es crítico si tiene una solución estacionaria no trivial. Si se resuelve el problema usando el método de separación de variables, se puede expresar el flujo neutrónico como el producto de una función dependiente de la posición y otra función dependiente del tiempo.

$$\Phi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})T(t) \quad (4.21)$$

Considerando el coeficiente de difusión D constante y aplicando el método de separación de variables se obtiene que una expresión dependiente del radio es igual a otra dependiente del tiempo. Esto solo es válido si cada una de las expresiones son igual a una constante α

$$\frac{v}{\Psi}(D\Delta\Psi + (v\Sigma_f - \Sigma_a)\Psi) = \frac{1}{T}\frac{dT}{dt} = \alpha \quad (4.22)$$

La solución temporal analítica es

$$T(t) = T(0)e^{\alpha t} \quad (4.23)$$

La solución espacial se reescribe como

$$\Delta\Psi + B_g^2\Psi = 0 \quad (4.24)$$

Donde $B_g^2 = \frac{v\Sigma_f - \Sigma_a - \frac{\alpha}{\beta}}{D}$ es el *buckling* geométrico del reactor. Esto representa el grado de curvatura de la solución del flujo neutrónico. Más adelante se justifica porque este concepto es importante para la criticidad de un reactor.

La ecuación 4.24 corresponde a una ecuación de Helmholtz. Este tipo de ecuación tiene un conjunto discreto e infinito de soluciones llamadas funciones de Helmholtz. Aplicando las condiciones iniciales y de contorno, la solución es una combinación lineal de las funciones de Helmholtz Ψ_n que forman una base. Estas funciones satisfacen las ecuaciones 4.24 donde n es un número entero de 1 a $+\infty$. El término $-B_g^2(n)$ corresponde a los valores propios de la ecuación, creando así diferentes modos de Helmholtz.

$$\Delta\Psi_n + B_g^2(n)\Psi_n = 0 \quad (4.25)$$

Existen varios valores propios, sin embargo, el *buckling* depende de la constante α , luego se puede decir que la constante depende a su vez del modo $\alpha(n)$. Se ordenan los modos de manera a tener:

$$\alpha(1) > \alpha(2) > \dots > \alpha(n) \quad (4.26)$$

Siendo $n = 1$ el modo fundamental. La solución al problema se da en la expresión 4.27 donde C_n son constantes dependientes del modo.

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} C_n \Psi_n(r) e^{\alpha(n)t} \quad (4.27)$$

Para que el reactor sea crítico, la solución estacionaria debe existir y no ser trivial. Esto solo es posible si para todo modo $\alpha(n) \leq 0$, ya que cuando este coeficiente es estrictamente positivo la exponencial tiende a $+\infty$ con el tiempo, lo cuál no es una solución estacionaria. Sin embargo, si todos los coeficientes son estrictamente negativos, la solución estacionario cuando $t \rightarrow +\infty$ será trivial (será igual a 0). Debe por tanto existir al menos un coeficiente igual a 0. Teniendo en cuenta 4.26 se concluye que el reactor es crítico si y solamente si el coeficiente $\alpha(1) = 0$.

Se define como *buckling* material el buckling del reactor cuando es crítico. Este se expresa como:

$$B_m^2 = B_g^2(\alpha = 0) = \frac{v\Sigma_f - \Sigma_a}{D} \quad (4.28)$$

Se dice que el reactor es supercrítico cuando el *buckling* material es superior al *buckling* geométrico y subcrítico en caso contrario. Se define la constante de multiplicación k como la razón entre el número de neutrones producidos en una generación y el número de neutrones producidos en la generación anterior. Esta constante se expresa como:

$$k = \frac{v\Sigma_f}{\Sigma_a + DB_g^2(1)} \quad (4.29)$$

Se observa que esta constante depende del *buckling* del modo fundamental. Además, si este es igual al material, la constante $k = 1$. Si el reactor es supercrítico es $k > 1$ y en caso contrario el reactor es subcrítico. Cuando el reactor es crítico, la población neutrónica no varía ya que se produce lo mismo que se pierde. En general se prefiere trabajar con reactor subcríticos, ya que presentan un menor riesgo de generación de calor descontrolada. Los sistemas de seguridad

permiten regular la criticidad del reactor añadiendo elementos como ácido bórico o barras de control. Estos elementos tienen altas secciones eficaces de absorción y permiten reducir la constante de multiplicación.

Se puede medir igualmente la criticidad del reactor a partir de la reactividad ρ . Se considera el reactor crítico si la reactividad es nula, supercrítico si es positiva y subcrítico si es negativa.

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \quad (4.30)$$

Se define k_∞ como la constante de multiplicación de un reactor crítico infinito. Esto representa un orden de magnitud de la reactividad del reactor que depende únicamente de propiedades conocidas del reactor.

$$k_\infty = \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a} \quad (4.31)$$

Finalmente se puede calcular la probabilidad de no fuga de neutrones del reactor P_{NL} . Esta probabilidad es la fracción de los neutrones absorbidos por los neutrones totales perdidos. Los neutrones totales perdidos son la suma de los neutrones absorbidos y los que se fugan por difusión.

4.4.3 Cinética de reactores

Se pueden clasificar los neutrones producidos en un reactor nuclear en dos grupos: los neutrones instantáneos y los diferidos. La diferencia entre los dos depende de intervalo de tiempo que pasa entre el momento de la fisión y la producción del neutrón.

Cuando ocurre la fisión de un núcleo, los neutrones generados como producto de esta son neutrones instantáneos. Por otro lado, los neutrones diferidos se producen después de la fisión, por desintegración de tipo beta de los precursores producidos por la fisión. En efecto, si alguno de los productos de la fisión es radiactivo, este emitirá espontáneamente un neutrón (partícula beta) siguiendo la ley de desintegración exponencial. Esta última indica que la tasa de desintegración es proporcional al número de neutrones desintegrados.

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N(t) \quad (4.32)$$

Donde $N(t)$ es la cantidad de precursores que hay en el instante t , λ la constante de desintegración en s^{-1} y $-\lambda N(t)$ el número de precursores que se desintegran. El tiempo de la vida media de un precursor es igual a $T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$.

Se define la constante β como la fracción de el número neutrones diferidos y el número total de neutrones producidos por fisión. Así el producto $\beta \bar{\nu}$ corresponde al número de neutrones diferidos producidos por fisión. Se crea un neutrón diferido si se ha creado un precursor, por lo que $\beta \bar{\nu}$ corresponde igualmente al número de precursores por fisión.

Se pueden dividir los precursores en 6 grupos con constantes de desintegración y energías de emisión de los neutrones distintas. Se puede por tanto realizar un balance de concentración de los precursores C_i en el reactor, en función del grupo i del que se trate.

$$\frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \bar{\nu} \Sigma_f \Phi(\vec{r}, t) - \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (4.33)$$

El balance de concentración de neutrones en el reactor 4.17 se ve entonces modificada si se tienen en cuenta los dos tipos de neutrones. Cabe destacar que la concentración total de precursores será la suma de la concentración de los 6 grupos y que la constante β total es la suma de todas las constantes.

El número de neutrones producidos total es $\bar{\nu}\Sigma_f\Phi$, y el número de neutrones diferidos es igual al número de precursores que se desintegran. Por último, el número de neutrones instantáneos es el número total menos los diferidos. El balance 4.17 se reescribe como:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla \Phi(\vec{r}, t)) + (1 - \beta) \bar{\nu} \Sigma_f \Phi(\vec{r}, t) - \Sigma_a \Phi(\vec{r}, t) + \sum_i^6 \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (4.34)$$

4.4.4 Teoría Multigrupo

Como se ha podido mencionar anteriormente, existen varias interacciones posibles entre los neutrones y la materia. Para poder medir la probabilidad de ocurrencia se usan secciones eficaces de las interacciones posibles. Sin embargo, estas secciones eficaces dependen de la energía del neutrón incidente. Asimismo, se pueden clasificar los neutrones según grupos de energía. Los grupos más usados se presentan en la tabla 4.3, sin embargo, esta lista no es exhaustiva, se pueden usar más o menos grupos a la hora de realizar un modelo neutrónico en función de la precisión deseada.

Energía neutrón	Grupo de energía
0.0–0.025 eV	Neutrones fríos
0.025 eV	Neutrones térmicos
0.025–0.4 eV	Neutrones epitérmicos
0.4–0.5 eV	Neutrones cadmio
0.5–1 eV	Neutrones epicadmio
1–10 eV	Neutrones lentos
10–300 eV	Neutrones de resonancia
300 eV–1 MeV	Neutrones intermedios
1–20 MeV	Neutrones rápidos
>20MeV	Neutrones relativistas

Tabla 4.3 - Tabla de grupos de energía de neutrones (www.nuclear-power.com)

Existen muchos modelos neutrónicos a partir de únicamente dos grupos. En ese caso se considera neutrones rápidos los neutrones con energía superiores a 1keV y neutrones térmicos a neutrones con energía inferior a 1keV.

De manera general, la fisión se produce con más probabilidad para neutrones térmicos, mientras que los neutrones instantáneos producidos por fisión suelen ser neutrones rápidos. El moderador del reactor es el elemento que permite bajar la energía de estos neutrones rápidos, para que puedan pasar a ser térmicos y producir a su vez más reacciones. El moderador tiene por tanto un papel crucial en la producción de la reacción en cadena.

De manera general, los neutrones no aumentan de energía espontáneamente, sino que van perdiendo energía a causa de interacciones con el moderador y el combustible. Por lo que no se tienen neutrones térmicos que se convierten en rápidos. Se nota Φ_1 el flujo de neutrones

rápidos y Φ_2 el de neutrones térmicos. La conversión de neutrones rápidos a térmicos se cuantifica a partir de la sección eficaz notada $\Sigma_{1 \rightarrow 2}$. Las ecuaciones de difusión para dos grupos de energía son las siguientes:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = (1 - \beta) \mathcal{M} \Phi - \mathcal{L} \Phi + \sum_i^6 \lambda_i C_i \quad (4.35)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \mathcal{M} \Phi - \lambda_i C_i \quad (4.36)$$

Donde $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2)^T$ es el vector de flujos neutrónicos. Los operadores \mathcal{M} y \mathcal{L} se definen como:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \bar{v}_1 \Sigma_{f1} & \bar{v}_2 \Sigma_{f2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} -\nabla D \vec{\nabla} + \Sigma_{a,1} + \Sigma_{1 \rightarrow 2} & 0 \\ -\Sigma_{1 \rightarrow 2} & -\nabla D \vec{\nabla} + \Sigma_{a,2} \end{pmatrix} \quad (4.38)$$

Se demuestra que la ecuación estacionaria es:

$$\mathcal{L} \Phi = \frac{1}{k} \mathcal{M} \Phi \quad (4.39)$$

Donde k es la constante de multiplicación del reactor. Esta se redefine para la teoría multigrupo como:

$$k_\infty = \frac{\bar{v}_1 \Sigma_{f1} \Phi_1 + \bar{v}_2 \Sigma_{f2} \Phi_2}{\Sigma_{a1} \Phi_1 + \Sigma_{a2} \Phi_2} \quad (4.40)$$

La ecuación 4.40 presenta un problema de valores propios, por lo que existen igualmente varios modos. Para resolver el modelo neutrónico se pretende encontrar el modo fundamental y su constante de multiplicación k asociada.

5 Funcionamiento programa *FEMFFUSION*

El programa *FEMFFUSION* permite de resolver el modelo neutrónico tanto para la ecuación de la difusión como para los armónicos esféricos (SPN). Para este trabajo de Fin de Máster se resuelve únicamente las ecuaciones estacionarias. Para ello el programa discretiza el problema en un mallado con el método de elementos finitos de Galerkin, lo cual da lugar a un problema de auto-valores. El programa propone varios métodos de resolución de problema de autovalores, algunos de ellos pertenecen a la biblioteca SLPEc (Scalable Library for EigenValue Problem Computations). Cada uno de ellos tienen tipos de inicialización y preconditionadores distintos. Los métodos son los siguientes:

- el método de la potencia,
- el método de Krylov-Schur (de SLEPC),
- el método Generalized Davidson (de SLEPC),
- el método Block Inverse-Free Preconditioned Arnoldi (BIFPAM),
- el método Modified Block Generalized Newton (MGBNM).

El programa permite estudiar tres tipos de geometría de reactor: rectangular, hexagonal y a nivel de pin. Para lanzar el programa se requieren dos ficheros de partida:

- El fichero.prm es el fichero de entrada principal.
- El fichero.xsec es el fichero de las secciones eficaces. En este fichero se indica el tipo de material y las secciones eficaces de cada una de las celdas.

En la siguiente tabla se presentan los datos que tienen que aparecer en el fichero.prm

Nombre	Descripción	Opciones
Dimension	Dimensión del problema	1,2,3
Transport_Appr	Tipo de aproximación de transporte	Diffusion, SPN
N_SPN	Número 'N' de las ecuaciones SPN	1,3,5
FE_Degree	Grado de los polinomios en el método de elementos finitos	1,2,3,4,5
Energy_Groups	Número de grupos de energía	1,2,...,7
Geometry_Type	Tipo de geometría del reactor	Rectangular, Hexagonal
Mesh_Size	Número de celdas por dimensión	Vector
Cell_Pitch_x	Tamaño de celdas en dimensión x	Vector
Cell_Pitch_y	Tamaño de celdas en dimensión y	Vector
Cell_Pitch_z	Tamaño de celdas en dimensión z	Vector
Geometry_Points	Primera y última celda de cada fila en la planta del reactor	Vector
Boundary_Conditions	Condiciones de contorno	0: Flujo cero, 1: Simetría, 2: Albedo, 3: Vacío
Output_Filename	Archivo donde se guarda el output	
XSECS_Filename	Archivo de las secciones eficaces	

Tabla 5.1 - Parámetros de entrada para el archivo '.prm' (Vidal-Ferràndiz y otros, 2021)

Al lanzar el programa se pueden indicar más parámetros como el método de resolución del sistema o el número de auto-valores a calcular. El programa crea cuatro ficheros de salida:

- El archivo.out contiene los datos principales del problema, los autovalores, el flujo y la potencia en todas las celdas y el perfil axial de potencia (únicamente en reactores tridimensionales).
- El archivo.vtk contiene los valores de flujo y potencia en los nodos para poder visualizarlo con Paraview o Visit.
- El archivo.eps contiene un dibujo de la malla creada por el programa.
- El archivo.log contiene información con respecto a la resolución del problema de autovalores.

6 Modelo inicial propuesto por el Benchmark NEACRP

6.1 Geometría y materiales iniciales

Se pretende estudiar el Benchmark NEACRP. Este contiene varios casos de estudio posibles: 6 para un reactor PWR y dos para un reactor BWR (Boiling Water Reactor). Para este trabajo se escoge el primer caso A1 del reactor PWR (Pressure Water Reactor). Se trata de la subida de ciertas barras de control cuando el reactor está parado (HZP: Hot Zero Power). A su vez se tendrá que estudiar el caso estacionario para tener el punto de partida para la parte transitoria.

El reactor PWR estudiado se divide axialmente en 18 capas de longitudes variables sumando 427.3cm en total. En la siguiente tabla se presentan las longitudes de cada capa.

Capa	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Longitud (cm)	30	7.7	11.0	15.0	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0
Capa	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Longitud (cm)	30.0	30.0	30.0	30.0	30.0	12.8	12.8	8.0	30.0

Tabla 6.1 - Capas a lo largo del reactor

Por otro lado, el reactor se divide radialmente en celdas cuadradas de 21.606 cm de lado. Cada plano se divide en 221 celdas, por lo que se tienen 3978 en total.

Las celdas que se encuentren en el contorno del reactor corresponden a material reflector, mientras que la parte activa del núcleo está formada por las celdas internas a las que se les asocia un tipo de material. Estas son llamadas elementos combustibles. La parte activa del reactor mide 367.3cm y va de la capa 2 a la 17. Cada celda tiene asociada un tipo de material, sin embargo cada tipo no corresponde a un único material, sino a una mezcla de varios materiales, de la cual se sacan los datos asociados.

Más concretamente, cada elemento combustible está compuesto de varias barras cilíndricas agrupadas y huecos por donde pasa el agua del ciclo. Se tienen varios tipos de varilla:

- Varillas de combustible en las que se pueden encontrar los *pellets*
- Varillas de veneno combustible (BA: *Burnable Absorber Rod*)
- Varillas de instrumentación. Estas se usan para los distintos sensores y cables de la central
- Barras de control

Las secciones eficaces de cada uno de los materiales se sacan con datos experimentales, y depende de varios factores como el enriquecimiento del combustible, el número de varillas de veneno combustible, el material de las varillas o el agua que pasa por los huecos.

A partir de los datos que se proporcionan se tienen 11 materiales distintos que se representan en la tabla 6.2.

Se tienen distintos materiales reflectores en función de su posición en el reactor. El primer material corresponde al reflector axial, presente únicamente en las capas 1 y 18. Por otro lado se tienen dos reflectores radiales: el que se encuentra en las esquinas del reactor y el resto de las celdas de reflector del contorno. Estos dos materiales están presentes en todas las capas.

Código del material	Tipo de material
1	Reflector axial
2	Reflector radial
3	Reflector radial en esquinas
4	2.1 w/o
5	2.6 w/o
6	3.1 w/o
7	2.6 w/o, 12 BA
8	2.6 w/o, 16 BA
9	2.6 w/o, 20 BA
10	3.1 w/o, 12 BA
11	3.1 w/o, 16 BA

Tabla 6.2 - Tipos de materiales del reactor

En la parte activa del reactor se pueden encontrar tres tipos de enriquecimiento del U-235:

- 2.1 w/o
- 2.6 w/o
- 3.1 w/o

Se clasifica igualmente por el número de varillas de veneno combustible en el elemento combustible, lo cual aumenta el número de materiales. Se pueden tener 3 casos: 12,16 y 20 varillas de veneno combustible.

6.2 Barras de control

Como se ha mencionado anteriormente, el reactor tiene barras de control. Cuando la barra está completamente insertada se encuentra a 37.7 cm de la tapa inferior del reactor, y cuando se retira totalmente se encuentra a 401,183 cm. Por otro lado la longitud de la barra es de 362.159 cm. Para modelar el desplazamiento de las barras se puede discretizar la amplitud de trabajo (363.483 cm) en 229 pasos (de 0 a 228 siendo 0 inserción completa).

Se considera que se tienen dos tipos de barras de control en función del enriquecimiento que tiene el combustible en la celda por la que pasa:

- CA-1: enriquecimiento del 2.1%
- CA-2: enriquecimiento del 3.1%

Las secciones eficaces se sacan de manera experimental y las barras de control no producen la misma variación en las secciones eficaces si el enriquecimiento es distinto, por lo que se separa en dos tipos distintos.

En la siguiente imagen se muestra la distribución de las barras de control en el reactor en función de su tipo:

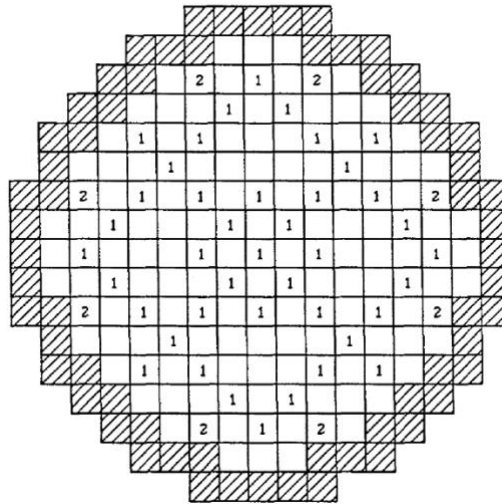


Figura 6.1 - Esquema de posición de barras de control en el reactor (NEARCP)

Las barras de control están en movimiento, por lo que las propiedades de una celda pueden variar en función de la presencia de la barra. La siguiente fórmula se usa para calcular la sección eficaz de un elemento combustible por el cual pasa una barra de control (CA: Control Assembly):

$$\Sigma_{with\ CA} = \Sigma_{without\ CA} + p\Delta\Sigma_{CA} \quad (6.1)$$

Donde:

- p , es la inserción relativa de la barra en el nodo ($0 \leq p \leq 1$).
- $\Sigma_{with\ CA}$, es la sección eficaz teniendo en cuenta la barra de control.
- $\Sigma_{without\ CA}$, es la sección eficaz del material original.
- $\Delta\Sigma_{CA}$, es la variación de sección eficaz de la barra de control.

A parte de estos materiales se tienen que tener en cuenta materiales adicionales para completar el modelo, ya que no se están teniendo en cuenta dos casos.

El primer caso corresponde a las celdas de la parte superior (capa 18) por donde se introducen las barras de control. En ese nivel se encuentra el dispositivo controlador de las barras de control (CA driver) Este pasa por esa celda y afecta a las secciones eficaces del material.

La longitud de las barras de control es de 362.159 cm y la cota de la barras de control varía entre 37.7 cm y 401.183 cm cuando está totalmente insertado o sacado respectivamente. En ambos casos la barra pasa por la capa 18, por lo que se puede calcular el valor de p para el nodo 18 en los casos extremos:

- $p_{inserción\ completa} = 1$
- $p_{retirada\ completa} = 0$

Se puede deducir que siempre habrá presencia de driver y barra de control en la capa 18. Se definen por tanto los materiales 12 y 13 que representan respectivamente las celdas de material

1 por donde pasa el conductor de la barra de control de tipo 1 y el driver, y la celda de material 2 por la que pasa el conductor de la barra de control de tipo 2 y el driver.
 Para el cálculo de secciones eficaces con el driver se usa la fórmula 4.1 cogiendo $p = 1$.

$$\Sigma_{with\ driver-CA} = \Sigma_{without\ driver-CA} + \Delta\Sigma_{driver} + p\Delta\Sigma_{CA} \quad (6.2)$$

Donde:

- $\Sigma_{with\ driver}$, es la sección eficaz teniendo en cuenta el driver.
- $\Sigma_{without\ driver-CA}$, es la sección eficaz del material original.
- $\Delta\Sigma_{driver}$, es la variación de sección eficaz del driver.

El segundo caso es cuando las barras de control pasan por un material de combustible. Con la configuración actual de las barras de control se tienen que tener en cuenta dos materiales adicionales, La barra totalmente insertada mide 37.7 cm desde la parte inferior del reactor, y las capas 1 y 2 tienen alturas respectivas de 30 cm y 7,7 cm, luego la barra se puede insertar la capa número 3 como máximo. Por lo que, sin tener en cuenta la capa 18 y sabiendo que se tiene la misma distribución de la capa 3 a la 17, cada barra de control solo atraviesa un material en ese intervalo. En resumen se añaden los siguientes materiales:

- Material 12: Celda de material 1 con barra de control CA-1 y driver
- Material 13: Celda de material 2 con barra de control CA-2 y driver
- Material 14: Celda de material 4 con barra de control CA-1
- Material 15: Celda de material 6 con barra de control CA-2

6.3 Distribución de materiales

En los siguientes esquemas se presentan las distribuciones de los materiales en cada capa del reactor. Se tienen los materiales 12,13,14 y 15 considerando que las barras de control están totalmente insertadas.

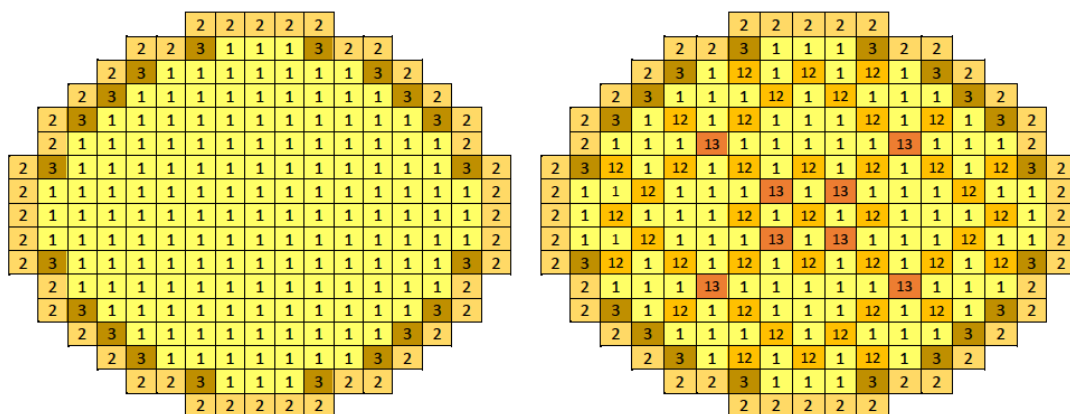


Figura 6.2 - Composición del plano radial 1 (tapa inferior) a la izquierda y el plano radial 18 (tapa superior) a la derecha.

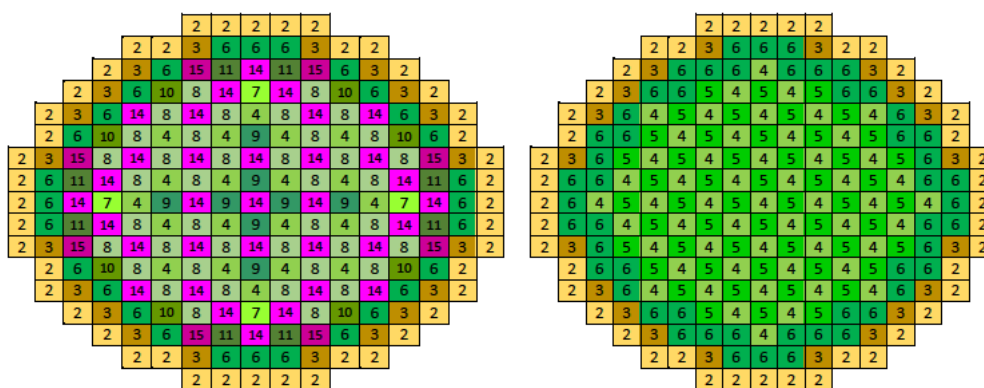


Figura 6.3 - Composición del plano radial 2 (izquierda) y de los planos radiales 3-17 (derecha). (Carreño Sánchez, 2020)

6.4 Secciones eficaces

El *benchmark* presenta las secciones eficaces de los materiales en condiciones de referencia. Existen algunos códigos como por ejemplo el programa JANIS (Java-based Nuclear Information Software) propuesto por el NEA (Nuclear Energy Agency) que permite calcular las propiedades de muchos materiales como las secciones eficaces o constantes de desintegración.

Para poder resolver las ecuaciones de transporte neutrónicas se necesitan las secciones eficaces de transporte, de fisión y de absorción de los dos grupos de energía, y la sección eficaz de conversión y de un grupo a otro.

En el caso estacionario se considera que todas las barras de control están insertadas. Luego las secciones eficaces de los materiales 12 y 13 se calculan cogiendo $p = p_{\text{inserción completa}}$ y los materiales 14 y 15 se calculan cogiendo $p = 1$.

Se presentan en la tabla 6.3 las secciones eficaces de los materiales en condiciones de referencia.

Material	Grupo	$\Sigma_{tr}(cm^{-1})$	$\Sigma_a(cm^{-1})$	$\nu\Sigma_f(cm^{-1})$	$\Sigma_f(cm^{-1})$	$\Sigma_{1 \rightarrow 2}(cm^{-1})$
1	1	5.32058E-02	3.73279E-04	0.00000E+00	0.00000E+00	2.64554E-02
	2	3.86406E-01	1.77215E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	-
2	1	2.95609E-01	1.18782E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	2.31613E-02
	2	2.45931E+00	2.52618E-01	0.00000E+00	0.00000E+00	-
3	1	2.95609E-01	1.18782E-03	0.00000E+00	0.00000E+00	2.00808E-02
	2	2.45931E+00	2.52618E-01	0.00000E+00	0.00000E+00	-
4	1	2.22117E-01	8.71774E-03	4.98277E-03	1.90224E-03	1.82498E-02
	2	8.03140E-01	6.52550E-02	8.39026E-02	3.43581E-02	-
5	1	2.21914E-01	9.06133E-03	5.57659E-03	2.14498E-03	1.80040E-02
	2	7.95538E-01	7.23354E-02	9.98629E-02	4.08938E-02	-
6	1	2.21715E-01	9.38496E-03	6.15047E-03	2.37972E-03	1.77670E-02
	2	7.89253E-01	7.89203E-02	1.14667E-01	4.69561E-02	-
7	1	2.22039E-01	9.31692E-03	5.55010E-03	2.13629E-03	1.71381E-02
	2	7.76230E-01	7.96328E-02	9.85576E-02	4.03596E-02	-
8	1	2.22083E-01	9.40032E-03	5.54083E-03	2.13318E-03	1.68501E-02
	2	7.69969E-01	8.21087E-02	9.80059E-02	4.01338E-02	-

9	1	2.22127E-01	9.48286E-03	5.53137E-03	2.13003E-03	1.65626E-02
	2	7.63813E-01	8.45912E-02	9.74109E-02	3.98902E-02	-
10	1	2.21836E-01	9.63720E-03	6.12382E-03	2.37097E-03	1.69043E-02
	2	7.70705E-01	8.61187E-02	1.13241E-01	4.63724E-02	-
11	1	2.21878E-01	9.71937E-03	6.11444E-03	2.36781E-03	1.66175E-02
	2	7.64704E-01	8.85488E-02	1.12635E-01	4.61246E-02	-
12	1	4.99670E-02	2.93888E-03	-1.02786E-04	0.00000E+00	2.52651E-02
	2	3.53064E-01	4.50094E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	-
13	1	4.99757E-02	2.89044E-03	-1.22634E-04	0.00000E+00	2.52651E-02
	2	3.58306E-01	4.50697E-02	0.00000E+00	0.00000E+00	-
14	1	2.25849E-01	1.11954E-02	4.87998E-03	1.86444E-03	1.50573E-02
	2	7.81147E-01	9.08425E-02	8.10794E-02	3.32033E-02	-
15	1	2.25456E-01	1.18142E-02	6.02784E-03	2.33380E-03	1.46246E-02
	2	7.72503E-01	1.04568E-01	1.11386E-01	4.82987E-02	-

Tabla 6.3 - Secciones eficaces en condiciones de referencia

Como se ha mencionado anteriormente, existen dos tipos de material para las barras de control CA-1 y CA-2. Sin embargo el *benchmark* adjunta en el apéndice una tabla con 5 materiales en total:

- CA-1 para materiales de la capa 2 a 17
- CA-2 para materiales de la capa 2 a 17
- CA-1 para materiales de la capa 18
- CA-2 para materiales de la capa 18
- *Driver*

A continuación se presentan las secciones eficaces de los materiales y las variaciones de sección eficaz del driver y las barras de control para las condiciones de referencia.

Material	Grupo	$\Delta\Sigma_{tr}(cm^{-1})$	$\Delta\Sigma_a(cm^{-1})$	$\Delta\nu\Sigma_f(cm^{-1})$	$\Delta\Sigma_f(cm^{-1})$	$\Delta\Sigma_{1\rightarrow 2}(cm^{-1})$
CA-1	1	3.73220E-03	2.47770E-03	-1.02786E-04	-3.77989E-05	-3.19253E-03
	2	-2.19926E-02	2.55875E-02	-2.82319E-03	-1.15483E-03	
CA-2	1	3.74090E-03	2.42926E-03	-1.22634E-04	-4.59250E-05	-3.14239E-03
	2	-1.6750E-02	2.5648E-02	-3.2809E-03	1.3426E-03	
CA-1 (18)	1	3.7322E-03	2.4777E-03	-1.0279E-04	0.0000E+00	0.0000E+00
	2	-2.1993E-02	2.5588E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	
CA-2 (18)	1	3.7409E-03	2.4293E-03	-1.2263E-04	0.0000E+00	0.0000E+00
	2	-1.6750E-02	2.5648E-02	0.0000E+00	0.0000E+00	
<i>Driver</i>	1	-6.9710E-03	8.7903E-05	0.0000E+00	0.0000E+00	-1.1903E-03
	2	-1.1350E-02	1.7004E-03	0.0000E+00	0.0000E+00	

Tabla 6.4 - Variación de secciones eficaces de material de sistema de control

Estas secciones eficaces están calculadas para las condiciones estándar del *benchmark*. Sin embargo algunos parámetros del reactor influyen en el valor de las secciones. El *benchmark* propone de resolver este problema teniendo en cuenta una dependencia de 4 variables:

- Temperatura de Doppler del núcleo T_D
- Temperatura del moderador (agua) T_M
- Densidad del moderador (agua) ρ
- Concentración de Boro c

Se considera la temperatura de Doppler ya que es esta la que influye en las secciones eficaces. Viene definida por la siguiente fórmula proporcionada por el *benchmark*.

$$T_D = (1 - \alpha)T_{centro} + \alpha T_{superficie} \quad (4.2)$$

Donde T_{centro} es la temperatura del centro del reactor, $T_{superficie}$ la temperatura a la superficie del núcleo del reactor y $\alpha = 0.7$.

La concentración de boro se puede modificar en el reactor y permite controlar su reactividad hasta llegar al estado crítico. Al resolver el modelo neutrónica acoplado con el termo-hidráulico, uno de los objetivos es encontrar la concentración de boro crítica del reactor.

En la siguiente tabla se indica los valores de referencia de las variables que influyen en las secciones eficaces.

Variable	Valor
T_{D0}	618.3 °C
T_{M0}	306.6 °C
ρ_0	712.5 kg/m ³
c_0	1200.2

Tabla 6.5 - Valores de variables de referencia

Para tener en cuenta la influencia de estas variables en las secciones eficaces, se usan las derivadas de secciones eficaces y la siguiente fórmula:

$$\Sigma = \Sigma_0 + \frac{\partial \Sigma}{\partial \sqrt{T_D}} (\sqrt{T_D} - \sqrt{T_{D0}}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial T_M} (T_M - T_{M0}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial c} (c - c_0) + \frac{\partial \Sigma}{\partial \rho} (\rho - \rho_0) \quad (4.3)$$

Donde:

- Σ , es la sección eficaz calculada en condiciones reales en cm,
- T_D , es la temperatura de Doppler del núcleo en K,
- T_M , es la temperatura del refrigerante en K,
- ρ , es la densidad del refrigerante en g/cm³,
- c , es la concentración de boro del reactor en ppm,
- x_0 , es la variable x en condiciones de referencia,
- $\frac{\partial \Sigma}{\partial x}$, es la derivada de la sección eficaz con respecto a la variable x .

Las derivadas se sacan igualmente a partir de cálculos y se pueden encontrar en la tabla proporcionada por el *benchmark*.

6.5 Grupos de energía y de desintegración

En la simulación de la parte neutrónica se tienen en cuenta únicamente dos grupos de energía: neutrones rápidos (grupo 1) y térmicos (grupo 2). En la siguiente tabla se representan las propiedades de cada grupo de energía.

	Grupo rápido	Grupo térmico
Velocidad de neutrón (cm/s)	2.8E-09	4.4E-07
Energía de fisión (Ws/fission)	3.2131E-11	3.206E-11

Tabla 6.6 - Grupos de energía

Por otro lado se consideran seis grupos de precursores de neutrones diferidos con constantes de desintegración distintas

Grupo	Constante de desintegración λ (s^{-1})	Fracción relativa de neutrones diferidos
1	0.0128	0.034
2	0.0318	0.2
3	0.119	0.183
4	0.3181	0.404
5	1.4027	0.145
6	3.9286	0.034
Porcentaje total de neutrones diferidos		76%

Tabla 6.7 - Constantes de desintegración

7 Modelo termo-hidráulico

Para calcular la parte neutrónica del sistema, el programa FEMFUSSION requiere como dato de partida las secciones eficaces del reactor. El *benchmark* proporciona las secciones eficaces en condiciones de referencia, pero es necesario volver a calcularlas en cada instante. Las condiciones de las que dependen las secciones eficaces son la concentración de boro, la densidad y temperatura del agua, y la temperatura de Doppler. De esta forma, para obtener el valor de estas variables es necesario un modelo termo-hidráulico acoplado al neutrónico.

El moderador del sistema es agua, y enfría el reactor pasando por la parte activa del reactor. El flujo atraviesa el reactor axialmente, por cada uno de los *fuel assembly*. En la parte activa del reactor, se tiene el mismo material para toda una celda axial a lo largo del reactor (de la capa 3 a 17).

Se pretende calcular la transmisión de calor entre cada uno de los elementos combustibles axiales y el agua para poder obtener el valor de las variables termodinámicas. Sin embargo, cada *fuel assembly* está compuesto de varias varillas de combustible que se refrigeran con el agua que pasa por el reactor. El *fuel assembly* no solo está compuesto de varillas de combustible, pero igualmente de otro tipo de varillas llamadas *guide tubes*. Estas últimas se suelen usar para instrumentación o *burnable absorbers*, sin embargo, el benchmark no especifica su uso en este caso. Se desprecia por tanto la transferencia de calor con este tipo de varillas, y se centra el modelo en la transferencia de calor entre el agua y la varilla combustible.

Se pretende realizar un modelo simplificado en el cual se estudia de manera independiente la transmisión de calor en cada varilla del elemento combustible, es decir, que no se tiene en cuenta ni transferencia de calor ni de masa entre varillas. Además, se considera que las condiciones y propiedades de los materiales y elementos son idénticas para cada varilla, es decir, se tienen las mismas dimensiones y el valor de las variables termo-hidráulicas será idéntico en cada instante de tiempo.

Para obtener un resultado generalizado en todo el elemento combustible se considera que el flujo de calor total transmitido es igual a la suma de los flujos en cada varilla. Al ser idénticos se tiene:

$$Q_{fa} = \sum_i^{n_{varillas}} Q_{varilla,i} \quad (7.1)$$

De manera análoga se puede sacar el calor total producido por el reactor.

$$Q_{total} = \sum_i^{n_{fa}} Q_{fa,i} \quad (7.2)$$

La varilla es un cilindro de altura igual a la altura de la parte activa del reactor H , de radio externo $R_{clad,ext}$ y radio interno $R_{clad,int}$ como se muestra en la figura 7.1. Se conoce el valor de estos datos al igual que el material del *cladding* de la varilla (Zirkaloy-4) por el *benchmark*.

Cada varilla contiene varios pellets apilados que se modelan como un cilindro de combustible de radio R_{UO_2} y longitud H . Este cilindro combustible está rodeado de una capa de Helio de radio R_{He} .

El *benchmark* especifica que un *fuel assembly* se divide en 289 varillas (17x17), siendo 221 varillas de combustible y 25 *guide tubes*.

En la tabla 7.1 se proporcionan los datos geométricos del modelo:

R_{UO_2}	4.1195 mm
$R_{clad,int}$	4.1875 mm
$R_{clad,ext}$	4.7585 mm
H	367.3 cm
$n_{varillas}$	264 uds
L_{fa}	21.606cm
n_{fa}	221
$R_{guide tube}$	6.1295 mm
$n_{guide tubes}$	25 uds

Tabla 7.1 - Datos geométricos del modelo

Queda por modelar el agua que enfría cada varilla. Para ello se escoge un volumen de control cilíndrico de radio R_{agua} y longitud H por donde pasa un caudal de agua $\dot{m}_{agua,varilla}$ que enfría una sola varilla combustible. Bien que esto no corresponda con la realidad, se escoge una geometría cilíndrica para poder plantear los balances de masa y energía en coordenadas cilíndricas.

El radio de este cilindro de refrigerante es por tanto un radio equivalente ya que no representa la situación real. El *benchmark* indica que se deja un espacio de $p = 12.655mm$ entre centros de varillas en el reactor. Esto quiere decir que cada varilla está rodeada por prisma de agua como indica la figura XXX.

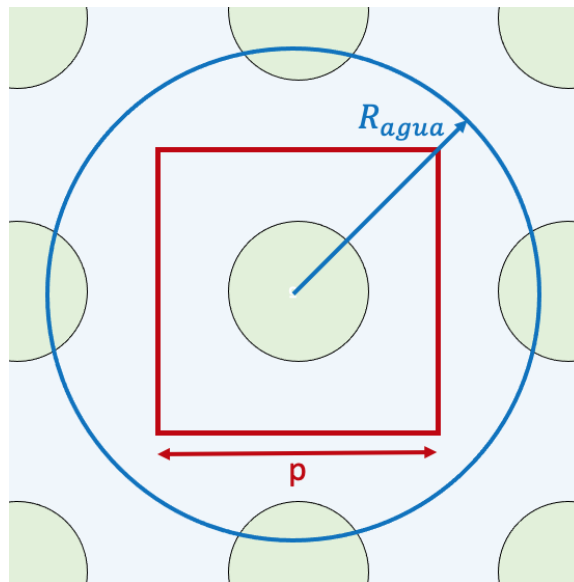


Figura 7.1 - Esquema de sección transversal del flujo de agua para una varilla

El radio de agua equivalente se calcula de tal manera que el área del rectángulo sea igual al área del círculo que rodea la varilla. Así se tiene:

$$R_{agua} = \frac{p}{\sqrt{\pi}} = 7.14 \text{ mm} \quad (7.3)$$

Se puede por tanto calcular la superficie transversal por la que pasa el flujo de agua correspondiente a una varilla.

$$S_{agua} = \pi(R_{agua}^2 - R_{clad,ext}^2) = 8.90 \times 10^5 m^2 \quad (7.4)$$

Se considera que las propiedades y dimensiones son idénticas para todas las varillas de todos los *fuel assembly*. Al tener condiciones idénticas entre varillas se puede calcular la sección transversal total por la que pasa agua en el reactor.

$$S_{agua,total} = n_{fa}n_{varillas}S_{agua} = 5.19 m^2 \quad (7.5)$$

En el siguiente esquema se representa el modelo simplificado de una varilla rodeada por el cilindro de agua.

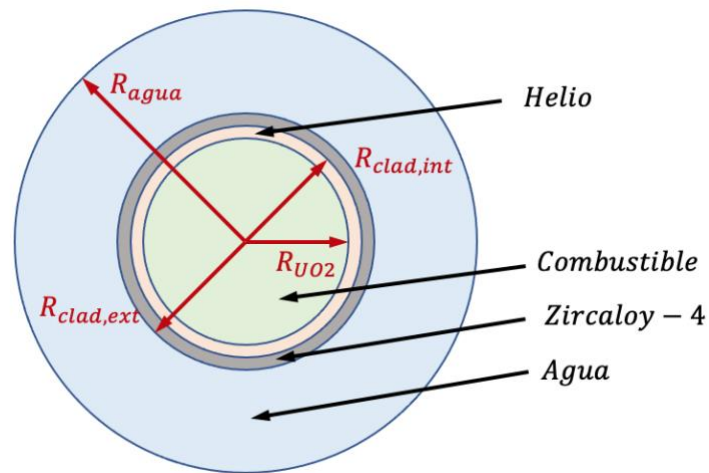


Figura 7.2 - Esquema del modelo propuesto

Para plantear las ecuaciones de balance se proponen los volúmenes de control mostrados en el siguiente esquema.

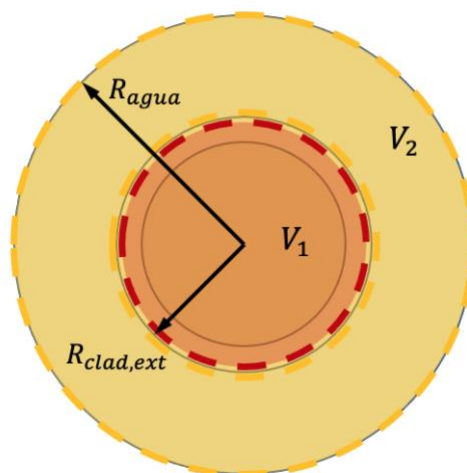


Figura 7.3 - Esquema de los volúmenes de control del modelo

El volumen de control V_1 es el cilindro de radio $R_{clad,ext}$ y altura H . Por tanto contiene el elemento combustible, la capa de Helio y el *cladding*. Se considera un solo volumen de control con propiedades que varían radialmente. Una propiedad θ en el volumen V_1 será igual a:

$$\theta_{V_1} = \begin{cases} \theta_{UO_2} \text{ para } 0 < r < R_{UO_2} \\ \theta_{He} \text{ para } R_{UO_2} < r < R_{var,int} \\ \theta_{Zir} \text{ para } R_{var,int} < r < R_{var,ext} \end{cases}$$

Por otro lado, se tiene el volumen de control V_2 , que corresponde al volumen del cilindro de radio R_{agua} y altura H menos el volumen de control V_1 . En dicho volumen solo pasa agua, por lo que todas las propiedades son las del agua.

7.1 Balance de entalpía en el volumen de control V_1

Se plantea primero la transferencia de calor en el combustible y el tubo de Zircaloy-4. Esto corresponde al volumen de control V_1 planteado en el esquema. Se plantea el balance de entalpía en dicho volumen. En primer lugar, se usa la derivada material de la entalpía en todo el volumen.

$$\frac{DH}{Dt} = \frac{D}{Dt} \iiint_{V_1} \rho_{V_1} h dV = \iiint_{V_1} \frac{\partial \rho_{V_1} h}{\partial t} dV + \iint_{S_1} \rho_{V_1} h \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (7.6)$$

Donde:

- ρ_{V_1} es la densidad del material (variable según el radio) en el volumen V_1 en $\frac{kg}{m^3}$
- H es la entalpía en W
- h es la entalpía volumétrica en $\frac{W}{m^3}$

En este caso, tanto el combustible, el Helio como el *cladding* no se desplazan, por lo que el volumen de control es fijo y $\vec{v} = 0$. La derivada material es igual a la temporal. Así, no existe calor transferido por convección en el sistema. Se tiene:

$$\frac{DH}{Dt} = \iiint_{V_1} \frac{\partial \rho_{V_1} h}{\partial t} dV = \frac{dH}{dt} \quad (7.7)$$

Por otro lado el balance de entalpía es:

$$\frac{dH}{dt} = -Q_{ext} + P_{gen} \quad (7.8)$$

Se tiene que la variación temporal de la entalpía en el volumen depende del calor externo intercambiado con el exterior (con el agua que enfría la tubería) del volumen de control $-Q_{ext}$ y el calor generado por fisión nuclear P_{gen} . Se añade un signo negativo para el calor intercambiado ya que Q_{ext} es el calor visto desde fuera del volumen de control, es decir, desde el volumen de control V_2 .

El calor externo se puede transferir de dos modos: conducción o radiación. Usando los flujos térmicos y potencias volumétricas se obtiene:

$$\frac{dH}{dt} = - \iint_{S_1} (\vec{q}_{cond} + \vec{q}_{rad}) \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V_1} p_{gen} dV \quad (7.9)$$

Donde:

- \vec{q}_{cond} , es el vector de flujo térmico de conducción en $\frac{W}{m^2}$
- \vec{q}_{rad} , es el vector de flujo térmico de radiación en $\frac{W}{m^2}$
- $p_{gen} = \frac{P_{gen}}{V_1}$, es el calor volumétrico producido por fisión en $\frac{W}{m^3}$

Aplicando el teorema de la divergencia se puede pasar de una integral doble sobre la superficie de control a una integral triple sobre el volumen de control, ya que este está cerrado.

Para las siguientes expresiones se nota:

- $\nabla \vec{F}$ el operador divergencia del vector \vec{F} ,
- $\vec{\nabla} F$ el operador gradiente del escalar F
- ΔF el operador laplaciano del escalar F , siendo $\Delta F \equiv \nabla(\vec{\nabla} F)$

Por tanto, se tiene:

$$\iiint_{V_1} \frac{\partial \rho_{V_1} h}{\partial t} dV = \iiint_{V_1} -\nabla(\vec{q}_{cond} + \vec{q}_{rad}) + p_{gen,1} dV \quad (7.10)$$

Se puede pasar al balance diferencial siguiente:

$$\frac{\partial \rho_{V_1} h}{\partial t} = -\nabla(\vec{q}_{cond} + \vec{q}_{rad}) + p_{gen,1} \quad (7.11)$$

Se hacen varias simplificaciones para resolver el problema:

- Se desprecia el calor transferido por radiación $\vec{q}_{rad} = 0$,
- Se usa la ley de Fourier para modelar la transferencia de calor por conducción,
- Se calcula la entalpía del combustible como $h = C_p(T)T$, siendo $C_p(T)$ el calor específico del material en $\frac{J}{kgK}$,
- Se considera que la temperatura $T(t, r, \theta, z)$ es independiente del ángulo θ . La geometría ofrece una simetría angular por lo que esta hipótesis se puede aplicar.

La ley de Fourier indica que el calor por conducción por conducción es proporcional al gradiente de temperaturas.

$$\vec{q}_{cond} = -\lambda \cdot \vec{\nabla} T \quad (7.12)$$

Donde λ es la conductividad térmica en $\frac{W}{m^2K}$ que depende de la temperatura del material.

Aplicando esto al balance se tiene:

$$\frac{\partial \rho_{V_1} C_p T}{\partial t} = \nabla(\lambda \vec{\nabla} T) + p_{gen} \quad (7.13)$$

El sistema de coordenadas escogido es cilíndrico, cogiendo como origen del sistema de referencia el centro del cilindro en la base inferior. En el siguiente esquema se representa el sistema de coordenadas escogido:

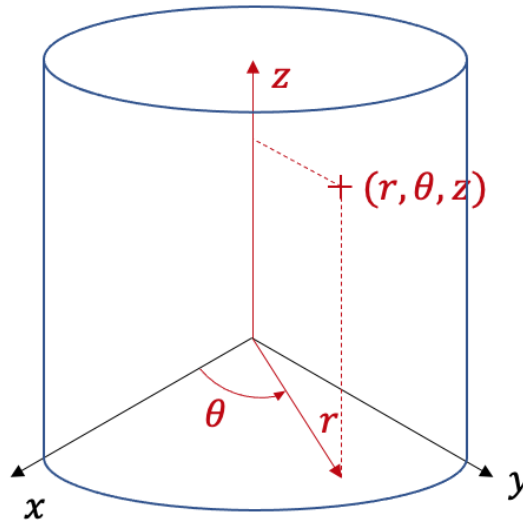


Figura 7.4 - Esquema de coordenadas cilíndricas

Como se ha dicho anteriormente, se considera que el problema es simétrico según el ángulo θ . Por otro lado, se desprecia el calor transferido axial en el volumen de control. Es decir, se tiene la misma temperatura en toda una celda axial. El diámetro del volumen V_1 es igual a 9.517 mm mientras que la altura del cilindro H es igual a 3673 mm . La altura del volumen es más de 100 veces más grande que el radio, luego se puede suponer que la altura del cilindro es infinita, y así despreciar la transferencia de calor en esa dirección. Así se resuelve el problema únicamente radialmente.

Aplicando coordenadas cilíndricas se obtiene:

$$\frac{\partial \rho_{V1} C_p(T) T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda(T) r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + p_{gen,1} \quad (7.14)$$

Se desarrolla el siguiente término de la ecuación.

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = r \frac{\partial \lambda}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda r \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \quad (7.15)$$

La conductividad térmica λ no depende directamente del radio r . Esta depende de la temperatura que a su vez depende del radio. Se puede por tanto aplicar la regla de la cadena. Se puede expresar el término de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = r \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left[\frac{\partial T}{\partial r} \right]^2 + \lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda r \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \quad (7.16)$$

Aplicando esto a la densidad y al calor específico se obtiene finalmente:

$$\left(\rho_{V1} C_p + \rho_{V1} T \frac{\partial C_p}{\partial T} + T C_p \frac{\partial \rho_{V1}}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left[\frac{\partial T}{\partial r} \right]^2 + \frac{\lambda}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + p_{gen} \quad (7.17)$$

Se tienen que definir las propiedades termodinámicas de los materiales. En primer lugar se pretende expresar la densidad de estos materiales. No se proporciona un método específico de

calcular las densidades menos para el Zircaloy-4. Se proporciona la densidad de este último, considerada constante e igual a $6.6 \frac{g}{cm^3}$

La densidad del dióxido de uranio varía con la temperatura, y esta variación se añade en el modelo. Se tienen dos fórmulas empíricas para aproximar la densidad del UO2 sólido en función de la temperatura.

Para $273 < T < 923$

$$\rho_{t,UO_2}(T) = \rho_0(9.9734 \times 10^{-1} - 9.802 \times 10^{-6}T - 2.705 \times 10^{-10}T^2 + 4.391 \times 10^{-13}T^3)^{-3} \quad (7.18)$$

Para $923 < T < 3120$

$$\rho_{t,UO_2}(T) = \rho_0(9.9672 \times 10^{-1} - 1.179 \times 10^{-5}T - 2.429 \times 10^{-9}T^2 + 1.219 \times 2T^3)^{-3} \quad (7.19)$$

Donde ρ_0 es la densidad del UO2 a 273K igual a $10.963 \frac{g}{cm^3}$ y T es la temperatura del UO2 en K.

La primera es válida para temperaturas entre 273 K y 923 K mientras que la segunda se puede usar de 923 K hasta el punto de fusión (se toma 3120 K en el estudio). Se estudia el comportamiento del reactor nuclear en funcionamiento normal, por lo tanto, nunca se llegará al punto de fusión de núcleo.

El *benchmark* proporciona la densidad del UO2 teórica para 20°C igual a $10.412 \frac{g}{cm^3}$. Además, se impone que el valor real de la densidad es igual a 95% del valor teórico. Por otro lado, se tiene *dishing* a nivel del pellet, lo que puede ocasionar pérdidas de masa por erosión. Se debe tener en cuenta 1.248% de pérdida de densidad por *dishing*. La densidad real del dióxido de uranio será entonces:

$$\rho_{UO_2}(T) = 0.95 \times (1 - 0.01248) \times \rho_{t,UO_2}(T) \quad (7.20)$$

Aplicando 7.20 se tiene que la densidad a 20°C es igual a $10.4579 \frac{g}{cm^3}$, lo cuál presenta un error relativo del 0.44%. Se coge por tanto esta expresión para modelar la densidad del UO2. En el siguiente gráfico se muestra la evolución de la densidad del UO2 en función de la temperatura.

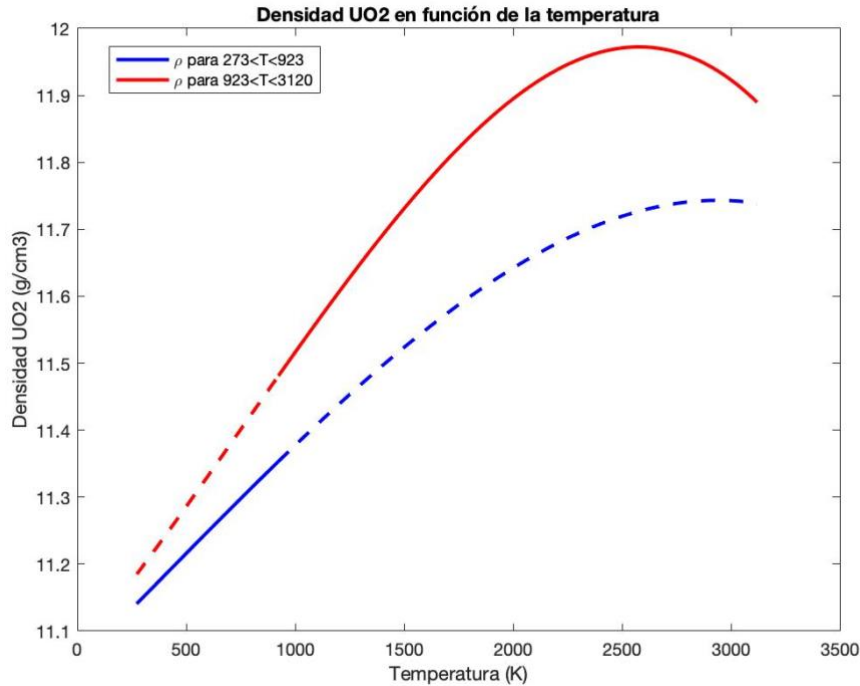


Figura 7.5 - Densidad del dióxido de uranio en función de la temperatura

Queda por expresar la densidad del Helio-4 en función de la temperatura. El Helio, gas noble monoatómico, tiene propiedades termodinámicas que se pueden asemejar a las de un gas perfecto para ciertas condiciones. Se pretende comparar las medidas experimentales con la ecuación de gases perfectos para temperaturas altas como las de un reactor nuclear.

Se sabe que el Helio está entre 10 y 20 bares para reactores PWR, y que la ecuación de gases perfectos indica:

$$\rho_{He} = \frac{M_{He} P_{He}}{RT_{He}} \quad (7.21)$$

Donde:

- P_{He} es la presión del Helio en Pa
- R es la constante de gases universal igual a $8.314 \frac{J}{mol K}$
- T_{He} es la temperatura en K
- M_{He} es la masa molar del Helio igual a $0.004 \frac{kg}{mol}$
- ρ_{He} es la densidad del Helio en $\frac{kg}{m^3}$

En el siguiente gráfico se compara la expresión de gases perfectos con datos experimentales de Helio-4. Se observa que tanto para 10 bar como para 20 bar, la ecuación de gases perfectos se aproxima a los datos experimentales. Ya que el Helio trabaja en ese rango de presiones en el reactor, se puede validar el uso de la hipótesis de gas perfecto. Se calcula el error máximo entre las dos curvas, experimental y teórica.

$$error = \max_i \left(\frac{|\rho_i^{GP} - \rho_i^{exp}|}{\rho_i^{exp}} \right) = 0.49\% \quad (7.22)$$

Donde:

- i , es el punto del gráfico
- ρ_i^{GP} , es la densidad del Helio expresada por la ley de gases perfectos
- ρ_i^{exp} , es la densidad del Helio con datos experimentales

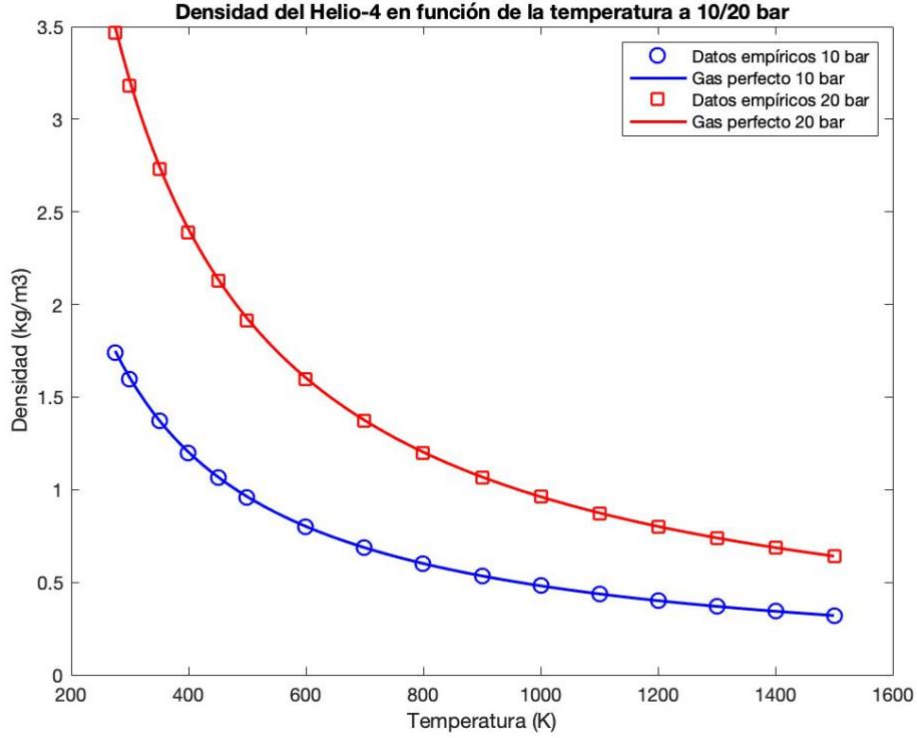


Figura 7.6 - Densidad del He-4 en función de la temperatura a 10 y 20 bares

Por otro lado, el *benchmark* proporciona las expresiones y valores de las conductividades térmicas y del calor específico en función de la temperatura para el combustible *UO2*, el *He* y el Zircaloy-4. La conductividad térmica viene dada en $\frac{W}{m K}$ y el calor específico en $\frac{J}{Kg K}$. La temperatura T viene dada en K .

$$\lambda_{v1}(T) \begin{cases} \lambda_{UO2}(T) = 1.05 + \frac{2150}{T - 73.15} \\ \lambda_{Zir}(T) = 7.51 + 2.09 \times 10^{-2}T - 1.45 \times 10^{-5}T^2 + 7.67 \times 10^{-9}T^3 \\ \lambda_{He}(espesor) = 10^4 \times espesor \end{cases} \quad (7.23)$$

$$C_{p,v1}(T) \begin{cases} C_{p,UO2}(T) = 162.3 + 3.038 \times 10^{-1}T - 2.391 \times 10^{-4}T^2 + 6.404 \times 10^{-8}T^3 \\ C_{p,Zir}(T) = 252.54 + 1.1474 \times 10^{-1}T \\ C_{p,He} = \frac{\gamma R}{(\gamma - 1)M_{He}} \end{cases} \quad (7.24)$$

Mientras que para el combustible y el *cladding* se proporcionan, para el Helio solo se proporciona la conductancia térmica independiente de la temperatura. Se tiene por tanto que multiplicar esta conductancia por el espesor de la capa de Helio para obtener la conductividad térmica. Por otro lado, al tomar como hipótesis que el Helio es un gas perfecto monoatómico, se puede expresar el calor específico $C_{p,He}$ en función de la constante universal de gases R y el ratio γ .

Se tiene que $R = 8.314 \frac{J}{mol K}$, $M_{He} = 0.004 \frac{kg}{mol}$, $\gamma = \frac{5}{3}$ ya que es un gas monoatómico.

7.2 Balance de masa en el volumen de control V_2

En segundo lugar, se plantea el balance de masa integral para el refrigerante que pasa por el volumen de control V_2 .

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{V_2} \rho dV = 0 \quad (7.25)$$

Aplicando el teorema de transporte de Reynolds se tiene:

$$\iiint_{V_2} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \iint_{S_2} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} dS = 0 \quad (7.26)$$

En este caso el volumen de control es un volumen material de velocidad \vec{v} igual a la velocidad del agua que pasa por el volumen de control. Se puede aplicar el teorema de divergencia, ya que se tiene un volumen de control cerrado:

$$\iiint_{V_2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) \right) dV = 0 \quad (7.27)$$

Se puede así obtener la ecuación diferencial del balance de masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad (7.28)$$

Se aplican coordenadas cilíndricas para el balance de masa. Se ha hecho la hipótesis de que no hay transferencia de masa ni de calor entre varillas. Luego la velocidad $\vec{v} = (0,0,w)^T$ del fluido solo tiene una componente w en la dirección z . El balance diferencial de masa para el volumen V_2 queda como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad (7.29)$$

7.3 Balance de energía en el volumen de control V_2

Finalmente se plantea un balance de energía en el volumen V_2 . A diferencia el volumen de control V_1 , en este caso se tiene un fluido que se desplaza en la dirección z . Luego se pueden tener tres tipos de transferencia de calor: conducción, radiación y convección.

Como para el balance de masa, se considera el volumen material V_2 de velocidad $\vec{v} = (0,0,w)^T$ en dirección z . Se tiene por tanto que tener en cuenta la derivada material del fluido.

Al tratarse de un PWR, se sabe que el agua es monofásica para este tipo de reactores, luego se puede plantear un balance de energía para un fluido monofásico. Para ello se aplica la primera ley de la termodinámica en el volumen de control V_2 . Se asume que el fluido es monofásico ya que en los reactores PWR el agua está en fase líquida en condiciones normales de trabajo.

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{V_2} \rho u dV = \iint_{S_2} [-\vec{q}_{ext} + (\bar{c} - p\bar{I}) \cdot \vec{v}] \cdot \vec{n} dS + \iiint_{V_2} \rho_k \vec{g} \cdot \vec{v} dV + \iiint_{V_2} p_{gen,2} dV \quad (7.30)$$

Donde:

- ρ es la densidad del agua en $\frac{kg}{m^3}$
- u es la energía interna del agua en $\frac{J}{m^3}$
- $\bar{\tau}$ es el tensor de tensiones de cizallamiento en Pa
- p es la presión del agua en Pa
- v es la velocidad del agua en $\frac{m}{s}$
- \vec{g} es el campo de fuerzas de volumen (gravitatorio) en $\frac{N m^3}{kg}$
- $p_{gen,2}$ es el calor volumétrico (según volumen de control 2) generado en el volumen de control (en este caso es nulo) en $\frac{W}{m^3}$
- \vec{q}_{ext} es el flujo de calor intercambiado con el exterior en $\frac{W}{m^2}$

Para el caso de estudio escogido se desprecian las pérdidas de energía por gravedad, ya que se supone que la bomba impulsa el agua de manera a compensar esa pérdida de presión. Además no se tienen en cuenta las pérdidas por fricción entre el agua y la pared de Zircaloy-4, luego se desprecia la energía perdida por fuerzas de cizallamiento. Al igual que para el primer balance de energía, se desprecia el calor por radiación. Aplicando la derivada material se tiene:

$$\frac{D}{Dt} \iiint_{V_2} dV \rho u dV = \iiint_{V_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho u dV + \iint_{S_2} \rho u \vec{v} \cdot \vec{n} dS \quad (7.31)$$

El primer término corresponde con la evolución transitoria de la energía interna del fluido mientras que el segundo es el calor convectivo. Aplicando las simplificaciones se obtiene:

$$\iiint_{V_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho u dV + \iint_{S_2} \rho u \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \iint_{S_2} [-\vec{q}_{ext} + \vec{p} \cdot \vec{v}] \cdot \vec{n} dS \quad (7.32)$$

La energía interna u se expresa en función de la entalpía h como $u = h - \frac{p}{\rho}$. Aplicando esto se tiene:

$$\iiint_{V_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho h dV + \iint_{S_2} (\rho h + p) \vec{v} \cdot \vec{n} dS = \iint_{S_2} [-\vec{q}_{ext} + \vec{p} \cdot \vec{v}] \cdot \vec{n} dS \quad (7.33)$$

Reagrupando y aplicando el teorema de la divergencia se tiene:

$$\iiint_{V_2} \frac{\partial}{\partial t} \rho h + \nabla(\rho h \vec{v}) dV = - \iint_{S_2} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n} dS \quad (7.34)$$

Se divide arbitrariamente el área del volumen de control en 4 superficies como se muestra en el esquema 7.6. Se cogen los vectores superficie hacia el exterior de sus superficies respectivas.

$$S_2 \vec{n} = S_{r,int} \vec{n}_{r,int} + S_{r,ext} \vec{n}_{r,ext} + S_{zA} \vec{n}_{zA} + S_{zB} \vec{n}_{zB} \quad (7.35)$$

Los vectores \vec{n}_{zA} y \vec{n}_{zB} tienen dirección axial, mientras que la dirección de los vectores $\vec{n}_{r,int}$ y $\vec{n}_{r,ext}$ dependen del radio y el ángulo.

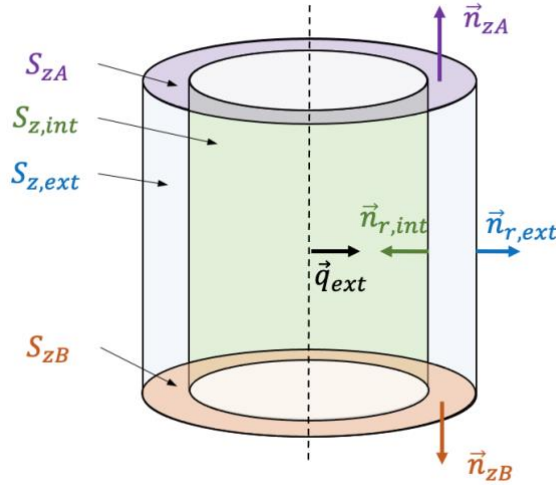


Figura 7.7 - Esquema de las superficies del modelo

Se ha tomado como hipótesis que no hay transferencia de calor entre diferentes *fuel assembly* por lo que el calor externo viene únicamente del interior, es decir, del volumen de control V_1 . Se observa que el calor externo se transfiere radialmente $\vec{q}_{ext} = (0, 0, q_{ext})^T$, por lo que su dirección es perpendicular a los vectores \vec{n}_{zA} y \vec{n}_{zB} . Ya que el calor viene del interior, este se transfiere únicamente por la superficie $S_{r,int}$. Se puede por tanto escribir:

$$\iint_{S_2} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n} dS = \iint_{S_{r,int}} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n}_{r,int} dS + \iint_{S_{r,ext}} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n}_{r,ext} dS + \iint_{S_{zA}} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n}_{zA} dS + \iint_{S_{zB}} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n}_{zB} dS \quad (7.36)$$

Con los criterios cogidos se observa que los vectores \vec{q}_{ext} y $\vec{n}_{r,int}$ tienen direcciones idénticas y sentidos opuestos, por lo que se tiene:

$$\iint_{S_2} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n} dS = \iint_{S_{r,int}} -q_{ext} dS \quad (7.37)$$

Aplicando coordenadas cilíndricas se tiene:

$$\iint_{S_2} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n} dS = -R_{clad,ext} \int_0^H \int_0^{2\pi} q_{ext} d\theta dz \quad (7.38)$$

Como se ha mencionado anteriormente, las ecuaciones en el volumen de control V_1 son radiales, por lo que las variables dependen únicamente del radio y del tiempo. El calor externo es el calor para $r = R_{clad,int}$, por lo que solo depende el tiempo. Se puede por tanto considerar que es constante espacialmente. No se integra la dirección axial ya que se puede pasar el balance integral a uno diferencial.

$$\iint_{S_2} \vec{q}_{ext} \cdot \vec{n} dS = -2\pi R_{clad,ext} \int_0^H q_{ext} dz \quad (7.39)$$

El agua se desplaza en una única dirección z , luego la velocidad \vec{v} tiene una sola componente $(0, 0, w)$. Por tanto, las variables dependen únicamente de la dirección z y del tiempo. Las integrales volumétricas de una función f que solo dependen de z se pueden reescribir de la siguiente manera aplicando coordenadas cilíndricas.

$$\iiint_{V_2} f(z) dV = \int_0^H \int_{R_{clad,int}}^{R_{clad,ext}} \int_0^{2\pi} f(z) r d\theta dr dz \quad (7.40)$$

$$\iiint_{V_2} f(z) dV = \pi(R_{agua}^2 - R_{clad,ext}^2) \int_0^H f(z) dz \quad (7.41)$$

El balance integral queda como:

$$\pi(R_{agua}^2 - R_{clad,ext}^2) \int_0^H \left[\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho h w) \right] dz = 2\pi R_{clad,ext} \int_0^H q_{ext} dz \quad (7.42)$$

Ya que todos los términos tienen la misma integral con respecto a z , se pasa el balance a uno diferencial.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho h w) = C q_{ext} \quad (7.43)$$

Donde $C = \frac{2R_{clad,ext}}{R_{agua}^2 - R_{clad,ext}^2}$ es una constante.

El calor externo q_{ext} del reactor que se transfiere al moderador. En este caso se trata de convección externa forzada, ya que el flujo pasa alrededor del reactor nuclear, y el flujo de agua adquiere cierta velocidad gracias a una bomba. Por la ley de enfriamiento de Newton se tiene:

$$\vec{q}_{ext} = h_{conv}(T_{pared} - \overline{T_{agua}})\vec{n}_{r,ext} \quad (7.44)$$

Donde,

- h_{conv} es el coeficiente de convección del agua en $\frac{W}{m^2K}$
- $\overline{T_{agua}}$ es la temperatura del agua media que pasa por el reactor en K . La temperatura del agua depende de z , luego se coge como simplificación la media espacial.
- T_{pared} , es la temperatura de la superficie en contacto con el agua en K . En este caso se trata de la temperatura del reactor para $r = R_{clad,ext}$. Esta temperatura depende por tanto del balance de entalpía del volumen de control V_1 .
- $\vec{n}_{r,ext}$, es el vector unitario descrito en el esquema 7.6.

Para poder calcular este calor es necesario conocer el coeficiente de convección h_{conv} . Para calcularlo se evalúan las propiedades del agua a la temperatura de film (o de película) $T_f = \frac{T_{pared} + T_{\infty}}{2}$. Se necesita conocer el valor de los tres números adimensionales para el cálculo del coeficiente de convección.

El número de Nusselt Nu expresa la relación entre el calor transferido por conducción y por convección. Un valor elevado expresa que el flujo tiene una gran contribución al intercambio de calor. Depende del coeficiente de convección, de la longitud H y el coeficiente de transmisión de calor del fluido.

$$Nu = \frac{h_{conv}H}{\lambda} \quad (7.45)$$

Existen varias correlaciones para el cálculo del número de Nusselt dependiendo del tipo de convección y la geometría del sistema. Para modelar la transferencia de calor entre el agua y la pared, se modela el flujo de agua como un flujo interno entre 4 varillas. Se saca una sección del flujo transversal S_{tr} como en la figura 7.7. El *benchmark* proporciona el *pitch* entre varillas que es igual a $p = 12.655mm$. A partir de ahí se puede calcular la sección S_{tr} y el perímetro P_{tr} .

$$S_{tr} = p^2 - \pi R_{clad,ext}^2 \quad (7.46)$$

$$P_{tr} = 4p - 2\pi R_{clad,ext} \quad (7.47)$$

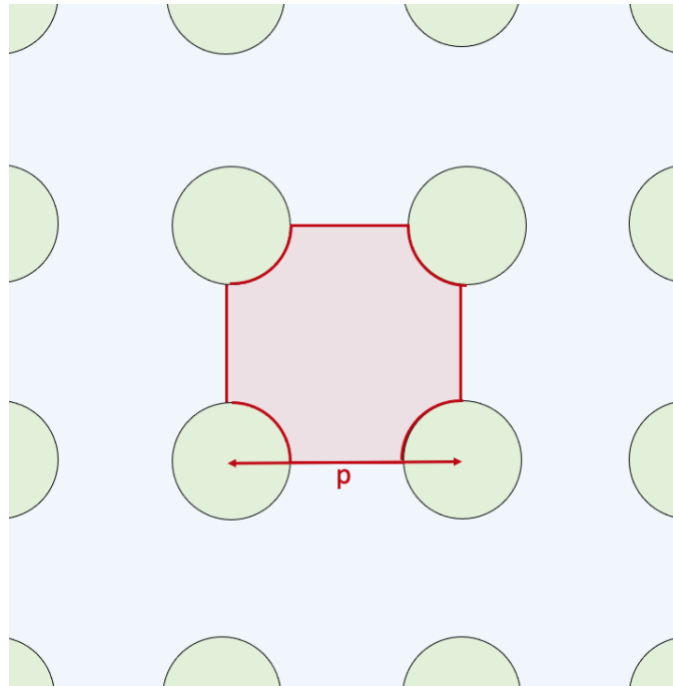


Figura 7.8 - Esquema de la sección transversal para el cálculo número de Nusselt

La correlación de Dittus-Boelter permite expresar el número de Nusselt en función del número de Reynolds y el número de Prandtl para la geometría estudiada. Esta correlación es válida únicamente para convección forzada interna turbulenta y cumpliendo ciertos criterios que se comprueban a continuación.

El número de Reynolds Re expresa la fuerzas de inercia sobre las fuerzas viscosas. Este número adimensional permite afirmar si un flujo es laminar o turbulento. Para convección interna, se tiene un flujo laminar hasta $Re < 2300$ aproximadamente para luego pasar a ser turbulento. El número adimensional depende la velocidad inicial del fluido w_∞ , del diámetro hidráulico D_H (en el caso estudiado es la altura del cilindro) y la viscosidad cinemática ν . Todas las variables expresadas en unidades internacionales.

$$Re = \frac{\rho w_\infty D_H}{\mu} = \frac{w_\infty D_H}{\nu} \quad (7.48)$$

El diámetro hidráulico se puede calcular a partir del área transversal y del perímetro de la sección.

$$D_H = \frac{4S_{tr}}{P_{tr}} = 17.183 \text{ mm} \quad (7.49)$$

La velocidad inicial del flujo agua se puede calcular a partir de las condiciones dadas por el *benchmark*. Se conoce el caudal másico de entrada $G_{agua,total}$ y la superficie el agua en una varilla S_{agua} .

$$w_\infty = \frac{\dot{m}_{agua,total}}{n_{fa}n_{varillas}S_{agua}\rho_{agua}(T = 286^\circ\text{C})} = 3.294 \text{ m/s} \quad (7.50)$$

El número de Prandtl Pr expresa la relación entre la difusión de cantidad de movimiento por viscosidad y la difusión térmica. Este depende de la difusividad térmica del fluido y su viscosidad cinemática.

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (7.51)$$

La correlación de Dittus-Boelter permite expresar el número de Nusselt en función del número de Reynolds y el número de Prandtl.

$$Nu = 0.023(Re_H)^{0.8}(Pr)^n \quad (7.52)$$

Donde n vale 0.4 si el fluido se calienta y 0.3 si el fluido se enfría. En el caso estudiado se coge $n = 0.4$ ya que el fluido es el refrigerante del sistema.

Para que esta aproximación sea válida, se debe tener un flujo interno turbulento, y $Re > 10^5$. Además, el número de Prandtl tiene que estar en un intervalo concreto $0.7 < Pr < 160$. Finalmente, se tiene que respetar $\frac{H}{D_H} > 10$. En el caso estudiado $\frac{H}{D_H} = 290 > 10$, luego la condición queda validada. Queda por determinar si se respetan los criterios para los números de Reynolds y Prandtl.

La temperatura de film depende de la temperatura de pared y la del agua. En condiciones normales de funcionamiento la temperatura de entrada del agua es la temperatura mínima, ya que el agua se calienta intercambiando calor con el reactor. La temperatura del reactor es mayor que la del agua. La temperatura de film mínima sería entonces la temperatura de entrada del agua $T_{inlet} = 286^\circ\text{C}$. Las propiedades del agua para el cálculo de los números adimensionales se hacen a partir de la temperatura de film.

Sin embargo, estas últimas varían considerablemente al pasar la temperatura de saturación ya que se trata de vapor en vez de agua líquida. Por ello, se limita la temperatura de film a la temperatura de saturación, ya que en un reactor PWR el agua siempre está en estado líquido.

Se presenta en los siguientes gráficos las evoluciones de los números adimensionales de Reynolds y de Prandtl en función de temperaturas en el rango estudiado.

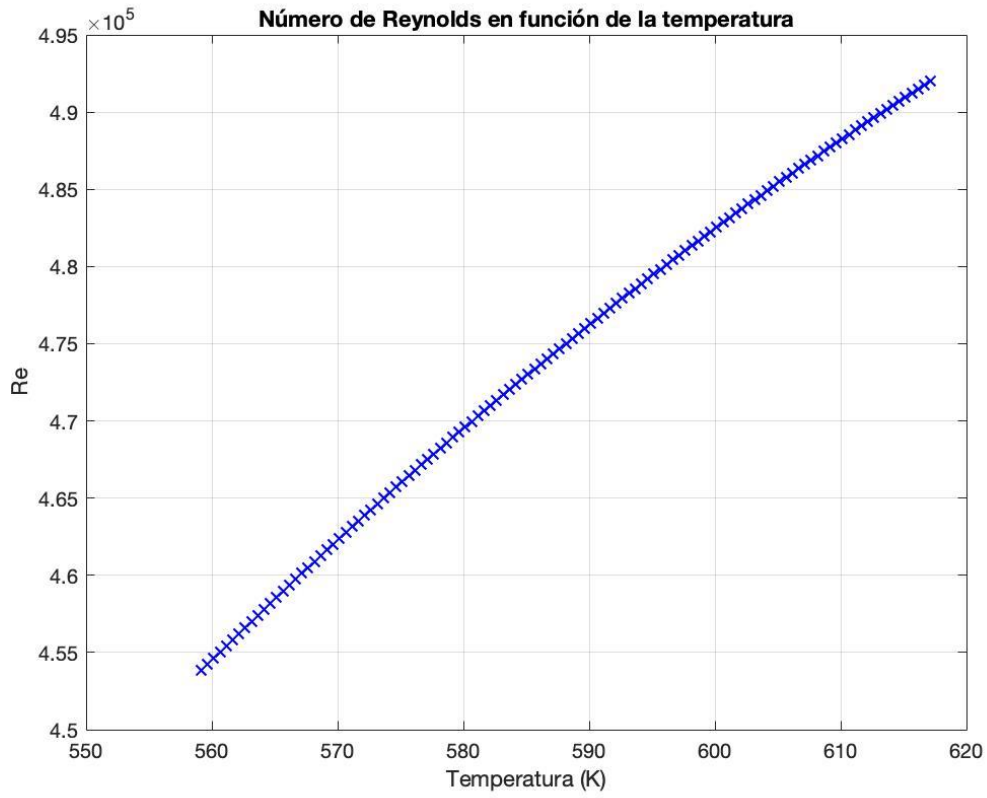


Figura 7.9 - Número de Reynolds en función de la temperatura del agua

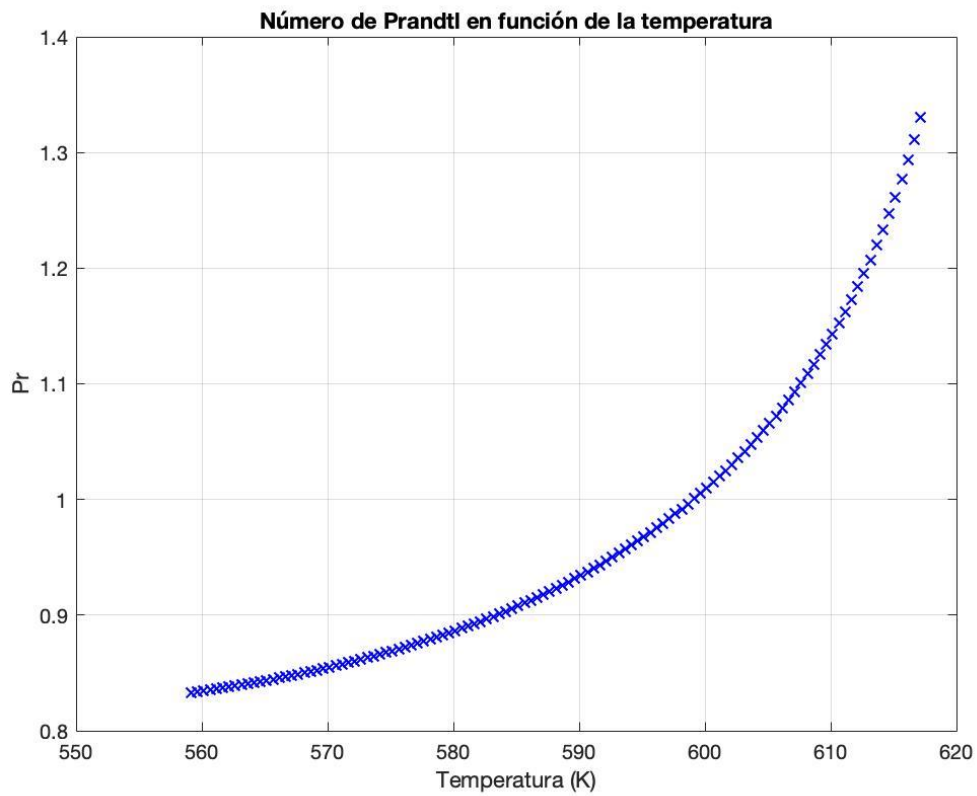


Figura 7.10 - Número de Prandtl en función de la temperatura del agua

Se puede observar que el número de Reynolds mínimo es superior a 10^5 y que el número de Prandtl está siempre entre 0.7 y 160 en el rango de temperaturas estudiado. Se puede por tanto usar la expresión 7.52 para el cálculo del número de Nusselt ya que todas las condiciones quedan verificadas. El coeficiente de convección se escribe en función del número de Nusselt, por lo que se tiene:

$$h_{conv} = \frac{\lambda}{H} 0.023 (Re_H)^{0.8} (Pr)^{0.4} \quad (7.53)$$

En el gráfico 7.10 se muestra el valor del coeficiente de convección en función de la temperatura del agua. Se coge el valor medio del coeficiente de convección para la resolución del modelo termo-hidráulico $h_{conv} = 2.399 \times 10^4 W/Km^2$

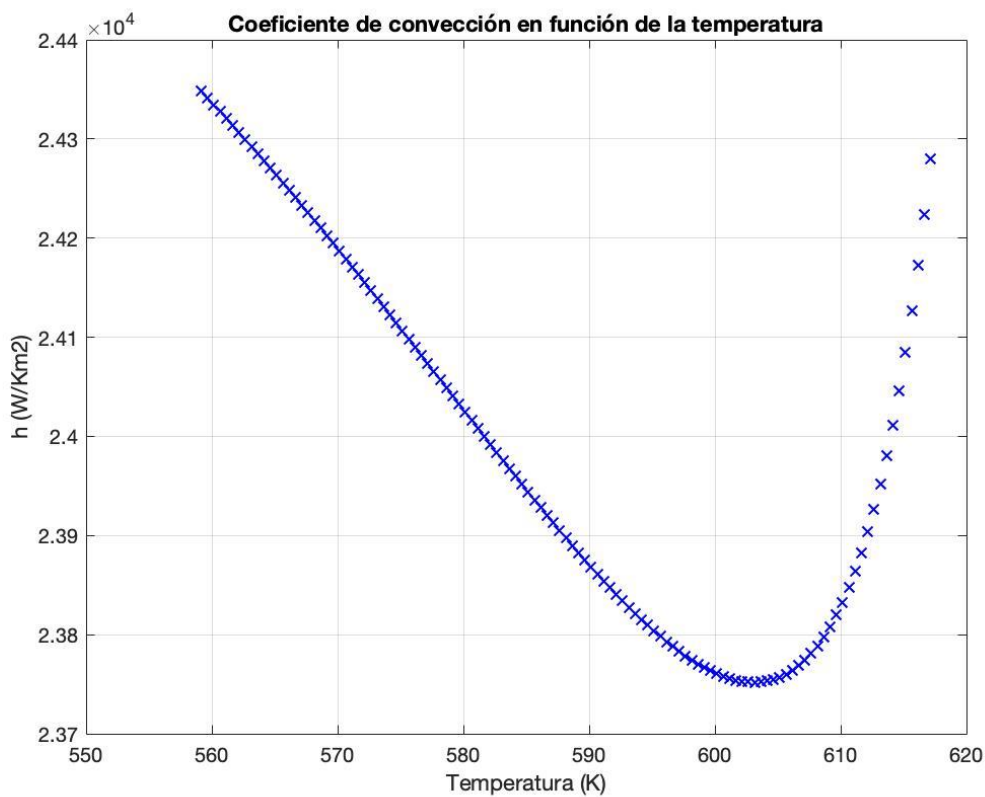


Figura 7.11 - Coeficiente de convección del agua en función de la temperatura

7.4 Propiedades termodinámicas del agua

La entalpía del agua no es la variable termodinámica usada en el *benchmark* para calcular las variaciones de sección eficaz. Para ello se debe tener la temperatura del agua T_{agua} . Para ello se usarán tablas termodinámicas del agua puesto que, al ser un fluido monofásico, con dos variables termodinámicas es posible definir el estado del punto y encontrar el resto de las variables. La presión del reactor es constante e igual a $P_{reactor} = 155 bar$. Luego las variables termodinámicas presentes en la ecuación (entalpía y densidad) son función de la temperatura y la presión. La presión siendo constante, se puede expresar estas variables únicamente en función de la temperatura del agua.

Se pretende aproximar la densidad y la entalpía en función de la temperatura con funciones polinómicas a partir de los datos empíricos de *XSteam*. Para realizar esta aproximación se usa el método de mínimos cuadrados. Las funciones *polyfit* y *polyval* de *MATLAB* permiten realizar este ajuste polinómico. Se hace a partir de 117 puntos en el rango de temperaturas estudiado.

A 155 bar la temperatura de saturación es de $T_{sat} = 344.7916^{\circ}C$. Según el benchmark la temperatura de entrada del agua al reactor es $T_{inlet} = 286^{\circ}C$. Se ajustan polinomios de segundo grado a los datos de *XSteam* en el rango de temperaturas de funcionamiento normal del reactor (entre T_{inlet} y T_{sat}).

Las expresiones polinómicas de la entalpía y la densidad en función de la temperatura se muestran a continuación.

$$h(T_a) = 2.341 \times 10^{-2} T_a^2 - 21.455 T_a + 5944.5 \quad (7.54)$$

$$\rho(T_a) = -1.946 \times 10^{-2} T_a^2 + 20.317 T_a - 4523.7 \quad (7.55)$$

Donde T es la temperatura del agua en K , h la entalpía del agua en $\frac{kJ}{kg}$ y ρ la densidad del agua en $\frac{kg}{m^3}$.

En las siguientes gráficas se muestra la comparación de los datos experimentales de *XSteam* y los polinomios ajustados. No se muestra la totalidad de puntos de los datos de *XSteam* para visualizar mejor los gráficos.

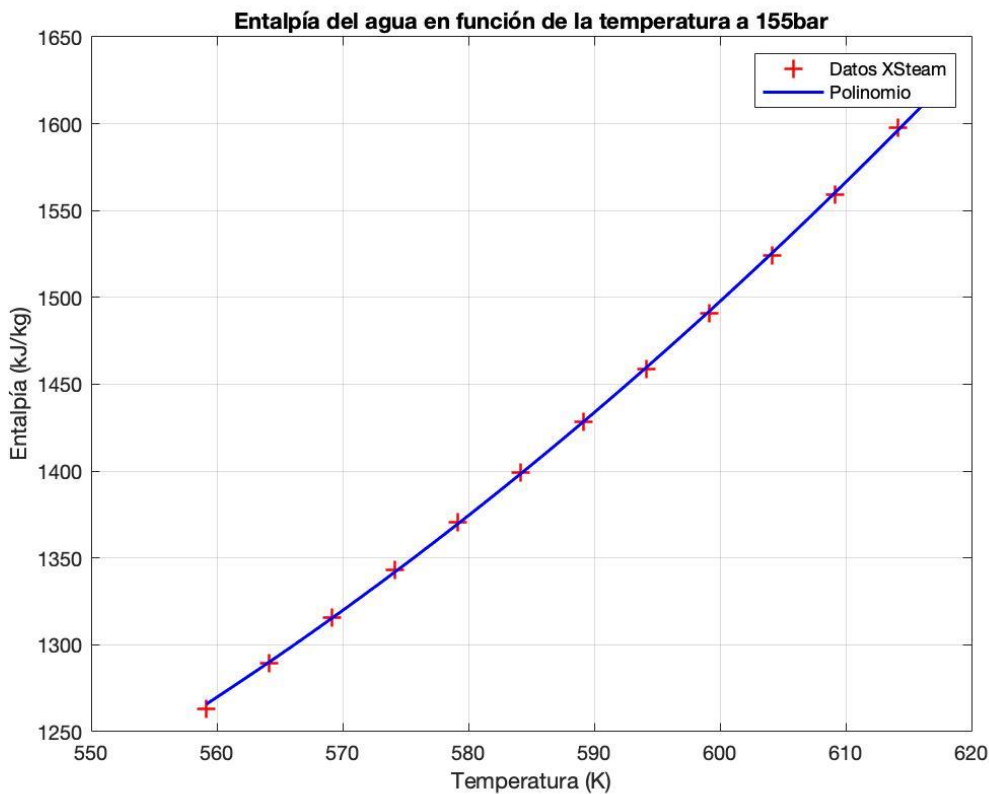


Figura 7.12 - Entalpía del agua en función de la temperatura a 155bar

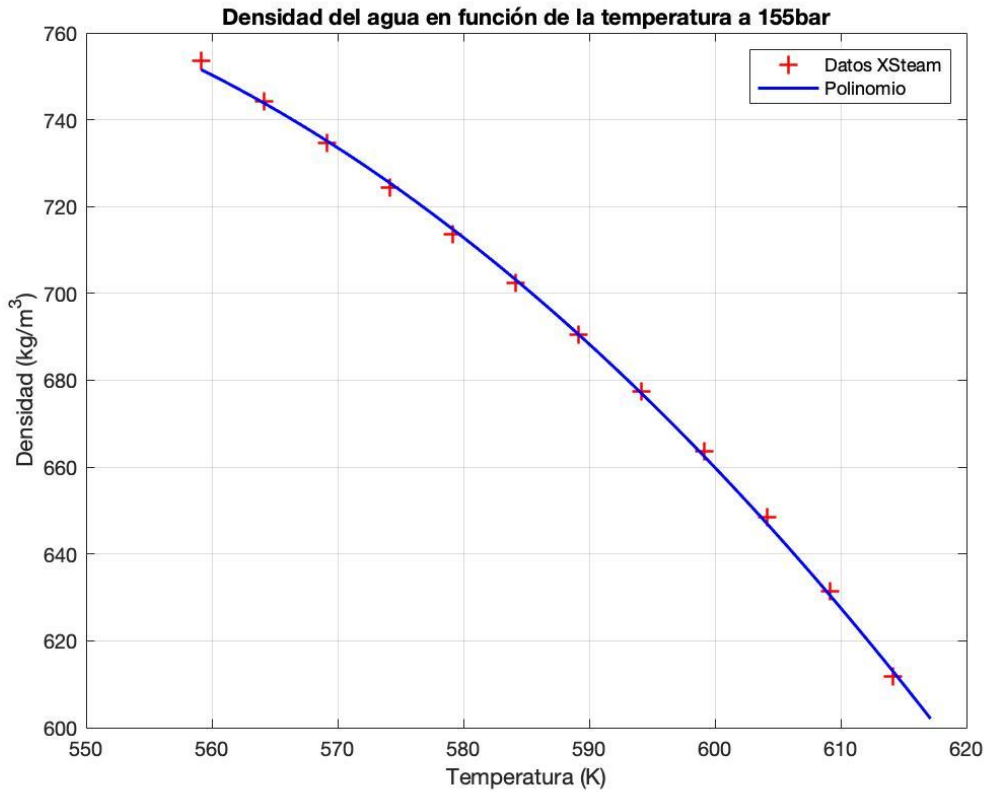


Figura 7.13 - Densidad del agua en función de la temperatura a 155bar

Se calcula el error máximo en los dos casos, los cuáles son menores a 1%

$$error_h = \max_i \left(\frac{|h_i^{GP} - h_i^{exp}|}{\rho_i^{exp}} \right) = 0.28\% \quad (7.56)$$

$$error_\rho = \max_i \left(\frac{|\rho_i^{GP} - \rho_i^{exp}|}{\rho_i^{exp}} \right) = 0.64\% \quad (7.57)$$

Se pueden volver a expresar las ecuaciones 7.50 y 7.51 con las funciones polinómicas para la densidad y la entalpía. Para ello se usa la regla de la cadena.

$$\frac{\partial \rho}{\partial T_a} \frac{\partial T_a}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial T_a} \frac{\partial T_a}{\partial z} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (7.58)$$

$$\left(h \frac{\partial \rho}{\partial T_a} + \rho \frac{\partial h}{\partial T_a} \right) \frac{\partial T_a}{\partial t} + w \left(h \frac{\partial \rho}{\partial T_a} + \rho \frac{\partial h}{\partial T_a} \right) \frac{\partial T_a}{\partial z} + \rho h \frac{\partial w}{\partial z} = Ch_{conv} (T_{pared} - \bar{T}_a) \quad (7.59)$$

Se adjunta el código para tanto el cálculo del número de Nusselt como para el cálculo de las propiedades del agua en el repositorio [github](https://github.com/luisbuenofillon/TFM.git) incluido en las referencias <https://github.com/luisbuenofillon/TFM.git> (Bueno Fillon 2022)

7.5 Condiciones iniciales y de contorno

El modelo termo-hidráulico consta por tanto de 3 ecuaciones y 3 incógnitas (T, w, T_a).

$$\left(\rho_{v1} C_p + \rho_{v1} T \frac{\partial C_p}{\partial T} + T C_p \frac{\partial \rho_{v1}}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \lambda}{\partial T} \left[\frac{\partial T}{\partial r} \right]^2 + \frac{\lambda}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + p_{gen}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial T_a} \frac{\partial T_a}{\partial t} + w \frac{\partial \rho}{\partial T_a} \frac{\partial T_a}{\partial z} + \rho \frac{\partial w}{\partial z} = 0$$

$$\left(h \frac{\partial \rho}{\partial T_a} + \rho \frac{\partial h}{\partial T_a} \right) \frac{\partial T_a}{\partial t} + w \left(h \frac{\partial \rho}{\partial T_a} + \rho \frac{\partial h}{\partial T_a} \right) \frac{\partial T_a}{\partial z} + \rho h \frac{\partial w}{\partial z} = Ch_{conv}(T_{pared} - \bar{T}_a)$$

La ecuación 7.17 es una ecuación diferencial temporal de primer orden y espacial de segundo orden. Al tener una derivada temporal de primer orden se tiene que plantear una condición inicial en el instante $t = 0$.

Por otro lado se tiene el operador laplaciano, por lo que se opta por coger dos condiciones de contorno de Neumann: una para $r = R_{clad,ext}$ y otra para $r = 0$

Al tener un problema simétrico según el ángulo θ , se tiene que la función temperatura $T(r, t)$ es una función par con respecto al radio, es decir que se tiene la misma temperatura independientemente del ángulo. Se tiene:

$$\forall t \in [0, +\infty[, \quad T(r, t) = T(-r, t) \quad (7.60)$$

La derivada de una función par es una función impar, luego se puede tener una condición de Neumann.

$$\frac{\partial T(r, t)}{\partial r} = - \frac{\partial T(-r, t)}{\partial r} \quad (7.61)$$

Esto implica que la temperatura máxima se encuentra en el centro del reactor, y que se va disminuyendo a lo largo de la dirección radial. La derivada de la temperatura se anula por tanto en el centro del reactor, lo que implica que el calor es nulo en ese punto. Esto tiene sentido ya que no hay transferencia de calor a través el centro del reactor, sino que este se disipa siendo el centro el origen. La condición de contorno se puede expresar como:

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (7.62)$$

Por otro lado, se considera que el calor se disipa por convección en contacto con el agua para $r = R_{clad,ext}$. Por tanto, se tiene que:

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_{clad,ext}} = h_{conv}(T(R_{clad,ext}, t) - \bar{T}_a(t)) \quad (7.63)$$

Como se ha mencionado anteriormente, la temperatura del agua depende de la dirección z , ya que los balances para el volumen de control V_2 se han planteado en esa única dirección. Por tanto, se tiene que simplificar la condición de contorno cogiendo la temperatura media $\bar{T}_a(t)$ a lo largo de la dirección z para el instante t .

Finalmente, en el instante inicial la temperatura es igual a la temperatura en estado estacionario T^0 .

$$\left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (7.64)$$

Finalmente se tienen las 3 condiciones iniciales y de contorno siguientes:

$$\left\{ \begin{array}{l} T(r, 0) = T^0(r) \\ \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \\ \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R_{clad,ext}} = h_{conv}(T(R_{clad,ext}, t) - \bar{T}_a(t)) \end{array} \right.$$

Por otro lado se tienen las ecuaciones 7.54 y 7.55. En los dos casos se tiene una ecuación diferencial temporal y espacial de primer orden. Se requiere por tanto una condición inicial temporal y una condición de contorno. En los dos casos se tendrá la condición inicial igual a la solución estacionaria. Finalmente, quedan las condiciones en $z = 0$. Para ello, el benchmark proporciona la temperatura del agua de entrada T_{inlet} que se considera constante.

La velocidad del fluido w_∞ a la entrada del reactor se ha calculado previamente para el cálculo del número de Reynolds.

Así se tienen las siguientes condiciones iniciales y de contorno para el volumen de control V_2 :

$$T_a(z, 0) = T_a^0 \quad (7.65)$$

$$T_a(0, t) = T_{inlet} \quad (7.66)$$

$$w(z, 0) = w^0 \quad (7.67)$$

$$w(0, t) = w_\infty \quad (7.68)$$

El modelo termo-hidráulico queda así definido y consta de 3 ecuaciones diferenciales, 3 condiciones iniciales y 4 condiciones de contorno.

8 Régimen estacionario

8.1 Ecuaciones del modelo estacionario

Se pretende estudiar el modelo estacionario de este sistema. Las ecuaciones del modelo termo-hidráulico para el régimen permanente se escriben como:

$$\lambda' \left[\frac{dT}{dr} \right]^2 + \frac{\lambda}{r} \frac{dT}{dr} + \lambda \frac{d^2T}{dr^2} + p_{gen} = 0 \quad (8.1)$$

$$w\rho' \frac{dT_a}{dz} + \rho \frac{dw}{dz} = 0 \quad (8.2)$$

$$w(h\rho' + \rho h') \frac{dT_a}{dz} + \rho h \frac{dw}{dz} = Ch_{conv}(T_{pared} - \bar{T}_a) \quad (8.3)$$

Siendo,

- $\lambda' = \frac{d\lambda}{dT}$, la derivada con respecto de la temperatura del núcleo de la conductividad térmica en el volumen de control V_1 ,
- $h' = \frac{\partial h}{\partial T_a}$, la derivada con respecto de la temperatura del agua de la entalpía en el volumen de control V_2 ,
- $\rho' = \frac{d\rho}{dT_a}$, la derivada con respecto de la temperatura del agua de la densidad en el volumen de control V_2 .

Ninguna variable es dependiente del tiempo, solo se tiene la temperatura del núcleo dependiente del radio, y la temperatura y la velocidad del agua dependiente de la dirección axial. Por lo tanto, todas las derivadas de las incógnitas de la ecuación ya no son parciales.

Se conocen las expresiones de $\lambda(T)$, $h(T_a)$ y $\rho(T_a)$ por lo que se puede calcular el valor de sus derivadas.

$$\lambda'_{V1}(T) \left\{ \begin{array}{l} \lambda'_{UO2}(T) = -\frac{2150}{(T - 73.15)^2} \\ \lambda'_{Zir}(T) = 2.09 \times 10^{-2} - 2.9 \times 10^{-5}T + 23.01 \times 10^{-9}T^2 \\ \lambda'_{He} = 0 \end{array} \right. \quad (8.4)$$

$$h'(T_a) = 4.682 \times 10^{-2}T_a - 21.455 \quad (8.5)$$

$$\rho'(T_a) = -3.892 \times 10^{-2}T_a + 20.317 \quad (8.6)$$

Se tiene por tanto que resolver el sistema de ecuaciones del modelo termo-hidráulico. Al tener en cuenta algunos parámetros dependientes de la temperatura como la entalpía, la densidad o la conductividad térmica, las ecuaciones no son lineales. Esto complica la resolución analítica de las ecuaciones, por lo que se pretende resolverlo con el método de diferencias finitas.

Para ello se reescriben las ecuaciones en función de los parámetros $\alpha_1(T)$, $\alpha_2(T)$, $\alpha_3(T)$, $\beta_1(T_a)$, $\beta_2(T_a)$, $\gamma_1(T_a)$, $\gamma_2(T_a)$, $\gamma_3(T_a, w)$.

$$\alpha_1(T) \frac{d^2 T}{dr^2} + \alpha_2(T) \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} + \alpha_3(T) \left[\frac{dT}{dr} \right]^2 + \alpha_4 = 0 \quad (8.7)$$

$$\beta_1(T_a) w \frac{dT_a}{dz} + \beta_2(T_a) \frac{dw}{dz} = 0 \quad (8.8)$$

$$\gamma_1(T_a) w \frac{dT_a}{dz} + \gamma_2(T_a) \frac{dw}{dz} + \gamma_3(T_a, w) = 0 \quad (8.9)$$

Donde:

- $\alpha_1(T) = \lambda(T)$
- $\alpha_2(T) = \lambda(T)$
- $\alpha_3(T) = \lambda'(T)$
- $\alpha_4(T) = p_{gen}$
- $\beta_1(T_a) = \rho'(T_a)$
- $\beta_2(T_a) = \rho(T_a)$
- $\gamma_1(T_a) = h(T_a)\rho'(T_a) + \rho(T_a)h'(T_a)$
- $\gamma_2(T_a) = \rho(T_a)h(T_a)$
- $\gamma_3(T_a, w) = -Ch_{conv}(T_{pared} - \bar{T}_a)$

Las condiciones iniciales no son necesarias para la resolución de este sistema ya que se trata del sistema estacionario. Sin embargo, se tienen que tener en cuenta las condiciones de contorno. Para el régimen estacionario las condiciones de contorno son:

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (8.10)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_{clad,ext}} = h_{conv}(T(R_{clad,ext}) - \bar{T}_a) \quad (8.11)$$

$$T_a(0, t) = T_{inlet} \quad (8.12)$$

$$w(0) = w_\infty \quad (8.13)$$

8.2 Diferencias finitas

Para resolver el régimen estacionario se tiene que resolver el sistema formado por las ecuaciones diferenciales 8.7, 8.8 y 8.9. Sin embargo, los coeficientes de la ecuación diferencial dependen de las incógnitas, lo que hace que se trate de ecuaciones diferenciales no lineales. Esto complica el proceso de resolución analítica, por lo que se pretende resolver el sistema discretizando el problema. Para ello se usa el método de diferencias finitas con un mallado uniforme.

El método de diferencias finitas consiste en aproximar las derivadas espaciales y temporales con el teorema de Taylor-Young. Este último indica que para una función f (n veces diferenciable en un intervalo real I), para todo punto a que sea punto interior de I :

$$f(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^k(a)}{k!} (x-a)^k + o((x-a)^n), \quad x \rightarrow a \quad (8.14)$$

Esto se puede reescribir para un paso h con el cambio de variable $h = x - a$

$$f(a + h) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(a)}{k!} h^k + o(h^n), \quad h \rightarrow 0 \quad (8.25)$$

Se observa que esto solo es cierto si $h \rightarrow 0$, luego cuanto menor sea el paso, menor será el error cometido. Por tanto, para un paso h pequeño se puede aproximar la función f alrededor del punto interior a como:

$$f(a + h) \sim \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(a)}{k!} h^k \quad (8.36)$$

Aplicando esto al primer orden y segundo orden se obtienen unas aproximaciones para las derivadas primeras y segundas. Estas se pueden expresar de diferentes formas: progresiva, regresiva o centrada. Para la derivada de segundo orden se necesitan necesariamente dos puntos para poder aplicar cualquiera de estas aproximaciones. Se escoge la diferencia centrada para las derivadas de segundo orden.

$$f''(a) \sim \frac{f(a + h) - 2f(a) + f(a - h)}{h^2} \quad (8.47)$$

Para las derivadas primeras las diferencias progresivas y regresivas presentan la ventaja de tan solo requerir un punto inicial mientras que la centrada necesita dos: uno delante y otro detrás del punto estudiado. Ya que en la ecuación 8.7 se tiene una derivada segunda y se necesitan necesariamente dos puntos, se usa la diferencia centrada para las derivadas de primer orden .

$$f'(a) \sim \frac{f(a + h) - f(a - h)}{2h} \quad (8.58)$$

Sin embargo, si en la ecuación estudiada el orden más alto es el primer orden (como para 8.8 y 8.9), se opta por una diferencia retrasada ya que así se requiere un único punto inicial. Se opta por la retrasada porque la condición de contorno proporciona el punto inicial y no el final.

$$f'(a) \sim \frac{f(a) - f(a - h)}{h} \quad (8.69)$$

Cada una de las ecuaciones es unidimensional e independiente del tiempo. En particular la ecuación 8.7 es radial, y va de $-R_{clad,ext}$ a $R_{clad,ext}$. Se realiza por tanto una discretización uniforme en $n_r + 1$ puntos. Así el paso espacial será:

$$\Delta r = \frac{2R_{clad,ext}}{n_r + 1} \quad (8.20)$$

Se nota el punto $T_i = T(r = i\Delta r)$ siendo i un número entero entre 0 y $n_r + 1$. Esto se puede aplicar igualmente para las ecuaciones 8.8 y 8.9 que son a su vez unidimensionales, pero en este caso en la dirección axial. Se discretiza uniformemente cogiendo $n_z + 1$ puntos a lo largo de la altura H . El paso espacial será igual a:

$$\Delta z = \frac{H}{n_z + 1} \quad (8.21)$$

De la misma forma, las variables se notan como $T_{a,j} = T_a(z = j\Delta z)$ y $w_j = w(z = j\Delta z)$ y j siendo un número entero entre 0 y n_z

Aplicando diferencias finitas a la ecuación 8.9 se obtienen $n_r - 1$ ecuaciones. $1 \leq i \leq n_r - 1$

$$\alpha_1(T_i) \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta r^2} + \alpha_2(T_i) \frac{1}{r_i} \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta r} + \alpha_3(T_i) \left(\frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta r} \right)^2 + \alpha_4 = 0 \quad (8.22)$$

Para completar el modelo se requieren dos ecuaciones más, una para $i = 0$ y para $i = n_r$. Estas dos ecuaciones son las condiciones de contorno. Para el punto en el centro del reactor se aplica la condición de Neumann 8.10 para $r = 0$. La condición indica que por simetría $T_1 = T_{-1}$, ya que discretizando la condición de contorno se tiene:

$$\frac{T_1 - T_{-1}}{2\Delta r} = 0 \quad (8.23)$$

Cogiendo la ecuación 8.22 para $i = 0$ y aplicando la condición de simetría se obtiene:

$$T_0 = T_1 \quad (8.24)$$

Para $i = n_r$ se aplica directamente la condición de Neumann 8.11 para $r = R_{clad,ext}$. Sin embargo se usa una diferencia retrasada para la derivada primera, ya que se trata de una condición de contorno y no se puede usar una diferencia centrada.

$$-\lambda(T_{nr}) \frac{T_{nr} - T_{nr-1}}{\Delta r} = h_{conv}(T_{nr} - \bar{T}_a) \quad (8.25)$$

Por otro lado, aplicando diferencias finitas a la ecuación 8.8 se obtienen n_z ecuaciones.

$$\beta_1(T_{a,j}) w_j \frac{T_{a,j} - T_{a,j-1}}{\Delta z} + \beta_2(T_{a,i}) \frac{w_j - w_{j-1}}{\Delta z} = 0, \quad 1 \leq j \leq n_z \quad (8.26)$$

Al igual que para las ecuaciones radiales, se tienen que tener $n_z + 1$ ecuaciones en total. Se añade la condición de contorno que da el valor de $T_{a,0}$ y w_0

$$T_{a,0} = T_{inlet} \quad (8.27)$$

De la misma manera se obtienen n_z ecuaciones para la ecuación 8.9 y una condición de contorno para tener $n_z + 1$ ecuaciones en total.

$$\gamma_1(T_{a,j}) w_j \frac{T_{a,j} - T_{a,j-1}}{\Delta z} + \gamma_2(T_{a,j}) \frac{w_j - w_{j-1}}{\Delta z} - \gamma_3 = 0, \quad 1 \leq j \leq n_z \quad (8.28)$$

$$w_0 = w_\infty \quad (8.29)$$

8.3 Resolución del sistema

El sistema de ecuaciones sacadas con el método de diferencias finitas es un sistema de ecuaciones no lineal. Los coeficientes $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ dependen de las incógnitas del problema, lo cual crea un sistema no lineal. Además, las ecuaciones derivada de las ecuaciones 8.8 y 8.9 son ecuaciones acopladas, y se encuentran productos del tipo $T_{a,i} \cdot w_i$, lo cual permite afirmar que el sistema es no lineal.

Para resolver el problema se pretende usar un proceso iterativo. Se anota como x^k la variable x en la iteración k .

Se pretende convertir el sistema en un sistema lineal y resolverlo a partir de un proceso iterativo. Para ello, en cada iteración k , todos los términos no lineales de la ecuación se consideran constantes cogiendo los valores de la iteración anterior $k - 1$. Los términos en cuestión son los siguientes:

- α_i^{k-1}
- $w_j^k \beta_j^{k-1}$
- $w_j \gamma_j^{k-1}$
- $\alpha_3^{k-1} \left(\frac{T_{i+1}^{k-1} - T_{i-1}^{k-1}}{2\Delta r} \right)^2$

Así en cada iteración k se resuelve un sistema lineal. Se reescriben las ecuaciones matricialmente para la resolución y se divide el problema general en dos partes.

Por un lado se tiene el sistema lineal correspondiente a las ecuaciones radiales. Estas corresponden al balance de energía del reactor del volumen de control V_1 . Para una iteración k se definen los vectores X_r^k y b_r^k de dimensión $(n_r + 1)$ y la matriz A_r^k de dimensión $(n_r + 1) \times (n_r + 1)$.

El vector X_r^k es el vector incógnita y se expresa de la siguiente manera:

$$X_r^k = (T_0^k, T_1^k, \dots, T_{n_r}^k)^T \quad (8.30)$$

La matriz A_r^k y el vector b_r^k se crean a partir de las ecuaciones 8.22, 8.24 y 8.25.

- Para i entre 1 y $n_r - 1$

$$A_r^k(i, i) = -\frac{2\alpha_1^{k-1}}{\Delta r^2} \quad (8.31)$$

$$A_r^k(i, i - 1) = \frac{\alpha_1^{k-1}}{\Delta r^2} - \frac{2\alpha_2^{k-1}}{r_i \Delta r} \quad (8.32)$$

$$A_r^k(i, i + 1) = \frac{\alpha_1^{k-1}}{\Delta r^2} + \frac{2\alpha_2^{k-1}}{r_i \Delta r} \quad (8.33)$$

$$b_r^k(i) = -\alpha_4 - \alpha_3^{k-1} \left(\frac{T_{i+1}^{k-1} - T_{i-1}^{k-1}}{2\Delta r} \right)^2 \quad (8.34)$$

- Para $i = 0$

$$A_r^k(0,0) = 1 \quad (8.35)$$

$$A_r^k(0,1) = -1 \quad (8.36)$$

$$b_r^k(i) = 0 \quad (8.37)$$

- Para $i = n_r$

$$A_r^k(n_r, n_r) = -\frac{\lambda_{n_r}}{\Delta r} - h_{conv} \quad (8.38)$$

$$A_r^k(n_r, n_r - 1) = \frac{\lambda_{n_r}}{\Delta r} \quad (8.39)$$

$$b_r^k(n_r) = -h_{conv} T_{a,m} \quad (8.40)$$

Por otro lado se plantea el sistema de ecuaciones axiales $A_z^k X_z^k = b_z^k$. Para una iteración k se definen los vectores X_z^k y b_z^k de dimensión $2(n_z + 1)$ y la matriz A_z^k de dimensión $2(n_z + 1) \times 2(n_z + 1)$. El vector incógnita se expresa como:

$$X_z^k = (T_{a,0}^k, T_{a,2}^k, \dots, T_{a,n_z}^k, w_0^k, w_1^k, \dots, w_{n_z}^k) \quad (8.41)$$

La matriz A_z^k y el vector b_z^k se crean a partir de las ecuaciones 8.26, 8.27, 8.28 y 8.29. Estos se rellenan de tal manera que las ecuaciones se reescriban de la forma $A_z^k X_z^k = b_z^k$.

- Para j entre 1 y n_z se rellena la matriz a partir de las ecuaciones 8.26 y 8.28

$$A_z^k(j, j) = w_j^k \frac{\beta_1^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.42)$$

$$A_z^k(j, j - 1) = -w_j^k \frac{\beta_1^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.43)$$

$$A_z^k(j, n_z + j) = \frac{\beta_2^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.44)$$

$$A_z^k(j, n_z + j - 1) = -\frac{\beta_2^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.45)$$

$$A_z^k(n_z + j, j) = w_j^k \frac{\gamma_1^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.46)$$

$$A_z^k(n_z + j, j - 1) = -w_j^k \frac{\gamma_1^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.47)$$

$$A_z^k(n_z + j, n_z + j) = \frac{\gamma_2^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.48)$$

$$A_z^k(n_z + j, n_z + j - 1) = -\frac{\gamma_2^{k-1}}{\Delta z} \quad (8.49)$$

- Para las condiciones de contorno en $j = 0$ y $j = n_z$ a partir de las ecuaciones 8.27 y 8.29

$$A_r^k(0,0) = 1 \quad (8.50)$$

$$A_r^k(n_z, n_z) = 1 \quad (8.51)$$

$$b_r^k(0) = T_{inlet} \quad (8.52)$$

$$b_r^k(n_z) = w_\infty \quad (8.53)$$

Se realiza la programación del proceso iterativo con *MATLAB*. Las etapas del algoritmo se representan en el esquema 8.1.

- Se cogen unas variables de inicio arbitrarias $T_i^0, T_{a,j}^0, w_j^0, T_{am}^0$ para empezar el proceso iterativo.
- Se itera para resolver el sistema radial $A_r^k X_r^k = b_r^k$
- Se coge la temperatura de pared $X_r(n_r + 1)$
- Se itera para resolver el sistema axial $A_z^k X_z^k = b_z^k$
- Se calcula la temperatura media del agua $T_{a,m}^k$. En las primeras iteraciones la temperatura media del agua puede llegar a ser mayor que la temperatura de la pared del núcleo (lo cuál supondría el calentamiento del reactor con el refrigerante) o incluso ser negativa. Se impone por tanto una condición en la que, si la temperatura media del agua tiene un valor negativo o mayor que la temperatura de pared, se le adjudica la temperatura de entrada al reactor.
- Se repite el proceso hasta convergencia del programa.

Para medir la convergencia del algoritmo se usa una función de coste cuadrática que se tienen que intentar minimizar hasta ser nula. Se diferencian tres costes: el coste del vector de temperaturas del núcleo, el coste del vector de temperaturas del agua y el coste del vector de densidades del agua. Se define el coste en una iteración k para un vector X de dimensión N como:

$$coste = \frac{1}{N} \sum_i^N (X_i^k - X_i^{k-1})^2 \quad (8.54)$$

Las unidades del coste no son relevantes para la resolución del problema, esta función permite únicamente tener valores altos si hay diferencias entre una iteración y la anterior. Se pretende minimizar el valor del coste independientemente de los valores del vector X . Es por tanto interesante comparar el coste para un mismo vector a lo largo de las iteraciones.

Cabe destacar que para resolver el sistema radial y el axial se usa igualmente un proceso iterativo. Se tiene por tanto un proceso iterativo local para resolver un sistema de ecuaciones, y uno global para comprobar convergencia global entre los dos sistemas. Se debe comprobar la convergencia global ya que los sistemas radiales y axiales comparten las variables T_{am} y T_{pared} .

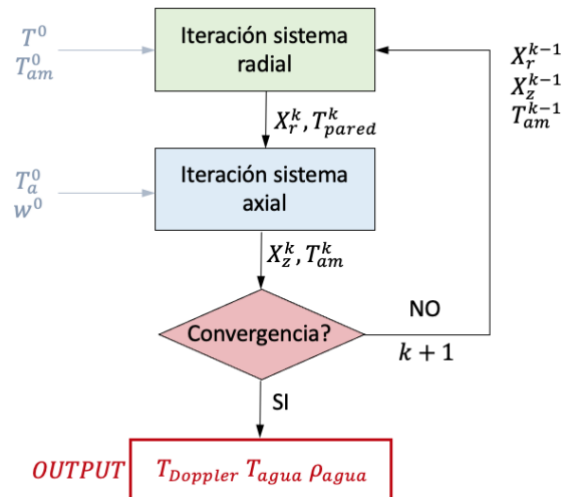


Figura 8.1 - Esquema del algoritmo de resolución del sistema

La iteración local permite resolver los sistemas ecuaciones. Para ello, en cada iteración local se recalculan las matrices A_r^k , A_z^k y los vectores b_r^k , b_z^k y se resuelven los sistemas. Se repite este proceso hasta convergencia.

Para resolver el sistema $Ax = b$ se usa la función de *MATLAB* de resolución de sistemas lineales. Esta función permite resolver un sistema con algoritmos optimizados, ya que el cálculo de la inversa de la matriz podría conducir a errores.

Por otro lado, las matrices de los sistemas son de dimensiones grandes ya que dependen del número de puntos de discretización. Además, la mayoría de los elementos de la matriz son nulos, por lo que se puede afirmar que se trata de una matriz dispersa. *MATLAB* dispone del objeto *sparse* que permite guardar y realizar cálculos con matrices dispersas de manera más óptima.

En vez de guardar la información de todos los elementos de la matriz, solo se guarda el valor y la posición en la matriz de los elementos distintos de 0. Esto permite guardar mucha menos información, reducir los tiempos de cálculo y evitar errores computacionales a la hora de resolver el sistema. En el repositorio *github* proporcionado en las referencias se adjunta el código de resolución del sistema.

9 Resolución modelo neutrónico acoplado al termo-hidráulico

Se pretende conocer el régimen permanente para el caso A1 del *benchmark*. Es importante que el régimen estacionario se tenga una constante de multiplicación $k = 1$, es decir, que se tenga un reactor crítico para el caso estacionario. Una vez encontrado las condiciones termo-hidráulicas estacionarias, se varía la concentración de Boro c hasta obtener un reactor crítico. Sin embargo, las secciones eficaces dependen a su vez de las variables termodinámicas. Es por tanto necesario encontrar el valor de las siguientes variables para el cálculo de las secciones eficaces:

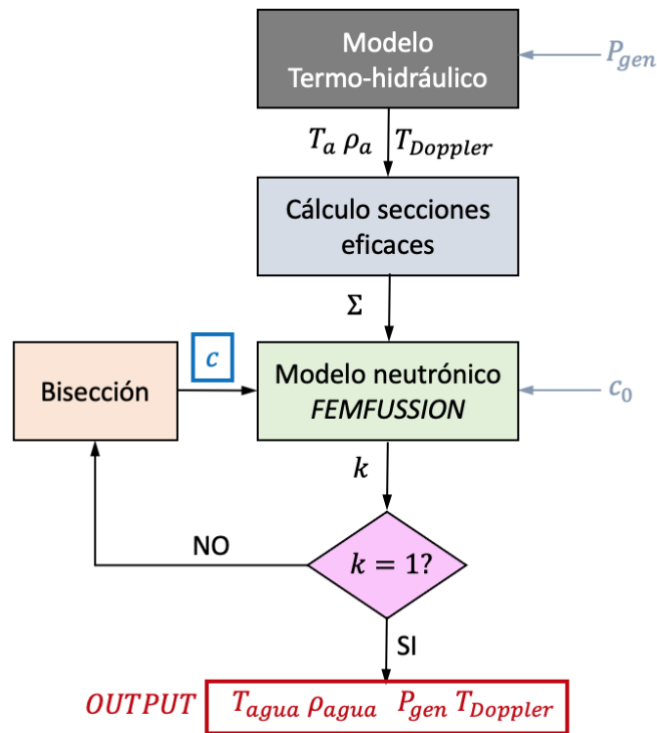
- $T_{Doppler}$
- T_a
- $\rho_a(T_a)$

El modelo termo-hidráulico permite encontrar el estado estacionario del sistema dada una potencia del sistema. Tiene como *output* las siguientes variables:

- T_{center} , es la temperatura externa del reactor $T_{center} = T(r = 0)$.
- T_{ext} , es la temperatura en el centro del reactor $T_{ext} = T(r = R_{clad,ext})$.
- T_a , es la temperatura del agua media a lo largo del reactor.
- w_a , es la velocidad axial media del agua que pasa por cada *fuel assembly*.

Para poder lanzar el modelo neutrónico se requieren las secciones eficaces. Se tiene por tanto que calcular los valores de las secciones eficaces a partir de las variables estacionarias termo-hidráulicas. Se crea un programa en *MATLAB* para calcular las secciones eficaces a partir de la ecuación 6.2 y estas variables. Se adjunta en el enlace *github* proporcionado en las referencias.

Por último queda encontrar la concentración de Boro crítica, para ello se propone un proceso iterativo con el método de bisección. Se muestra en el siguiente esquema el algoritmo global de resolución del estado estacionario del sistema:



Los pasos son los siguientes:

- Se resuelve el modelo termo-hidráulico estacionario
- Se empieza con una concentración de boro c_0 que se irá actualizando con el método de bisección.
- Se calculan las secciones eficaces correspondientes al estado estacionario y a la concentración de boro.
- Se lanza el modelo neutrónico obteniendo así la k_{eff} del reactor.
- Se comprueba si la k_{eff} es igual a 1 con cierta tolerancia. En caso afirmativo se ha encontrado el estado estacionario crítico. En caso negativo se usa el método de bisección para encontrar la nueva concentración de boro y se repite el proceso hasta convergencia.

9.1 Método de Bisección

Este método es un proceso iterativo que suele emplearse para la búsqueda de raíces de polinomios. Sin embargo, este método se puede usar igualmente para resolver ecuaciones.

Para aplicar este método se necesita conocer un intervalo real $[a, b]$ al que la solución pertenezca. En este caso se quiere conocer la concentración de boro, por lo que un intervalo podría ser entre $a = 0$ y $b = 5000 \text{ ppm}$.

Si llamamos f la función que permite de encontrar la k_{eff} en el algoritmo global presentado anteriormente, el problema planteado sería el siguiente:

$$f(c) - 1 = 0 \quad (9.01)$$

El algoritmo se presenta a continuación:

- Se calcula $f(a), f(b), f\left(\frac{a+b}{2}\right)$
- Por definición del intervalo $[a, b]$ se sabe que $f(a) < 0$ y $f(b) > 0$, ya que la solución está entre a y b .
- Si $f\left(\frac{a+b}{2}\right) > 0$, entonces se coge como nuevo intervalo $\left[a, \frac{3a+b}{2}\right]$
- Si $f\left(\frac{a+b}{2}\right) < 0$, entonces se coge como nuevo intervalo $\left[\frac{3a+b}{2}, b\right]$
- Se repite el proceso con el intervalo actualizado

Este método converge encontrando un intervalo pequeño alrededor de la solución del problema. Este algoritmo permite reducir la complejidad del problema a una complejidad logarítmica. Se adjunta en el en el repositorio *github* dado en referencias el algoritmo de resolución global.

10 Resultados

En este apartado se muestran los resultados del proyecto. La potencia del reactor para el caso estacionario es igual a 2775W, lo cuál es un millón de veces menor que la potencia nominal del reactor. El estado estacionario corresponde al estado HZP (*Hot Zero Power*), es decir, al reactor parado.

Se resuelve en un primer lugar el modelo termo-hidráulico para la potencia nominal, para así poder apreciar el perfil radial y axial de temperaturas debidas al enfriamiento del reactor por el refrigerante y su calentamiento por fisión.

En un segundo lugar se resuelve el modelo para la potencia del estado estacionario, para así poder calcular las secciones eficaces y lanzar el modelo neutrónico. Este último se presenta en un tercer apartado.

10.1 Solución estacionaria del modelo termo-hidráulico para P=2775MW

Se realizan 20 iteraciones globales para la resolución del modelo con la potencia nominal. En las figuras 10.1, 10.2 y 10.3 se muestran las curvas de los errores cuadráticos en función de las iteraciones para la temperatura del núcleo, la temperatura del agua y la velocidad del agua respectivamente.

Se observa que el sistema radial es el más rápido en converger ya que desde la primera iteración se tiene un error inferior a 10^{-7} . El sistema axial es más lento en converger, se observa un error cuadrático entorno a 7200 para la segunda iteración de la temperatura del agua y un error de 0.5 para la segunda iteración de la velocidad del agua. Después de 20 iteraciones el coste está entorno a 10^{-13} , 10^{-3} y 10^{-6} para la temperatura del núcleo, la temperatura del agua y la velocidad del agua. Se puede por tanto afirmar que el algoritmo ha convergido.

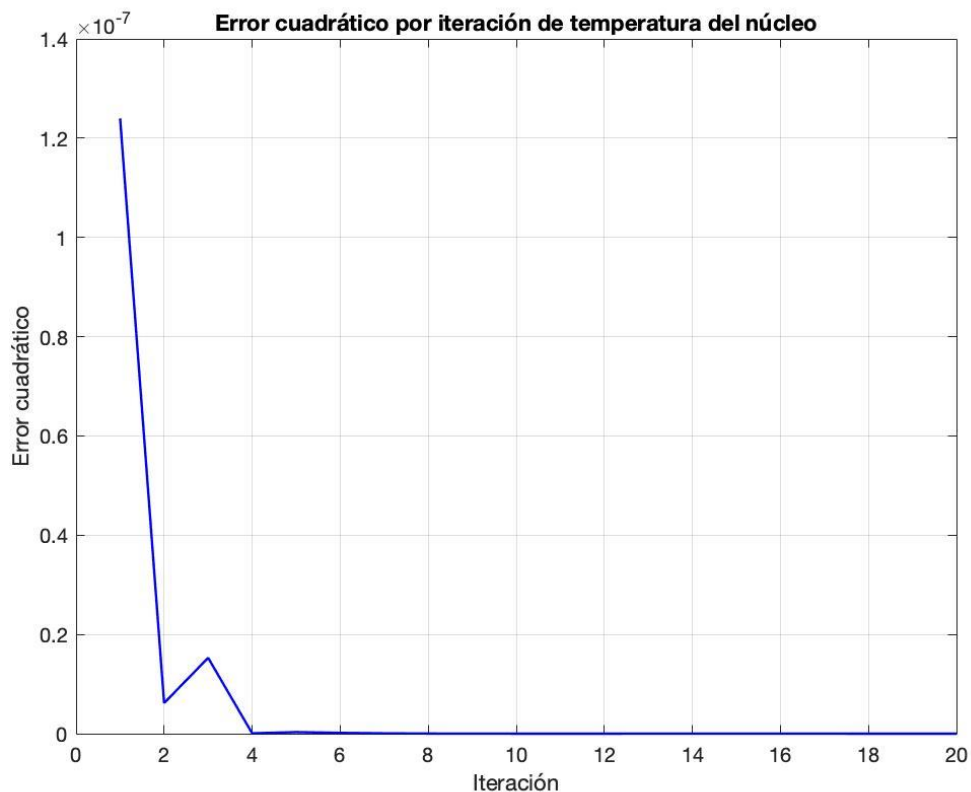


Ilustración 10.1 - Error cuadrático del perfil de temperaturas del núcleo

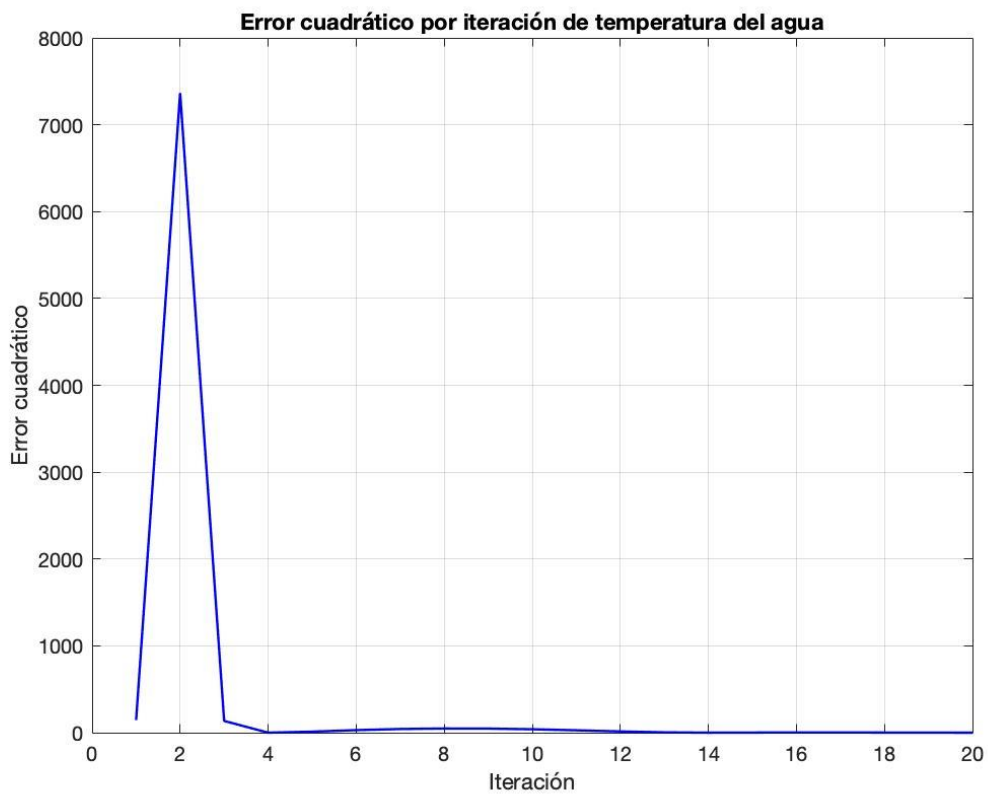


Ilustración 10.2 - Error cuadrático del perfil axial de temperaturas del refrigerante

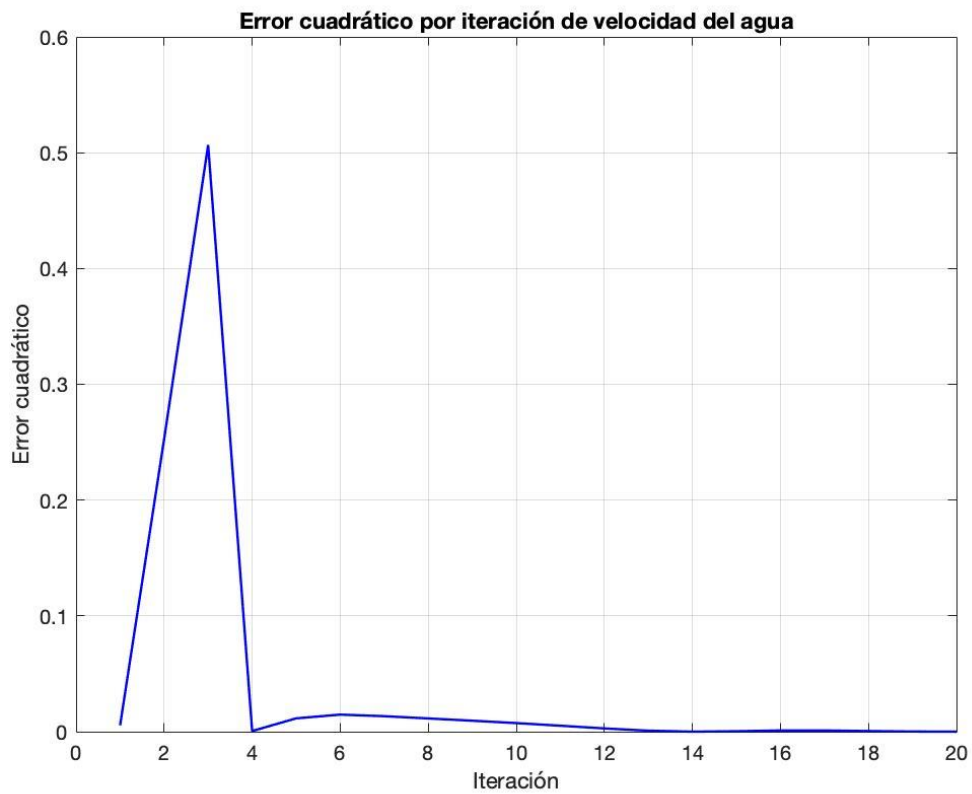


Ilustración 10.3 - Error cuadrático del perfil axial de velocidades del refrigerante

En la figura 10.4 se muestra el perfil radial de temperaturas del núcleo. Se observa que se trata de una curva cóncava, lo cuál corresponde teóricamente al enfriamiento de un cilindro con generación de energía en su interior.

Esto corresponde al caso presente ya que el agua enfría la pared del núcleo y la fisión genera energía en dentro del reactor. La temperatura máxima se tiene en el centro de reactor y alcanza los 968 K. La temperatura mínima es la de pared y es igual a 692 K. Se observa por tanto que el refrigerante permite refrigerar el reactor

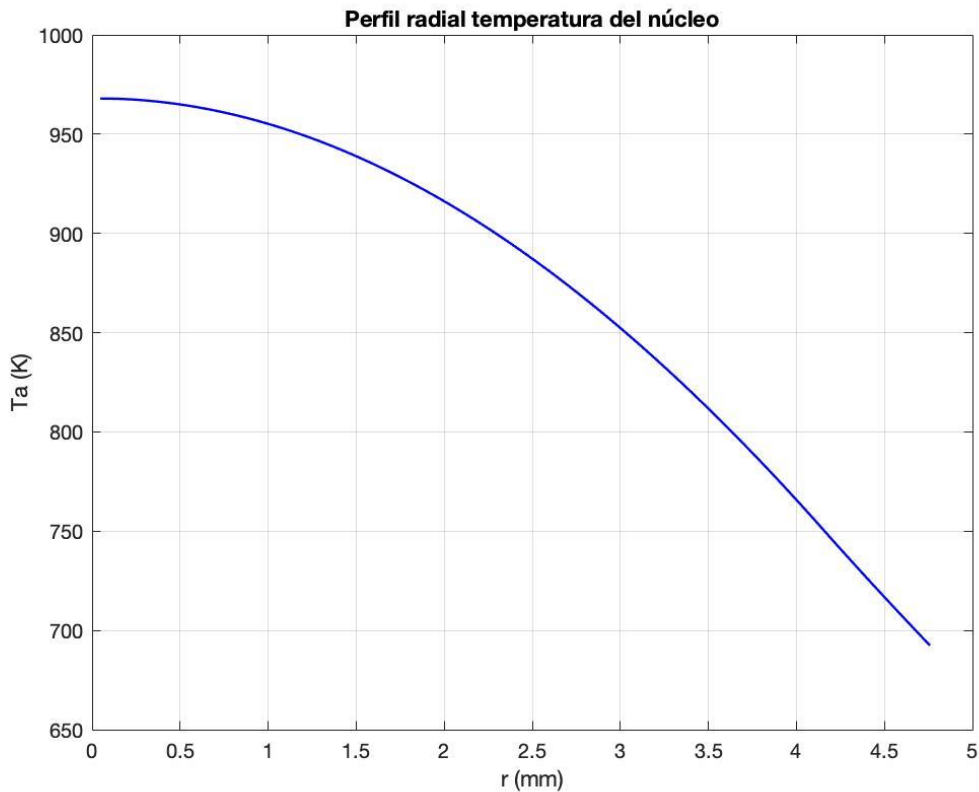


Ilustración 10.4 - Perfil radial de temperatura del núcleo para potencia nominal

En la figura 10.5 se muestra el perfil axial de la temperatura del refrigerante del reactor. Se observa que la temperatura aumenta a medida que el agua pasa por el reactor, lo cuál muestra que el refrigerante se calienta. La temperatura de entrada es la que enuncia el *benchmark* y es igual a 559.15 K. La temperatura máxima es la de salida y es igual a 674.33 K.

Por último, se presenta en la figura 10.6 el perfil axial de la velocidad del refrigerante. Se observa que el agua se acelera a medida que avanza por el reactor. Esto se explica por el aumento de temperatura del agua a lo largo del reactor y por tanto una disminución de la densidad del refrigerante.

Los datos de salida después de la resolución del modelo son la temperatura de Doppler, la temperatura media del agua y la densidad media del agua.

Al resolver el sistema para la potencia nominal se obtiene:

- $T_{Doppler} = 775.07 K$
- $T_a = 623.69 K$

- $\rho_a = 578.08 \text{ kg/m}^3$

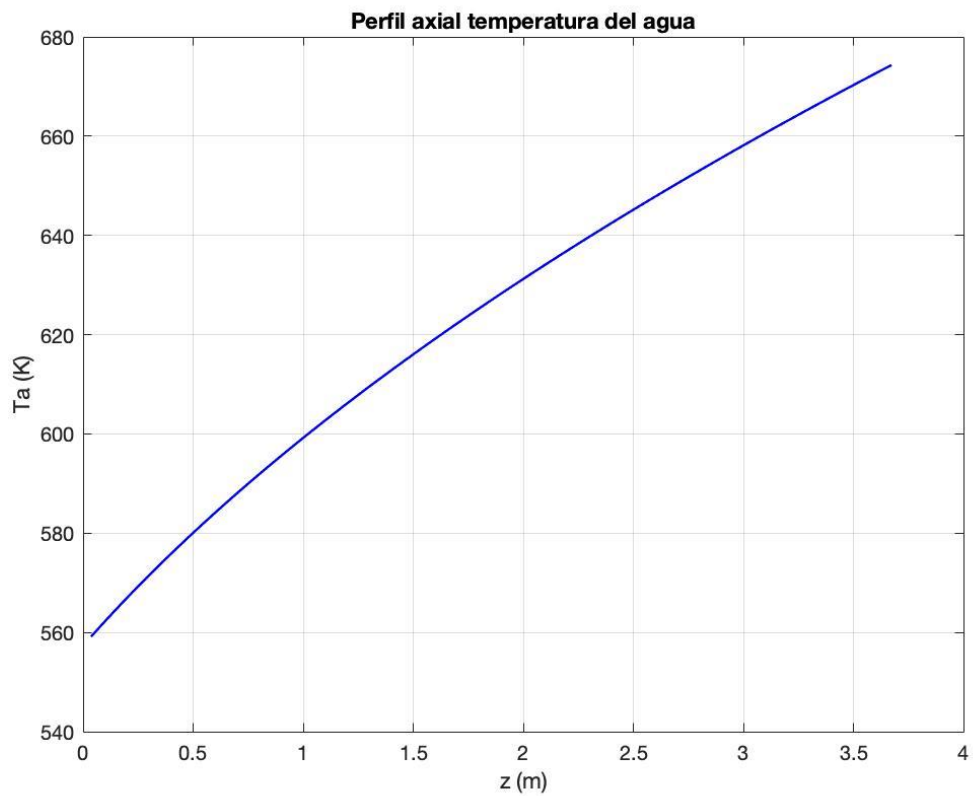


Ilustración 10.5 - Perfil de temperatura del refrigerante para potencia nominal

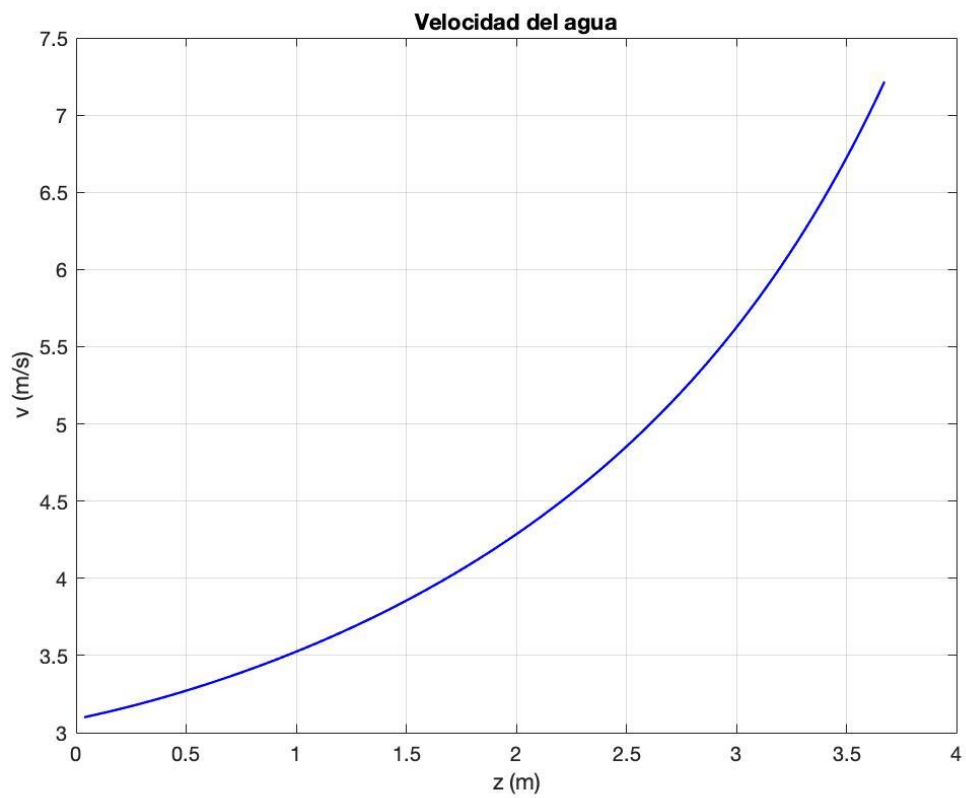


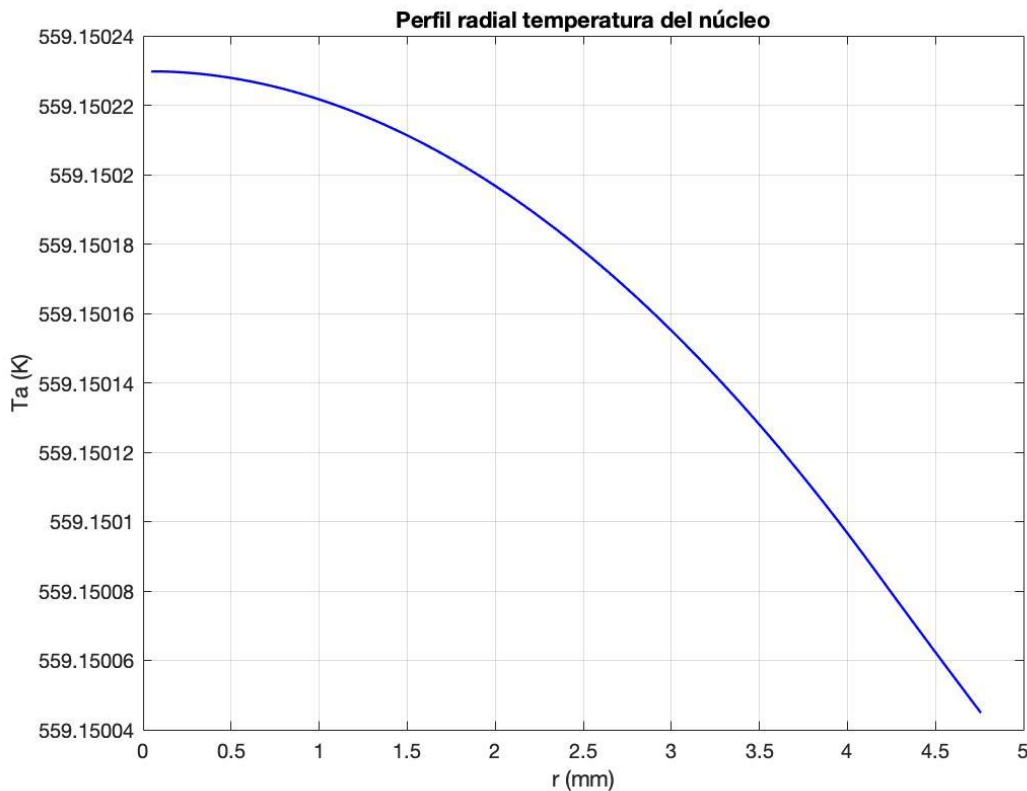
Ilustración 10.6 - Perfil axial de velocidad del refrigerante para potencia nominal

10.2 Solución estacionaria del modelo termo-hidráulico para P=2775W

Se pretende resolver el modelo termo-hidráulico para la potencia para el estado HZP. Se trata de una potencia muy baja, por lo que las variaciones de temperaturas son mínimas. Es decir, la temperatura del núcleo y del agua es prácticamente la misma.

Para los tres perfiles, se tienen convergencia desde la primera iteración. Al final del proceso se tienen errores del orden de 10^{-21} , 10^{-26} y 10^{-30} para el perfil radial de temperatura del núcleo, perfil axial de temperatura del agua y perfil axial de velocidades del agua respectivamente.

En la figura 10.7 se muestra el perfil radial de temperatura del núcleo obtenido. Se puede observar la misma forma de perfil que para la potencia nominal. Esto tiene sentido ya que se tiene el mismo caso: potencia generada al interior del reactor y enfriamiento por pared del refrigerante. Sin embargo, se observa que el valor máximo es de 559.15024 K y el mínimo de 559.15004 K, lo cuál es una diferencia despreciable. La temperatura es por tanto uniforme en todo el núcleo del reactor

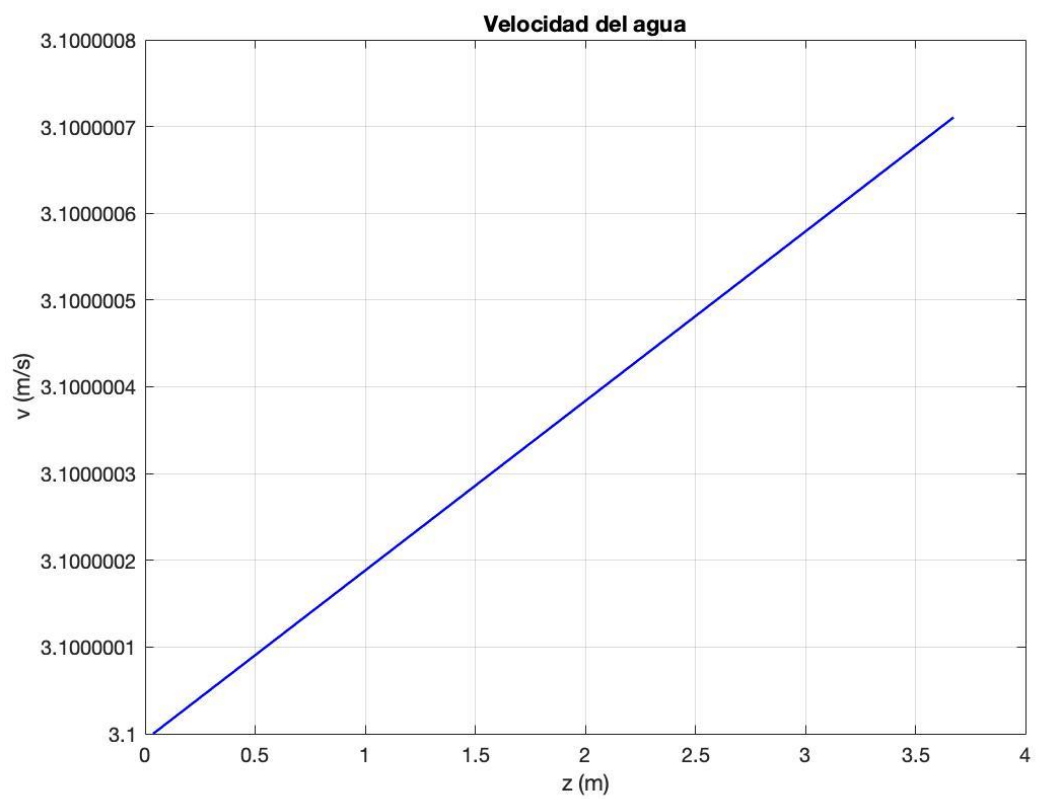
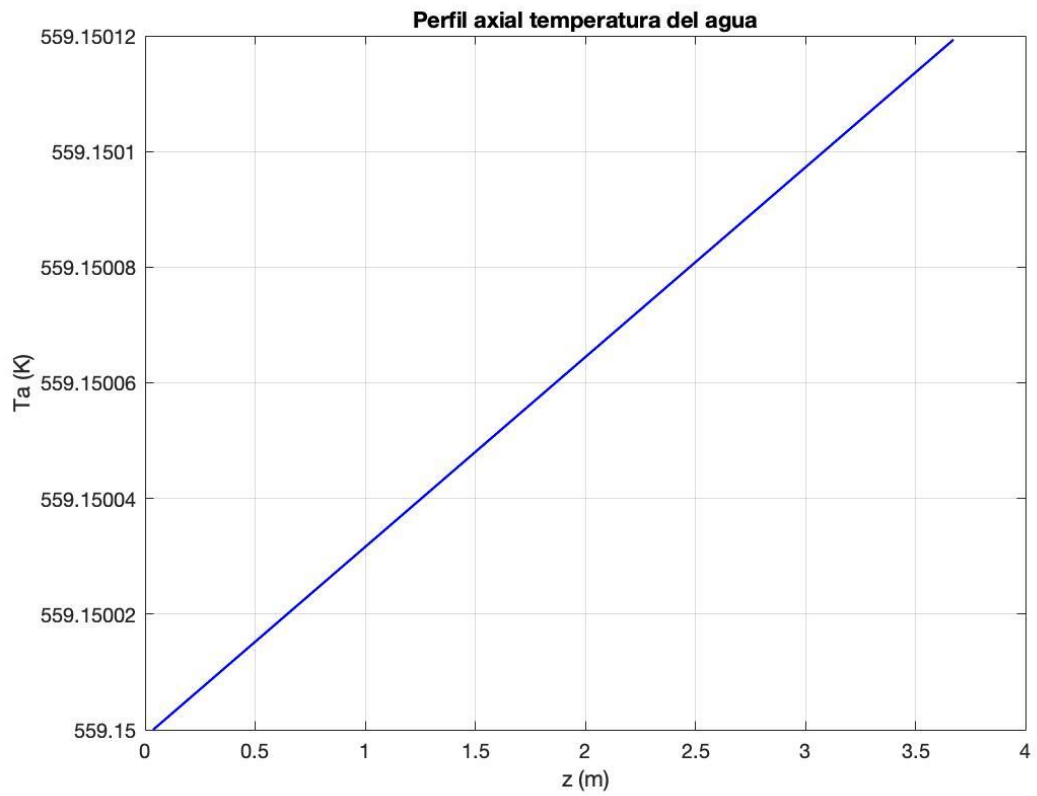


En la figura 10.8 se muestra el perfil axial de temperaturas del refrigerante. Al igual que para la potencia nominal, se observa que la temperatura del refrigerante aumenta. Al igual que para el perfil radial, la diferencia entre la temperatura máxima y mínima es despreciable. El valor máximo es de 559.15012 K y el mínimo de 559.15000 K. Se considera una temperatura uniforme del agua. Además, se puede observar que la temperatura del agua y del núcleo son iguales. La transferencia de calor es prácticamente nula, lo cuál tiene sentido para el estado HZP. En la figura 10.9 se muestra el perfil de velocidades y se puede llegar a la misma conclusión. La velocidad aumenta como para la potencia nominal, sin embargo, la diferencia entre valores máximos y mínimos es despreciable.

Al resolver el sistema para la potencia HZP se obtiene:

$$- T_{Doppler} = 559.15 \text{ K}$$

- $T_a = 559.15 \text{ K}$
- $\rho_a = 752.41 \text{ kg/m}^3$



10.3 Solución estacionaria del modelo global para P=2775W

Una vez resuelto el modelo termo-hidráulico se calculan los valores de las secciones eficaces a partir de la temperatura de Doppler, la temperatura del agua y la densidad del agua. Se lanza por tanto el algoritmo con método de bisección y se obtiene un reactor crítico para $c = 543.457031$ ppm. Se trata de un *benchmark* por lo que se proporciona una solución de referencia para poder comparar los resultados.

La concentración de boro crítica para la solución de referencia es $c = 561.2$ ppm.

Con el modelo propuesto se tienen por tanto un error relativo de 3.16%. El error está por debajo del 5% por lo que se considera que se ha conseguido resolver el modelo.

A partir del archivo ".vtk" se pueden visualizar los resultados obtenidos con el programa *FEMFUSION*. En la figura 10.10 se muestran los flujos neutrónicos para el grupo de energía rápido y térmico en tres cortes de tres planos distintos. Los flujos neutrónicos no tienen unidades ya que se trata de un problema de auto-valores normalizado. Se pretende únicamente conocer la distribución del flujo neutrónico en el reactor.

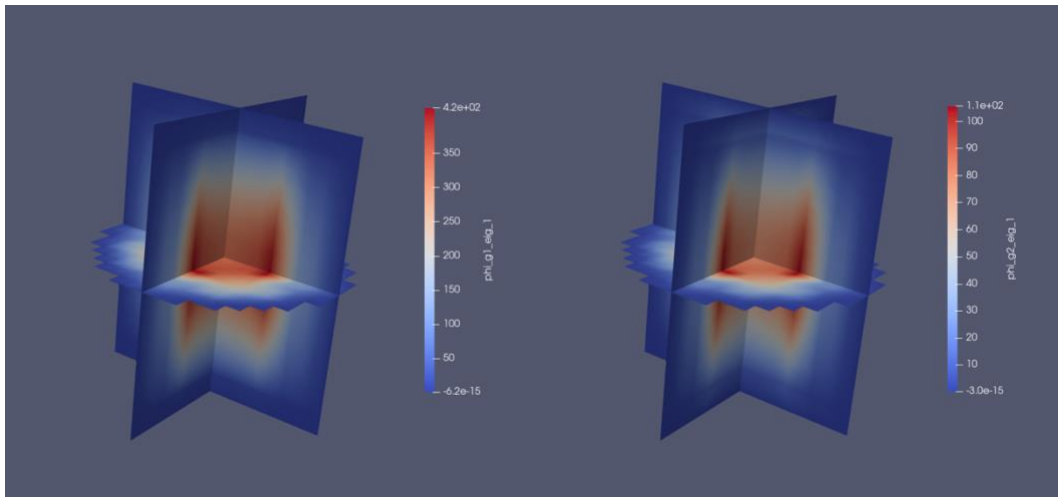


Figura 10.1 - Distribución del flujo neutrónico rápido (izquierda) y térmico (derecha) en el reactor 3D

En la figura 10.11 se muestra más en detalle el reactor en el plano XZ. En primer lugar, se observa que alrededor del reactor el flujo neutrónico es prácticamente nulo. Esto se debe al tipo de material que corresponde a un material reflector. Por otro lado, se observa que el pico de flujo no se obtiene en el centro del reactor. Esto se debe a la distribución del combustible y las barras de control en el reactor. Para que la vida útil del reactor y los combustibles sea mayor, el flujo neutrónico tiene que ser lo más uniforme posible en el reactor. Se observa que el flujo de neutrones rápido es mayor que el térmico.

Así se observan dos picos de flujo neutrónico teniendo así una distribución más uniforme del flujo neutrónico. En la figura 10.13 se representan los materiales de esos cortes. Se puede observar que en el centro existen barras de control permitiendo repartir mejor el flujo neutrónico por el reactor.

Finalmente, en la figura 10.12 se observa el corte en el plano XY. Al igual que para el plano XZ, el flujo máximo no se encuentra en el centro del reactor. Se tienen 4 picos repartidos de manera simétrica en el reactor. De la misma manera, la figura 10.13 muestra la repartición de materiales y la presencia de barras de control por el centro de reactor y material reflector alrededor de la parte activa del núcleo. Esto explica la distribución del flujo neutrónico del reactor.

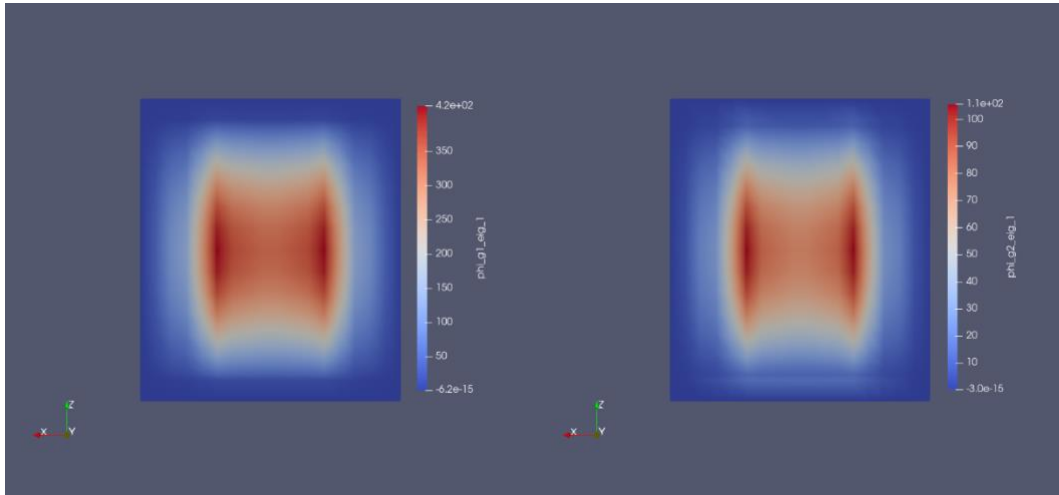


Figura 10.2 - Distribución del flujo neutrónico rápido (izquierda) y térmico (derecha) para el plano XZ

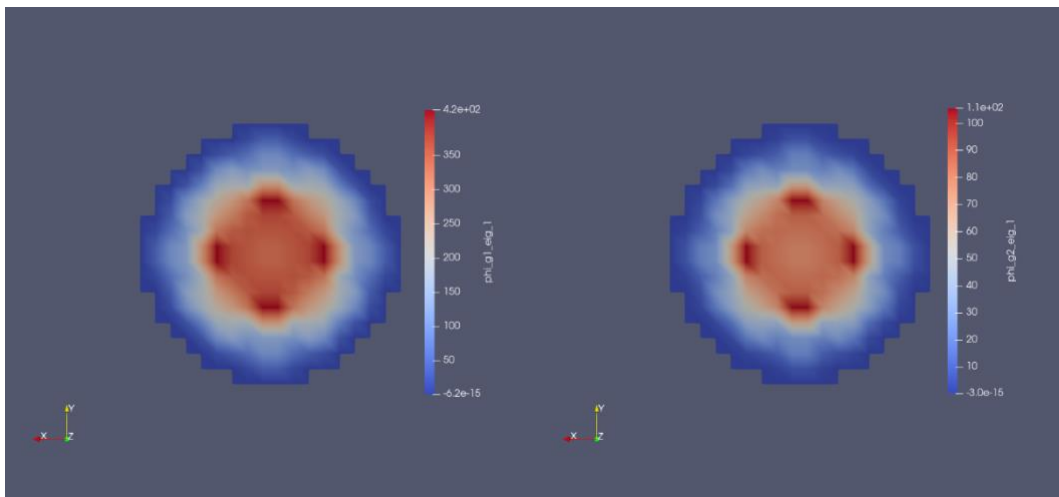


Figura 10.3 - Distribución del flujo neutrónico rápido (izquierda) y térmico (derecha) para el plano XY

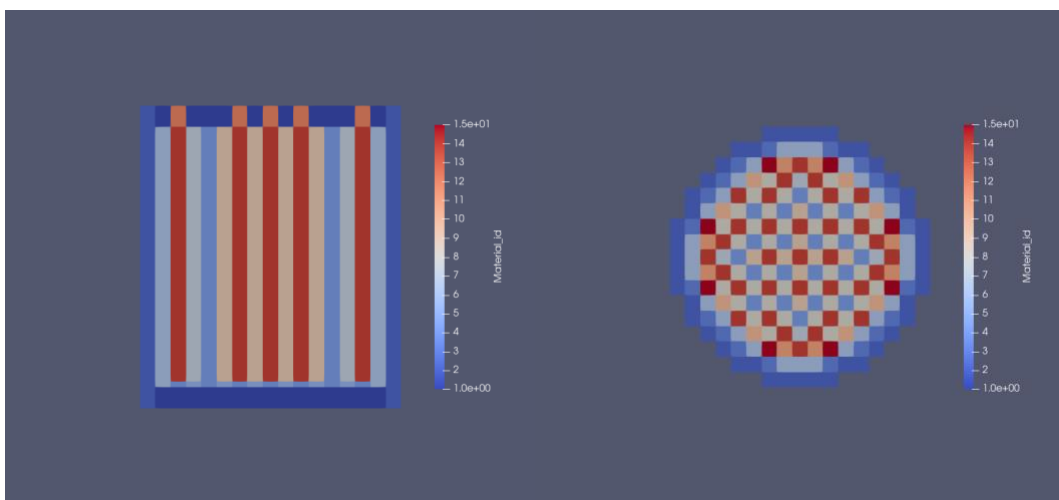


Figura 10.4 - Distribución de materiales para corte axial (izquierda) y radial (derecha)

11 Conclusión y líneas futuras

En este trabajo se ha propuesto un modelo termo-hidráulico para poder acoplarlo al programa *FEMFUSION* para resolver el estado estacionario del caso A1 del *benchmark* NEACRP. En esta parte se evalúan los objetivos definidos en el inicio de este trabajo.

En primer lugar, se ha creado un modelo termo-hidráulico que permite describir la transferencia de calor entre el núcleo y el refrigerante. Para ello se ha creado un modelo simplificado del reactor permitiendo plantear así balances de masa y energía. A partir de una malla uniforme y el método de diferencias finitas se obtienen dos sistemas lineales que resolver (sistema radial y axial). Se usan métodos iterativos para resolver estos dos sistemas que están interconectados. Por tanto, el primer objetivo se ha alcanzado ya que el programa permite obtener tanto un perfil radial de temperaturas del núcleo como los perfiles axiales de la temperatura y velocidad del refrigerante.

En segundo lugar, conociendo el valor de las variables termo-hidráulicas calculadas, se han calculado las secciones eficaces correspondientes al estado estacionario estudiado. Se ha creado el archivo XSEC con toda la información necesaria para resolver las ecuaciones de neutrónica del reactor. A partir del método de bisección y el programa *FEMFUSION* se ha conseguido encontrar la concentración de boro crítica del reactor con un error relativo respecto a la solución de referencia inferior al 5%.

Por último, los datos de salida del programa permiten obtener y visualizar la distribución de los flujos neutrónicos de neutrones rápidos y térmicos. Así los tres objetivos definidos al inicio del proyecto se han alcanzado respetando las condiciones inscritas.

En definitiva, este trabajo permite complementar el código de neutrónica *FEMFUSION* para actualizar los ficheros de entrada según las condiciones termo-hidráulicas del reactor.

Para futuros trabajos se podría ampliar el modelo termo-hidráulico para tener en cuenta la parte transitoria de las ecuaciones. Se tendría que plantear la comunicación entre el programa *FEMFUSION* y el modelo termo-hidráulico para así ir modificando las secciones eficaces a lo largo del transitorio. Esto permitiría resolver el caso A1 por completo y no únicamente la parte estacionaria. De igual forma, se podrían verificar todos los casos del *benchmark* NEARCP y así tener un modelo completo que permite describir un reactor PWR.

12 Referencias

- Finnemann, H., & Galati, A. (1992). *NEACRP-L-335: 3-D LWR Core Transient Benchmark Specification*. NEACRP-L-335 (Revision 1), OECD NEA.
- Fraikin, R. (1997). *PWR benchmark on uncontrolled rods withdrawal at zero power*. Nuclear Energy Agency, OECD.
- Finnemann, H., Bauer, H., Galati, A., & Martinelli, R. (1993). *Results of LWR core transient benchmarks* (No. NEA-NSC-DOC--93-25). Nuclear Energy Agency.
- Li, Z., An, P., Zhao, W., Liu, W., He, T., Lu, W., & Li, Q. (2021). Development and verification of PWR core transient coupling calculation software. *Nuclear Engineering and Technology*, 53(11), 3653-3664.
- Kotlyar, D., Shaposhnik, Y., Fridman, E., & Shwageraus, E. (2011). Coupled neutronic thermo-hydraulic analysis of full PWR core with Monte-Carlo based BGCore system. *Nuclear Engineering and Design*, 241(9), 3777-3786.
- Wang, F., Gu, X., Guan, D., & Dou, W. (2022). Neutronics and Thermohydraulics Coupling Analysis on Novel Organic Cooled Reactor Based on Single-Channel Model. *Frontiers in Energy Research*, 438.
- Mc Carty, R. D. (1973). Thermodynamic Properties of Helium 4 from 2 to 1500 K at Pressures to 108 Pa. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 2(4), 923-1042.
- Carbajo, J. J., Yoder, G. L., Popov, S. G., & Ivanov, V. K. (2001). A review of the thermophysical properties of MOX and UO₂ fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 299(3), 181-198.
- Fink, J. K. (2000). Thermophysical properties of uranium dioxide. *Journal of nuclear materials*, 279(1), 1-18.
- Torrella Alcaraz, E., Cabello López, R., Llopis Doménech, R., SANZ KOCK, C. A. R. L. O. S., & Sánchez García-Vacas, D. (2015). TRANSMISIÓN DE CALOR. PROCESOS Y EQUIPOS INTERCAMBIADORES. Colección Académica. Editorial UPV.
- Holmgren, M. (2006). X steam for matlab. www.x-eng.com, accessed October, 21, 2006.
- Magnus Holmgren (2022). X Steam, Thermodynamic properties of water and steam. (<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/9817-x-steam-thermodynamic-properties-of-water-and-steam>), MATLAB Central File Exchange.
- Lakehal, D. (2018). Highly-resolved LES of turbulent convective flow along a PWR rod bundle. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 122, 785-794.
- Tosun, İ. (2002). Evaluation of Transfer Coefficients: Engineering Correlations (Chapter 4). *Modelling in Transport Phenomena*. Elsevier, Amsterdam, 65-131.
- Vidal-Ferràndiz, A., A.Carreño, D.Ginestar, & G.Verdú. (2021). FEMFFUSION. Un código de elementos finitos para el modelado de sistemas nucleares.

- Lamarsh, J. R., & Baratta, A. J. (2001). *Introduction to nuclear engineering* (Vol. 3, p. 783). Upper Saddle River, NJ: Prentice hall.
- Stacey, W. M. (2018). *Nuclear reactor physics*. John Wiley & Sons.
- A. Carreño; Vidal-Ferràndiz, A.; Ginestar Peiro, D.; Verdú Martín, G. (2017) *Multilevel method to compute the lambda modes of the neutron diffusion equation*. *Applied Mathematics and Nonlinear Sciences*, 1 (2), 225 - 236. 10.21042/AMNS.2017.1.00019
- Vidal-Ferràndiz, A; Ginestar Peiro, D; Fayez-Moustafa Moawad, R.; Verdú, G. (2016) *Moving meshes to solve the time-dependent neutron diffusion equation in hexagonal geometry*. *Journal of Computational and Applied Mathematics* (291)197 - 208. 10.1016/j.cam.2015.03.040
- Bueno Fillon, L. (2022, November 9). *Códigos Matlab del Modelo Termo-Hidráulico y archivos de entrada para el programa femffusion para el Estacionario del Caso A1 del benchmark NEACPR*. GitHub. Retrieved November 9, 2022, from <https://github.com/luisbuenofillon/TFM.git>

PRESUPUESTO

1 Introducción

En este segundo documento del trabajo se detallan los gastos económicos que conlleva la realización del proyecto. Se considera tres costes principales: coste de mano de obra, coste de hardware y coste de software. Se trata de un trabajo informático por lo que el presupuesto no tiene en cuenta más tipos de gastos.

2 Coste de mano de obra

Se plantea en primer lugar el coste de la mano obra para este proyecto realizada por el alumno y el tutor. Se supone un coste de mano de obra del 20€/h para el alumno como ingeniero junior y un coste de mano de obra de 45€ para el tutor como ingeniero senior. La tabla 1 muestra el número de horas dedicadas por el alumno y el tutor para cada parte del desarrollo del proyecto. La tabla 2 muestra el cálculo del coste de la mano de obra en función del número de horas calculados en la tabla 1 y el coste por hora impuesto.

	Horas Alumno	Horas Tutor
1. PLANIFICACIÓN DEL PROYECTO	15 h	18 h
Reuniones	12 h	15 h
Revisiones	3 h	3 h
2. FORMACIÓN EL ALUMNO	25 h	-
Formación en FEMFUSSION	10 h	-
Formación en Matlab Y Shell	15 h	-
3. BÚSQUEDA BIBLIOGRÁFICA	55 h	-
Búsqueda modelo neutrónico	15 h	-
Búsqueda modelo termo-hidráulico	40 h	-
4. CÁLCULOS REALIZADOS	105 h	10 h
Desarrollo de programa de cálculo de secciones eficaces	15 h	5 h
Desarrollo de ecuaciones del modelo termo-hidráulico	20 h	5 h
Desarrollo de ecuaciones discretizadas del modelo termo-hidráulico estacionario	20 h	-
Desarrollo del programa de resolución de modelo termhidráulico	20 h	-
Simulaciones en FEMFUSSION	10 h	-
Cálculos y representaciones en Maltab	20 h	-
5. REDACCIÓN DEL TRABAJO	100 h	-

Designación	Precio (€/h)	Horas	Coste (€)
Alumno	20	300	6000
Tutor	45	28	1260
Coste total			7260 €

3 Coste de Hardware

Se plantea en segundo lugar el coste de hardware para el desarrollo del proyecto. Para el desarrollo del proyecto se han usado dos ordenadores: el ordenador personal del alumno y el ordenador de la sala de investigación de la universidad. Se tiene en cuenta un modelo de amortización lineal para calcular la depreciación de estos ordenadores.

Considerando que la vida útil del ordenador portátil del alumno es de 8 años y que se ha usado durante 5 meses para el proyecto, se calcula una amortización de 5.208%. Esto se traduce en el presupuesto como la depreciación del equipo.

Por otro lado, el ordenador de la sala de investigación se ha usado durante 3 meses y se estima una vida útil de 12 años por lo que la amortización es de 2.083%. La universidad ofrece este producto de manera gratuita por lo que no se tiene en cuenta el coste de este ordenador, y por tanto no se tiene en cuenta su depreciación.

Designación	Cantidad (uds)	Coste* (€)	Amortización	Depreciación (€)**
Ordenador Portátil MacBook Pro 15. Intel® Core i5 Doble Núcleo. RAM 8GB. SSD 251GB	1	1000	5.208%	52.08
Ordenador Ubuntu 20.04.4 LTS Intel® Core i7. RAM 15GB. SSD 500GB	1	0	2.083%	0
Coste total				52.08 €

4 Coste de Software

Para el desarrollo del proyecto se han usado varios programas que requieren licencias de uso. La universidad proporciona las licencias educativas para el uso de estos programas, por lo que no se tiene en cuenta el coste.

Por otro lado, otros programas son de uso gratuito por lo que tampoco se ha considerado el coste.

Software	Cantidad	Coste
Licencia Microsoft Office 365	1u	-
Licencia ParaView	1u	-
Licencia Matlab r2022a	1u	-
Licencia de TextPad	1u	-
Licencia AutoCAD 2020	1u	-
Coste total		0 €

5 Presupuesto global

Por último la muestra en la tabla 5.1 el coste total del trabajo teniendo en cuenta todos los tipos de costes mencionados anteriormente.

Tipo de coste	Coste
Mano de obra	7260 €
Hardware	52.08 €
Software	0 €
Total	7312.08 €

Teniendo en cuenta 15% de gastos generales, 6% de beneficio industrial y el IVA del 21% se obtiene el presupuesto global del proyecto

Concepto	Coste
Presupuesto base	7312 €
Gastos generales (15%)	1096.81 €
Beneficio industrial (6%)	439 €
Presupuesto sin impuestos	8847.62 €
IVA (21%)	1858 €
Presupuesto total	10705.62 €

El presupuesto total es de 10705.62 euros.

ANEXOS

1 Relación del trabajo con los objetivos de desarrollo sostenible (ODS) de la agenda 2030

En este anexo se presenta la relación del trabajo con los objetivos de desarrollo sostenible. En la siguiente tabla se presentan los diferentes objetivos y su grado de relación con el trabajo.

Objetivos de Desarrollo Sostenible		Grado
ODS 1	Fin de la pobreza.	Bajo
ODS 2	Hambre cero.	No Procede
ODS 3	Salud y bienestar.	Bajo
ODS 4	Educación de calidad.	Medio
ODS 5	Igualdad de género.	No Procede
ODS 6	Agua limpia y saneamiento.	No Procede
ODS 7	Energía asequible y no contaminante.	Alto
ODS 8	Trabajo decente y crecimiento económico.	Medio
ODS 9	Industria, innovación e infraestructuras.	Alto
ODS 10	Reducción de las desigualdades.	No Procede
ODS 11	Ciudades y comunidades sostenibles.	Alto
ODS 12	Producción y consumo responsables.	No Procede
ODS 13	Acción por el clima.	Medio
ODS 14	Vida submarina.	No Procede
ODS 15	Vida de ecosistemas terrestres.	No Procede
ODS 16	Paz, justicia e instituciones sólidas.	No Procede
ODS 17	Alianzas para lograr objetivos	No Procede

Este trabajo permite modelar un reactor nuclear de tipo PWR a partir de un *benchmark*. Se añade la parte termo-hidráulica a un código propuesto por el grupo de investigación de la UPV. El desarrollo de simulaciones pertinentes permite mejorar la eficiencia de los reactores así como la seguridad de estos sin poner en riesgo la población y su entorno. Por ello se considera que está relacionado con el objetivo ODS-11, ya que la energía nuclear junto con las renovables permite una comunidad sostenible y segura.

Por otro lado, los reactores PWR son los más utilizados en el mundo y permiten generar grandes cantidades de energía barata sin emisiones de CO₂, por lo que permite un desarrollo sostenible respondiendo así al objetivo ODS-7. La energía nuclear no es contaminante y además permite generar energía de bajo precio.

Finalmente, se necesitan numerosos técnicos e ingenieros expertos en el sector para poder llevar a cabo la construcción de este tipo de infraestructura con éxito. En efecto, son instalaciones muy complejas y el sector necesita estar en innovación continua, por lo que las simulaciones son de una importancia crucial. Esto está relacionado con objetivo ODS-9.