XXXI Congreso anual de la Sociedad Nuclear Mexicana

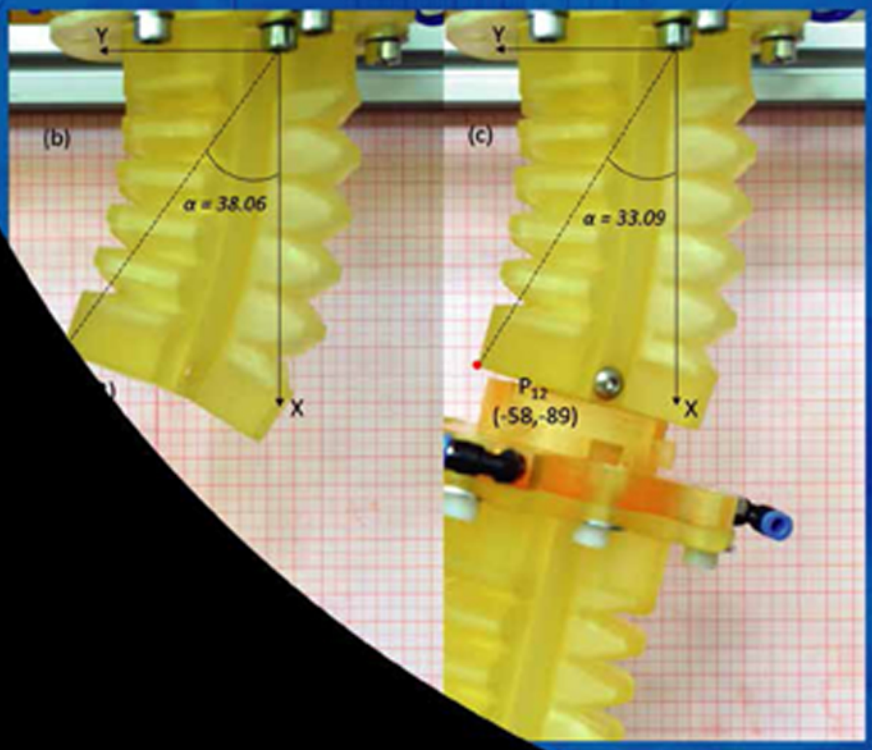
28 JUN | 01 JUL 2020 ZACATECAS

30 años de Nucleoelectricidad en México

SUPLEMENTO

Ingenierías

ISSN 1405-0676
89



SNM Sociedad Nuclear Mexicana

- Remoción del colorante
- O-splines para analizar señales
- Manufactura aditiva de actuadores
- Fotoacústicas para diagnósticos médicos

OCTUBRE - DICIEMBRE 2020, Año XXIII, No. 89
Ingenierías REVISTA DE LA FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

Suplemento en línea
"30 años de nucleoelectricidad en México"

Editores

Max Salvador Hernández
Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ingeniería Mecánica y Eléctrica
Grupo de investigación en fusión

Roberto Carlos Lopez Solis
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

DIRECTORIO REVISTA INGENIERÍAS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

Mtro. Rogelio G. Garza Rivera
Rector

Dr. Santos Guzmán López
Secretario General

Mtra. Emilia Edith Vásquez Farías
Secretario Académico

Dr. Celso José Garza Acuña
Secretario de Extensión y Cultura

Lic. Antonio Ramos Revillas
Director de Editorial Universitaria

FACULTAD DE INGENIERÍA MECÁNICA Y ELÉCTRICA

Dr. Arnulfo Treviño Cubero
Director

Dr. Juan Antonio Aguilar Garib
Editor responsable

M.C. Cyntia Ocañas Galván
Dr. Jesús G. Puente Córdova
Redacción

Gregoria Torres Garay
Tipografía y formación

M.A. José Luis Martínez Mendoza
Diseño

Ing. Cosme D. Cavazos Martínez
Webmaster

René de la Fuente Franco
Impresor

Ingenierías
89

Contenido

Octubre- de 2020, Año XXIII, No. 88

1-18 Estudio de la Razón de Flujo Crítico (CHFR) para un núcleo BWR mediante un modelo nuclear-termohidráulico
Miguel Ceceñas Falcón

19-32 Thermodynamic Assessment of a Nuclear Hydrogen Production Cycle with an Optimized Heat Exchanger Network
Luis Carlos Juárez Martínez, Gilberto Espinosa Paredes, Alejandro Vázquez Rodríguez, Hernando Romero Paredes Rubio

33-47 Enfriamiento de Material Fundido en el Fondo de la Vasija de un Reactor Nuclear Durante un Accidente Severo
Heriberto Sánchez Mora, Marco Antonio Polo Labarrios, Sergio Quezada García, Javier Ortiz Villafuerte

48-58 Análisis del Reactor AP 600 Ante Diferentes Accidentes de Pérdida de Refrigerante
María Felicia Jiménez Lavié, Edgar Salazar Salazar

59-70 Modelado Térmico de una Alberca de Combustible Gastado por Diferencias Finitas, para Estado Estacionario, Fase 1
Salvador Sandoval Valenzuela, Miguel Ceceñas Falcón

71-76 HEVIAN: Herramienta de Visualización para el Análisis Nuclear
Heriberto Sánchez Mora, Javier Ortiz Villafuerte, Marco Antonio Polo Labarrios y Sergio Quezada Garcia

77-91 Implementación de la Aproximación SPL en AZNHEX
Guillermo Muñoz Peña, Edmundo del Valle Gallegos, Armando Miguel Gómez Torres

92-103 Módulo de Transporte Basado en Ordenadas Discretas para el Código AZNHEX
Alejandro Campos Muñoz, Edmundo del Valle Gallegos, Armando Miguel Gómez Torres

104-115 Loading Pattern Determination for 50% MOX y 50% UO2 iPOWER reactor for Initial Cycle
Florencia de los Angeles Rentería del Toro, Armando Gómez Torres

116-129 Modelo para Reducir Costos de Sistemas en un Diseño Informado en Riesgo
Orestes Castillo-Hernández, Pamela F. Nelson,
Manuel Perdomo Ojeda

130-147 Impacto de la Pérdida del Sistema RCIC a Distintos Tiempos durante la Pérdida de Potencia Externa en un BWR
Eduardo Martínez Caballero, Rodolfo Amador García,
Rogelio Castillo Durán, Jorge Viais Juárez,
Javier Ortiz Villafuerte

148-161 AZTUSIA: AZtlan Tool for Uncertainty and SensIt-ivity Analysis
Melisa del Carmen Reyes Fuentes, Edmundo del Valle Gallegos,
Armando Miguel Gómez Torres

162-181 Modelo de Oxidación del Encamisado del Combustible Nuclear Basado en la Teoría de Difusión en un Medio Multifásico de ZrO2, α-ZrO y β-ZrO
Heriberto Sánchez Mora, Edmundo del Valle Gallegos,
Javier Ortiz Villafuerte, Marco Antonio Polo Labarrios,
Sergio Quezada García, Carlos Chávez Mercado

182-196 Cálculo de los Parámetros del Combustible 8x8 Depositado en la Alberca de Combustible Gastado de un BWR
José Luis Montes Tadeo, Raúl Perusquía,
José Luis Hernández Martínez, Javier Ortiz Villafuerte

197-209 Paralelización híbrida (MPI-OpenMP) en el código de transporte AZTRAN
Julian A. Duran Gonzalez, Edmundo del Valle Gallegos,
Armando M. Gómez Torres

210-223 A Verification Exercise for the AZNHEX Code Using the CEFR Neutronics Benchmark and the OpenMC and INSTANT Codes
Juan Galicia Aragón, Roberto Carlos López Solís,
Armando Miguel Gómez Torres

224-237 Cálculo de los Valores de Barras de Control del Reactor Chino Experimental CEFR empleando el Código Serpent
Juan Galicia-Aragón, Roberto López-Solís,
Armando Gómez-Torres

238-245 Diseño y análisis neutrónico: reactor a base de uranio-torio
Enrique Vera Romero, José Alfredo Soto Álvarez,
Teodoro Córdova Fraga

246-263 Calibración Semi-Empírica de un Detector de Germanio Hiperpuro para Mediciones In Situ de Radionúclidos

Naturales
Hernández Ramírez Daniel, Ríos Martínez Carlos,
Pinedo Vega José Luis, López Espinosa Anahid Zharazan,
Vargas Hurtado Mauricio

264-272 Capacidad de Retención de Mo(VI) en Óxidos Metálicos de TiO_2, SiO_2 y TiO_2-SiO_2
Nancy Moreno Gil, Verónica E. Badillo Almaraz,
Iris Z. López Malpica, Carmen López Reyes

Estudio de la Razón de Flujo Crítico (CHFR) para un Núcleo BWR mediante un Modelo Nuclear-Termohidráulico

Miguel Ceceñas Falcón
Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias
Reforma 113 Col. Palmira. 62490 Cuernavaca, Mor.
mcf@ineel.mx

Resumen

Durante la operación de un reactor nuclear, si el flujo actual de calor en los ensambles combustibles supera un valor conocido como flujo crítico, el vapor generado es suficiente para envolver completamente las varillas de combustible y reducir sustancialmente la extracción del calor generado, conduciendo a un sobrecalentamiento de las varillas. A la relación del flujo crítico al flujo actual se le conoce como CHFR, y siempre debe de ser mayor a la unidad. En el presente trabajo se plantea un esquema para poder calcular el CHFR para un núcleo de reactor tipo BWR. El esquema consiste en el desarrollo de un módulo neutrónico que calcula el perfil axial de potencia para cada ensamble del núcleo, y de un módulo termohidráulico que calcula las variables termohidráulicas a lo largo de cada ensamble combustible. Con la información neutrónico-termohidráulica, se evalúan diversas correlaciones disponibles en la literatura para el cálculo de flujo crítico, con lo que finalmente se calcula el CHFR para cada nodo axial de cada ensamble, así como el valor mínimo (MCHFR) de cada ensamble y su localización axial. Como resultado, se identifican los ensambles que operan más próximamente al flujo crítico, y qué tan cerca se encuentran del valor donde su temperatura se podría incrementar al grado de generar fallo de combustible.

1. INTRODUCCIÓN

La operación de los ensambles de combustible en un reactor nuclear genera calor, el cual en un reactor de agua en ebullición hace hervir agua, y la mezcla agua/vapor evacúa eficientemente el calor generado en las varillas de combustible. Si el calor generado aumenta, aumenta también el flujo de calor, así como la generación de vapor, y es posible llegar a un punto en el cual el vapor generado forma una capa envolvente que evita que el agua entre en contacto con las varillas de combustible. Dado que el vapor no es un buen conductor de calor, se incrementa sustancialmente la temperatura de la superficie del encamisado. El flujo de calor con el cual se reduce la transferencia de calor, y con el cual la temperatura del encamisado se incrementa drásticamente, es el flujo crítico; y a la dinámica de la transición de ebullición, de nucleada a de película, se le conoce como crisis de ebullición y puede conducir a daño en el encamisado.

Un factor limitante en el diseño de un reactor enfriado por agua es la necesidad de mantener un margen de seguridad entre el flujo de calor actual y el flujo de calor crítico en los ensambles combustibles durante el ciclo de operación. A la relación del flujo de calor crítico entre el flujo actual se le conoce como Razón de Flujo Crítico (CHFR, por sus siglas en inglés), y no debe de aproximarse a 1.0, esto es, el flujo de calor actual en el reactor no debe aproximarse al flujo de calor crítico, en donde la transferencia de calor se degrada considerablemente.

En el presente trabajo se describe y aplica un modelo nuclear y termohidráulico para generar la información requerida por las correlaciones de flujo crítico comunes y evaluar el CHFR para un reactor BWR dimensionado como el de Laguna Verde.

2. METODOLOGÍA

Para calcular el flujo de calor crítico en un reactor BWR es necesario conocer las condiciones termohidráulicas en las que opera cada ensamble de combustible, así como la potencia generada en cada nodo axial del ensamble. Para ello, se describe un modelo compuesto de dos módulos que permiten calcular el flujo neutrónico en tres dimensiones del reactor, así como la solución termohidráulica para cada ensamble. Estos dos módulos generan la información requerida por correlaciones de flujo crítico que permitan calcular la razón de flujo crítico en el combustible, asumiendo un núcleo de reactor BWR con 444 ensambles.

2.1. Módulo Neutrónico

Los perfiles axiales y radiales de potencia dependen de la distribución de flujo neutrónico en tres dimensiones. Considerando el núcleo como un conjunto de planos o rebanadas horizontales dispuestos verticalmente, una aproximación a la distribución se obtiene como un acoplamiento de un modelo axial con un modelo en dos dimensiones.

El perfil de distribución de flujo neutrónico se obtiene mediante la solución de la Ecuación de Difusión de Neutrones en tres dimensiones para un punto definido por el radio vector **r** [1].

$$-\nabla \cdot D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) \tag{1}$$

En geometría cartesiana para dos dimensiones se tiene:

$$-D\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - D\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \Sigma_a\phi(x,y) = \upsilon\Sigma_f\phi(x,y) \tag{2}$$

Donde

ϕ Flujo neutrónico
D Coeficiente de Difusión
Σ_a Sección eficaz macroscópica de absorción
Σ_f Sección eficaz macroscópica de fisión

ν Número promedio de neutrones liberados por fisión
S Densidad de fuente de neutrones

En (2) la fuente de neutrones S(r) fue reemplazada por el producto de $\nu\Sigma_f\,\phi(x,y)$. Para un plano horizontal *x-y*, se discretiza el núcleo en dos dimensiones mediante un esquema rectangular donde las celdas en los ejes x e y son de longitud Δx y Δx, respectivamente. En nuestro caso, por simetría en el núcleo, ambos incrementos son iguales, y se les denominará Δ. Para una celda con centro en algún punto geométrico (*i*,*j*) se tiene:

$$-\frac{D}{\Delta^2}\left(\phi_{i-1,j}+\phi_{i+1,j}\right)-\frac{D}{\Delta^2}\left(\phi_{i,j-1}+\phi_{i,j+1}\right)+\left(\frac{4D}{\Delta^2}+\Sigma_a-\upsilon\Sigma_f\right)\phi_{i,j}=0 \qquad (3)$$

La solución numérica contempla un nodo para cada ensamble, de manera que se tiene un total de 444 nodos en un plano. Para facilitar la construcción de la matriz de estados mediante (3), a cada ensamble se le establece una nomenclatura de ensambles vecinos para el Norte, Sur, Este y Oeste (N,S,E,W):

$$-\frac{D}{\Delta^2}\left(\phi_W+\phi_E\right)-\frac{D}{\Delta^2}\left(\phi_S+\phi_N\right)+\left(\frac{4D}{\Delta^2}+\Sigma_a-\upsilon\Sigma_f\right)\phi_{i,j}=0 \qquad (4)$$

Para facilitar la solución numérica, las condiciones de frontera de los ensambles periféricos se definen como flujo igual a cero. De esta manera, de la Figura 1, con la convención de que el Norte se localiza en la parte superior de la figura, se tiene que el flujo de la frontera Norte es cero para los ensambles 1 a 14, así como para los ensambles 15,30,31,48,49,68,69 y 90.

Similarmente, el flujo Sur es cero para los ensambles 355,376,377,396,397,414,415,430, y del 431 al 444. Los flujos de condición de frontera Este y Oeste se definen también en cero de acuerdo a la Figura 1. La condición de frontera de flujo cero simplifica la solución, pero puede ser reemplazada por condición de frontera de albedo, que sería particularmente útil si se conocen flujos de referencia que puedan ser reproducidos en la periferia del núcleo.

El Módulo Neutrónico recibe como entrada las posiciones de barras de control mediante un archivo texto. La Figura 2 muestra la disposición en la cual se alimentan las posiciones de barras de control al modelo, que reflejan la posición de las barras con respecto al mapa del núcleo. En el ejemplo de la Figura 2 se observan nueve barras de control extraídas hasta la posición 08, cuatro de ellas localizadas en el centro de cada cuadrante y una quinta en el centro del núcleo.

Con el planteamiento descrito, se obtiene una matriz de 444x444 elementos que forma parte de un sistema lineal, y para resolverla eficientemente se convierte en triangular superior-inferior. El vector solución se obtiene mediante operaciones algebraicas de sustitución hacia atrás. Este método tiene la ventaja de que una vez que se descompone la matriz, la búsqueda de criticidad se simplifica considerablemente al actualizar el vector de fuente de neutrones, sin necesidad de modificar la matriz, que corresponde a materiales, evaluando cuantas veces sea necesario sin resolver nuevamente todo el sistema lineal.

La Figura 3 muestra la solución de la distribución de flujo neutrónico para un plano axial del núcleo cercano a la parte central del núcleo, en el cual se observa el efecto en la generación de potencia de

las barras de control que se encuentran extraídas. La Figura 4 muestra el perfil axial para algunos ensambles, sobre una trayectoria que inicia en el centro y termina en la periferia del núcleo. El ensamble central, el 212 mostrado en azul, presenta muy claramente el efecto de la barra de control central en la potencia axial. El módulo neutrónico se desarrolló totalmente en Matlab [2].

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1					1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
2				15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
3			31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46
4		49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63	64	65
5	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
6	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108
7	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127	128	129	130
8	135	136	137	138	139	140	141	142	143	144	145	146	147	148	149	150	151	152
9	157	158	159	160	161	162	163	164	165	166	167	168	169	170	171	172	173	174
10	179	180	181	182	183	184	185	186	187	188	189	190	191	192	193	194	195	196
11	201	202	203	204	205	206	207	208	209	210	211	212	213	214	215	216	217	218
12	223	224	225	226	227	228	229	230	231	232	233	234	235	236	237	238	239	240
13	245	246	247	248	249	250	251	252	253	254	255	256	257	258	259	260	261	262
14	267	268	269	270	271	272	273	274	275	276	277	278	279	280	281	282	283	284
15	289	290	291	292	293	294	295	296	297	298	299	300	301	302	303	304	305	306
16	311	312	313	314	315	316	317	318	319	320	321	322	323	324	325	326	327	328
17	333	334	335	336	337	338	339	340	341	342	343	344	345	346	347	348	349	350
18	355	356	357	358	359	360	361	362	363	364	365	366	367	368	369	370	371	372

Figura 1. Nodalización de los ensambles combustibles

```
      48 48 48 48 48 48 48
   48 48 48 48 08 48 48 48 48
48 48 48 48 48 48 48 48 48 48 48
48 48 48 08 48 48 48 08 48 48 48
48 48 48 48 48 48 48 48 48 48 48
48 08 48 48 48 08 48 48 48 08 48
48 48 48 48 48 48 48 48 48 48 48
48 48 48 08 48 48 48 08 48 48 48
48 48 48 48 48 48 48 48 48 48 48
   48 48 48 48 08 48 48 48 48
      48 48 48 48 48 48 48
```

Figura 2. Definición de la posición de barras de control

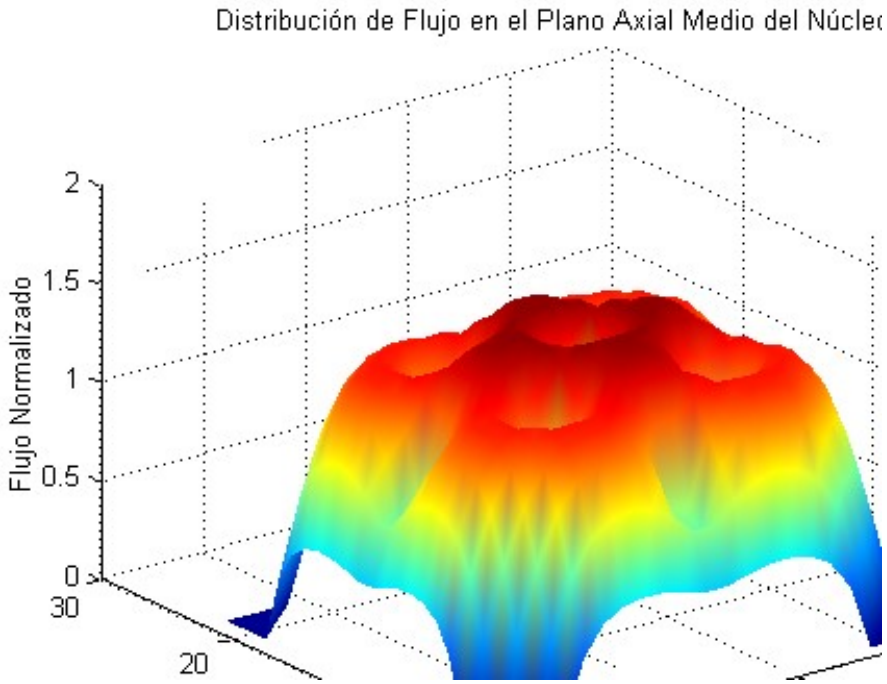


Figura 3. Flujo normalizado en el plano axial central del núcleo

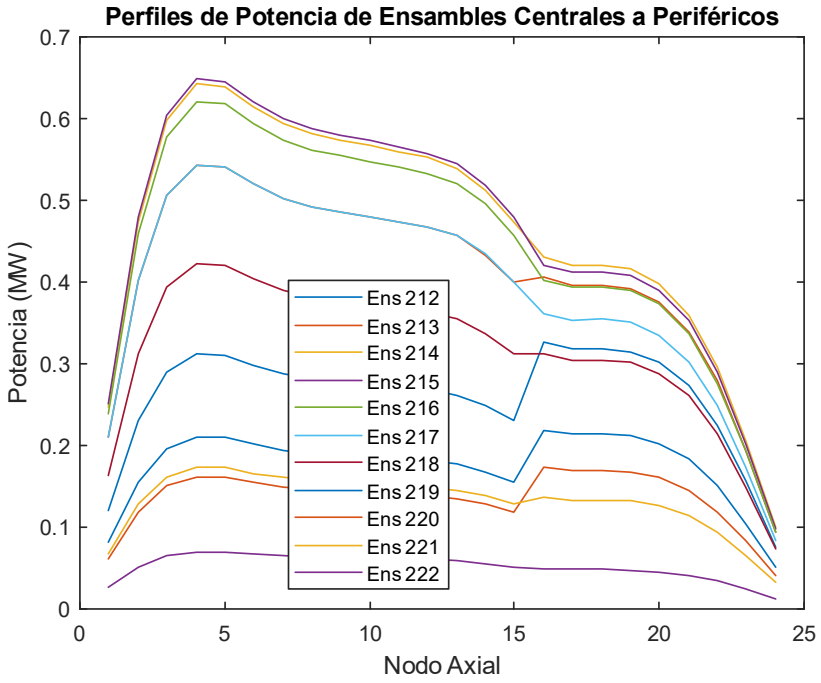


Figura 4. Perfiles de potencia para 11 ensambles consecutivos desde el central al periférico

2.2. Módulo Termohidráulico

El Módulo termohidráulico se extiende a 444 ensambles de un modelo desarrollado con anterioridad [3], que representa al núcleo de un reactor BWR mediante un conjunto de canales en paralelo en el que se resuelven las ecuaciones de conservación considerando tres regiones, iniciando con una región de una sola fase, que al avanzar el fluido axialmente entra a una zona de ebullición subenfriada, y finalmente pasa a una zona de ebullición de bulto [3]. Para el caso de estudio, se requiere de una resolución de un canal por ensamble, por lo que se tienen 444 canales paralelos, cada uno de ellos con su perfil axial de potencia generado por el módulo neutrónico.

Para obtener el estado estacionario, el flujo en cada canal se inicializa con el valor promedio por ensamble, se calcula la caída de presión en cada canal y se itera actualizando el flujo hasta obtener una caída de presión igual para todos los canales.

La Figura 5 muestra los flujos de refrigerante por ensamble en el núcleo. Dado que el flujo en dos fases presenta mayor resistencia hidráulica que en una sola fase, se observan pequeñas prominencias en los puntos correspondientes a barras de control parcialmente insertadas que reducen la potencia en su periferia, reducen la generación de vapor y resistencia hidráulica, y promueven mayor flujo de agua.

En la Figura 1 se observa que el ensamble 212 se localiza en el centro del núcleo, y el ensamble 222 en la periferia. La Figura 6 muestra el perfil de densidad para los ensambles en la trayectoria desde el central (212, caliente), hasta el periférico, (222, frío). Se observa que el ensamble con mayor potencia es el ensamble 215, dado que existe una barra de control parcialmente insertada en el centro del núcleo.

El módulo termo hidráulico genera la información de fracciones de vacío, entalpía, temperatura del modelador, de la pastilla, y del encamisado, para 25 nodos axiales en cada ensamble. Se tiene en este punto una caracterización completa, tanto de generación de potencia como de condiciones termo hidráulicas, con la cual se pueden evaluar diferentes correlaciones para el cálculo de flujo de calor crítico.

En este punto previo al cálculo de flujo crítico, se observó que el módulo nuclear hizo la aproximación de flujo neutrónico en la frontera igual a cero. Esta simplificación produce un error en el flujo de los ensambles periféricos, pero el error en estos ensambles no es importante cuando el objetivo es analizar el CHFR, por ser los ensambles periféricos los que generan menor cantidad de calor y además cuentan con mayor refrigerante; en consecuencia, los ensambles periféricos no son limitantes desde la perspectiva de presentar flujo de calor crítico.

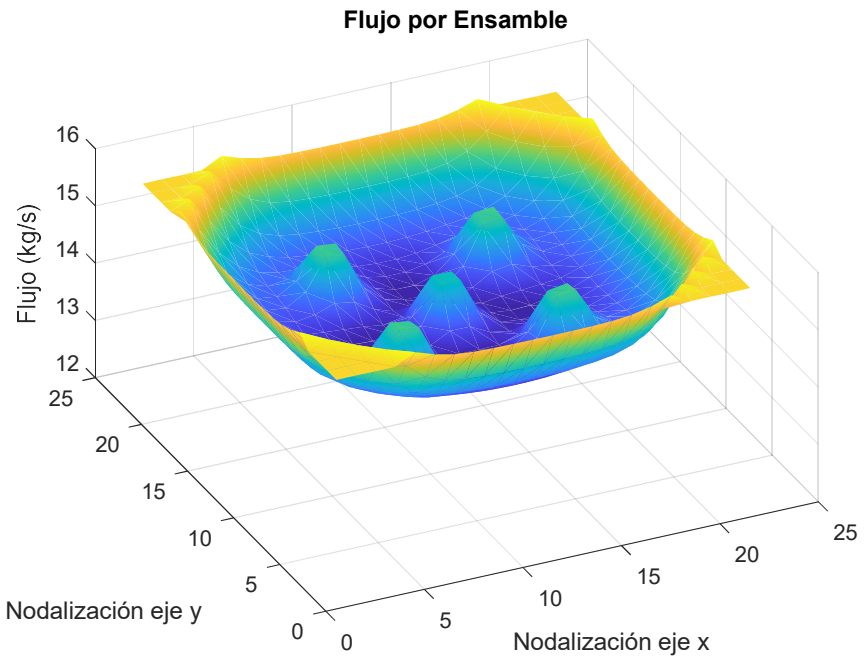


Figura 5. Flujo de refrigerante en el núcleo del reactor

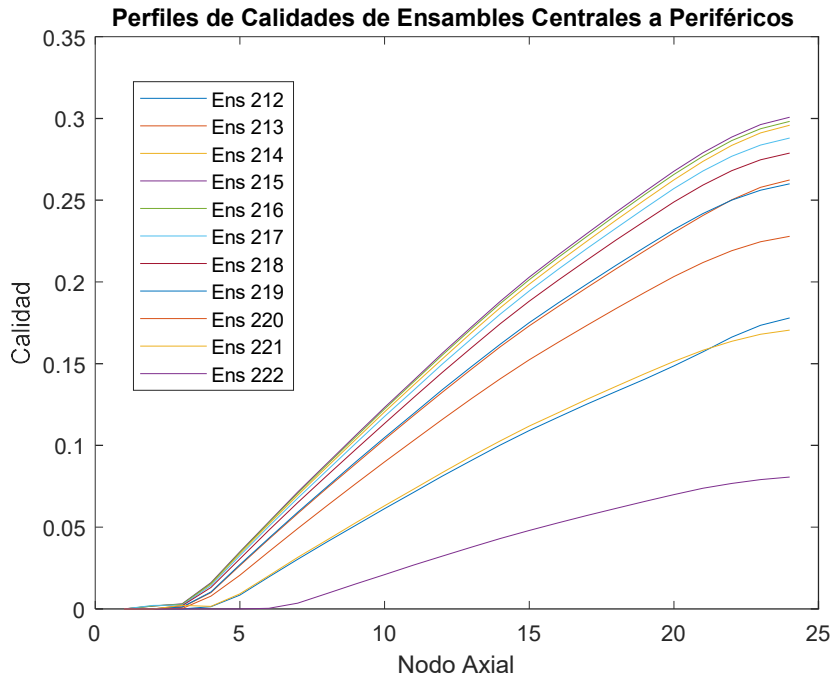


Figura 6. Perfiles de calidad para 11 ensambles consecutivos desde el central al periférico

2.3. Modelos para Flujo de Calor Crítico

Durante la operación de un reactor, el calor generado por las varillas de combustible se remueve mediante el agua o la mezcla agua/vapor que circula por el ensamble de combustible. Si la potencia generada por la varilla aumenta, aumenta también el calor que debe ser evacuado, así como el vapor generado. A cierta potencia se desarrolla una capa de vapor (ebullición de transición) que cubre la superficie de la varilla y reduce la transferencia de calor de la varilla al agua, en este caso la varilla se sobrecalienta y se puede dañar el combustible. El límite CHFR (Critical Heat Flux Ratio) protege al combustible de daño producido por entrar en ebullición de transición limitando la potencia o calor generada por el combustible.

$$CHFR = \frac{Flujo\ de\ calor\ crítico}{Flujo\ de\ calor\ actual} \tag{5}$$

Donde el flujo crítico se obtiene de diversas correlaciones disponibles en la literatura, las cuales son típicamente dependientes de las condiciones termo-hidráulicas locales, tales como calidad de vapor, flujo de calor, el flujo de agua, entalpia, presión, subenfriamiento, entre otras variables, dependiendo de la correlación a emplear. Existe un gran número de correlaciones en la literatura [4], y entre las correlaciones más ampliamente usadas están la W-3 de Westinghouse, y la de Hench-Levy. De particular interés resultan las desarrolladas por General Electric, de las cuales se seleccionan dos [5]. En el presente documento, a las dos correlaciones de General Electric se les identificará como GE-1 y GE-2.

Las correlaciones seleccionadas se comparan preliminarmente mediante un caso de estudio consistente en una familia de curvas para un sistema a 1,000 psia con flujos de refrigerante entre 0.25 y 1.25 lb/hr-ft^2.

2.3.1. Modelo con Correlación W-3

La correlaciónW-3 desarrollada por Westinghouse es muy conocida y empleada [4,5,6], particularmente en reactores PWR. La versión básica de W-3 considera generación axial uniforme de calor y aplica a calidades entre -0.15 y 0.15. Su rango de flujo es de 1.0 a 5.0 lb/hr-ft^2.

$$\frac{q''_{cri}}{10^6} = \begin{cases} \{(2.022 - 0.0004302p) + (0.1722 - 0.0000984p) \\ \times \exp[(18.177 - 0.004129p)X]\}[1.157 - 0.869X] \\ \times \left[(0.1484 - 1.596X + 0.1729X|X|)\left(\frac{G}{10^6}\right) + 1.037 \right] \\ \times [0.2664 + 0.8357\exp(-3.151D_e)][0.8258 + 0.000794(H_{sat} - H_{in})] \end{cases} \tag{6}$$

Donde q"$_{cri}$ es el flujo de calor crítico en BTU/hr-ft^2, p es presión, X es la calidad, G es el flujo másico, H es la entalpía y D_e es el diámetro equivalente. La Figura 7a muestra el comportamiento

de la correlación. El flujo crítico crece muy rápidamente para calidades superiores a 0.15, por lo que su aplicabilidad a BWRs es limitada.

2.3.2. Modelo con Correlación Hench-Levy

Janssen y Levy publicaron en 1962 ecuaciones para predecir el flujo crítico basado en la definición de un conjunto de líneas limitantes que envuelven datos experimentales de flujo con calentamiento uniforme. Una revisión a esta correlación fue realizada por Hench y Levy para flujos másicos entre 0.2 y 1.6 × 10^6 lb/hr-ft^2 y publicada por General Electric en 1966 [4,6]

$$\frac{q''_{cr}}{10^6} = \begin{cases} 1 & x_e \le (x_e)_1 \\ 1.9 - 3.3x_e - 0.7\tanh^2\left(\dfrac{3G}{10^6}\right) & (x_e)_1 \le x_e \le (x_e)_2 \quad BTU/hr-ft^2 \\ 1.9 - 3.3x_e - 0.7\tanh^2\left(\dfrac{3G}{10^6}\right) & x_e \le (x_e)_1 \end{cases} \tag{7}$$

donde

$$(x_e)_1 = 0.273 - 9.212\tanh^2\left(3G/10^6\right)$$
$$(x_e)_2 = 0.5 - 0.7x_e - 0.269\tanh^2\left(3G/10^6\right) + 0.0346\tanh^2\left(2G/10^6\right)$$
$$\frac{q''_c(P)}{q''_c(1000)} = 1.1 - 0.1\left(\frac{P-600}{400}\right)^{1.25}$$

Donde q''_{cr} es el flujo de calor crítico en BTU/hr-ft^2, x_e es la calidad en equilibrio, G es el flujo másico y P es la presión. El factor de corrección por presión cubre un rango de presiones entre 600 y 1460 psia. Dado que esta correlación se generó con datos experimentales y con flujo de calor homogéneo, no captura el efecto de la variación axial de potencia, y la localización axial del CHF no se predice correctamente. La Figura 7b muestra las líneas del flujo crítico con la correlación Hench-Levy.

2.3.3. Modelo con Correlación GE-1

Tong presenta una correlación de General Electric que estuvo en servicio en el año de su publicación [5]. Esta correlación está desarrollada para una presión de 1000 psia y cuenta con un factor de corrección válido para presiones de 600 a 1450 psia. La correlación es función de la calidad y aplica para flujos entre 0.4 y 6.0 ×10^6 lb/hr-ft^2, y calidades desde negativas hasta 0.45

$$\frac{q''_{cr,1000}}{10^6} = \begin{cases} 0.705 + 0.237\left(\dfrac{G}{10^6}\right) & x \le x_1 \\ 1.63 - 0.270\left(\dfrac{G}{10^6}\right) - 4.71x & x_1 \le x \le x_2 \\ 0.606 - 0.164\left(\dfrac{G}{10^6}\right) - 0.653 & x_2 \le x \end{cases} \tag{8}$$

donde

$$x_1 = 0.197 - 0.108\left(G/10^6\right)$$
$$x_2 = 0.254 - 0.026\left(G/10^6\right)$$
$$q_c^{"}(P) = q_{cr,1000}^{"} + 440\left(1000 - P\right)$$

Donde q''_{cr} es el flujo de calor crítico en BTU/hr-ft^2, y x es la calidad. La Figura 7c muestra el comportamiento de la correlación GE-1, el cual es muy similar a las líneas de Hench-Levy, pero con valores menores, lo que indica que es menos conservadora que Hench-Levy.

2.3.3. Modelo con Correlación GE-2

Otra correlación de GE presentada por Tong, también en servicio en la fecha de su publicación [5], es válida para presiones de 600 a 1450 psia, flujos entre 0.2 y 6.2 $\times 10^6$ lb/hr-ft^2, y calidades desde -0.12 hasta 0.44 está dada en la Ecuación (9). Esta correlación tiene la particularidad de considerar el diámetro equivalente del ensamble.

$$\frac{q_{crit,EU}^{"}}{10^6} = \left(\left\{1 + 0.16\left[\frac{1000-P}{400}\right]^2 - 0.04\left[\frac{1000-P}{400}\right]^2\right\}\left[1 - 0.008E\left(\frac{G}{10^6}\right)^{0.8}\right]^{-1}\right) \left\{0.0172E\left(\frac{G}{10^6}\right)^{0.8} - \left[0.3175\left(\frac{G}{10^6}\right)^{-0.2} - 1.85\left(\frac{G}{10^6}\right)^{-0.1}\right] - \left[2.4 + 3.2D_e + 0.83D_e\left(\frac{G}{10^6}\right)\right]\left[x - 0.0629\left(\frac{G}{10^6}\right)^{-2} + 0.343\left(\frac{G}{10^6}\right)^{-1} - 0.249 + 0.002\left(\frac{G}{10^6}\right)^2\right]\right\} \quad (9)$$

Donde q''_{crit} es el flujo de calor crítico en BTU/hr-ft^2, x es la calidad, G es el flujo másico, D_e es el diámetro equivalente, y el factor E está definido como

$$E = \left(\frac{D_o}{D_i}\right)^{0.5}\left(D_o - D_i\right)^{-0.2} \quad (10)$$

Donde D_o y D_i son los diámetros interior y exterior de la región anular equivalente de flujo. La Figura 7d muestra el comportamiento de la correlación GE-2, el cual es una sola función para todo valor de calidad y no presenta las no-linealidades dependientes de la calidad como las de GE-1 y Hench-Levy.

3. RESULTADOS

Como caso de estudio, se selecciona un escenario base con el reactor BWR dimensionado como una unidad de Laguna Verde operando en condiciones nominales de incremento extendido de potencia y con un esquema de barras de control representando aproximadamente mitad de ciclo. A partir de este caso base, se reduce el flujo manteniendo constantes las posiciones de barras de control. Los casos analizados corresponden a 100, 90, 80 y 70 % de flujo en el núcleo, y las potencias correspondientes son aproximadamente 100, 94, 87 y 80 %, de acuerdo al mapa caudal-potencia.

Para cada uno de estos cuatro casos, se calcula la distribución de potencia mediante el módulo neutrónico. Los perfiles axiales calculados por ensamble se alimentan al módulo termohidráulico, y finalmente los perfiles termohidráulicos resultantes por ensamble se emplean para calcular el flujo crítico correspondiente.

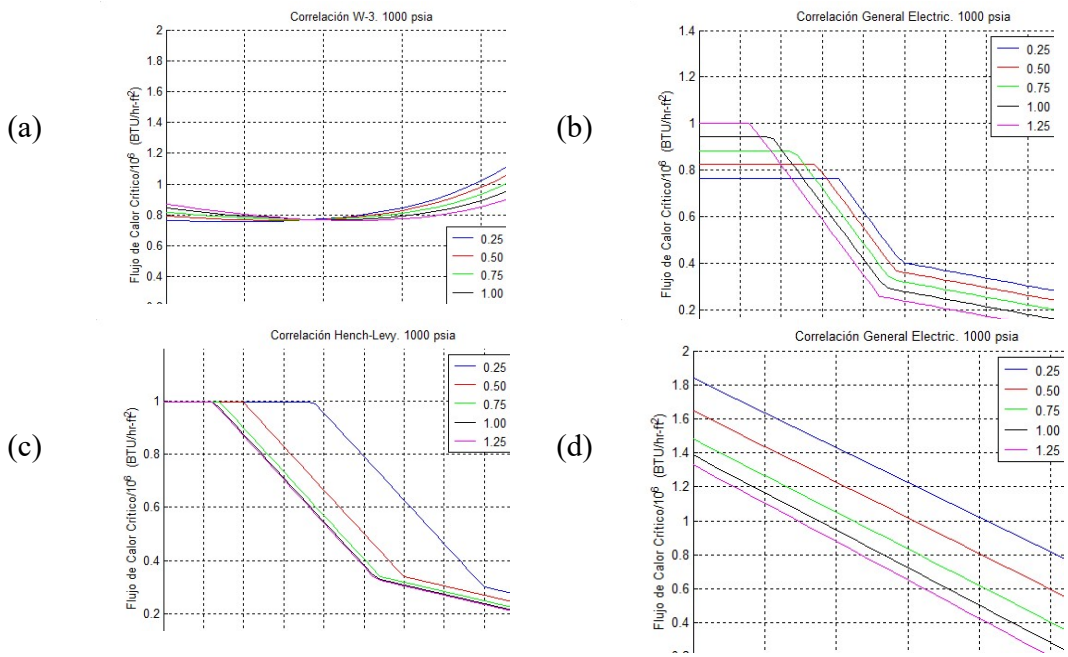


Figura 7. Correlaciones para flujo de calor crítico

En la Figura 8 se muestran los resultados para el caso base empleando la correlación W-3. La Figura 8a muestra los flujos actual y crítico para flujo-potencia 100-100. El CHFR para todos los ensambles se muestra en la Figura 8b, en los que el valor mínimo por ensamble, MCHFR, se identifica mediante un pequeño círculo rojo. En todos los casos el MCHFR ocurre en el nodo axial 5. Las familias de curvas en las Figuras 8a y 8b representan a los 444 ensambles, y se muestran en colores para evitar saturar la gráfica de un solo color.

Para un plano axial dado, la gráfica del MCHFR para todos los ensambles representa una superficie, que es más fácil de interpretar si se grafica su inverso 1/MHCFR, la cual se muestra en la Figura 8c. Se observa la fuerte dependencia con el perfil de potencia.

La Figura 8d muestra el valor del MCHFR para todos los ensambles, del 1 al 444. Apoyándonos en la Figura 1, se tiene que el primer renglón de los ensambles que conforman al núcleo consta de los ensambles 1 a 14, el segundo renglón consta de los ensambles 15 a 30, el tercero del 31 al 48, y así sucesivamente. Centrando la atención en los ensambles 1 a 50 de la Figura 8d, se observa que hay tres regiones en forma de "W". El pico central de la "W" corresponde al efecto de barras de control insertadas en la parte central del renglón, y hacen que el CHFR sea mayor, o más seguro.

Los ensambles 1 a 14 son periféricos, relativamente fríos, por lo que presentan un CHFR mucho mayor a la unidad. El siguiente renglón corresponde a los ensambles 15 a 30, los cuales siguen siendo relativamente fríos, y su W correspondiente está menos alejado de la unidad. Ya el tercer renglón muestra mayor generación de potencia, y su perfil en forma de W se acerca al de los ensambles centrales.

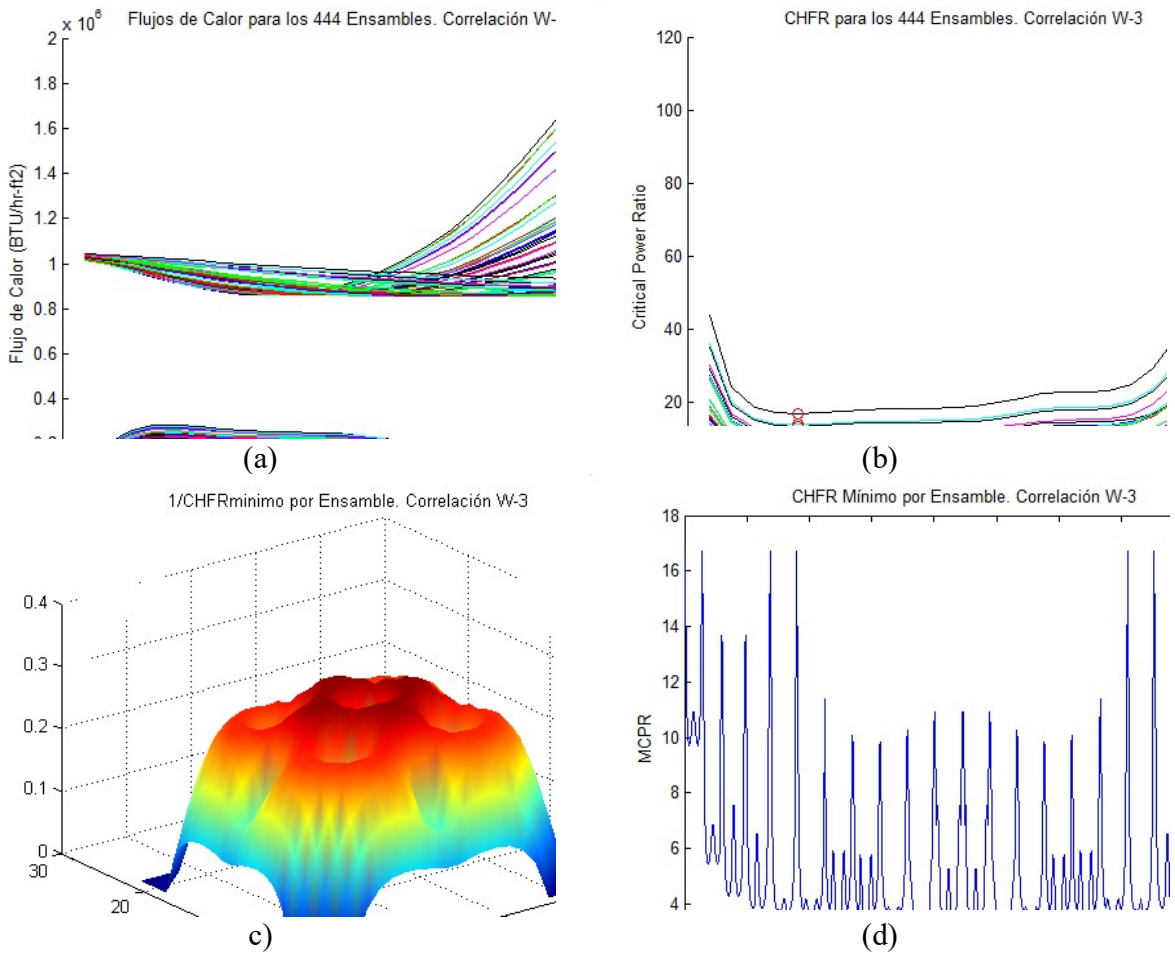


Figura 8. Resultados con la correlación W-3 para el caso base

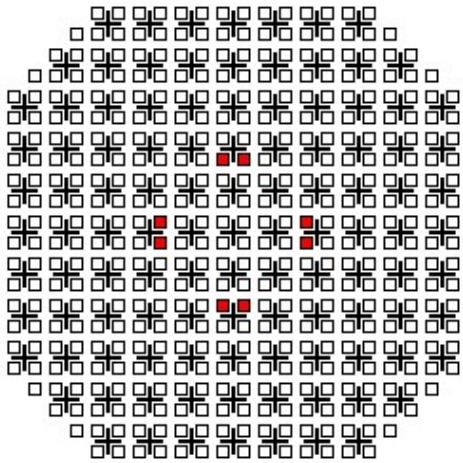


Figura 9. Ubicación de los ensambles limitantes

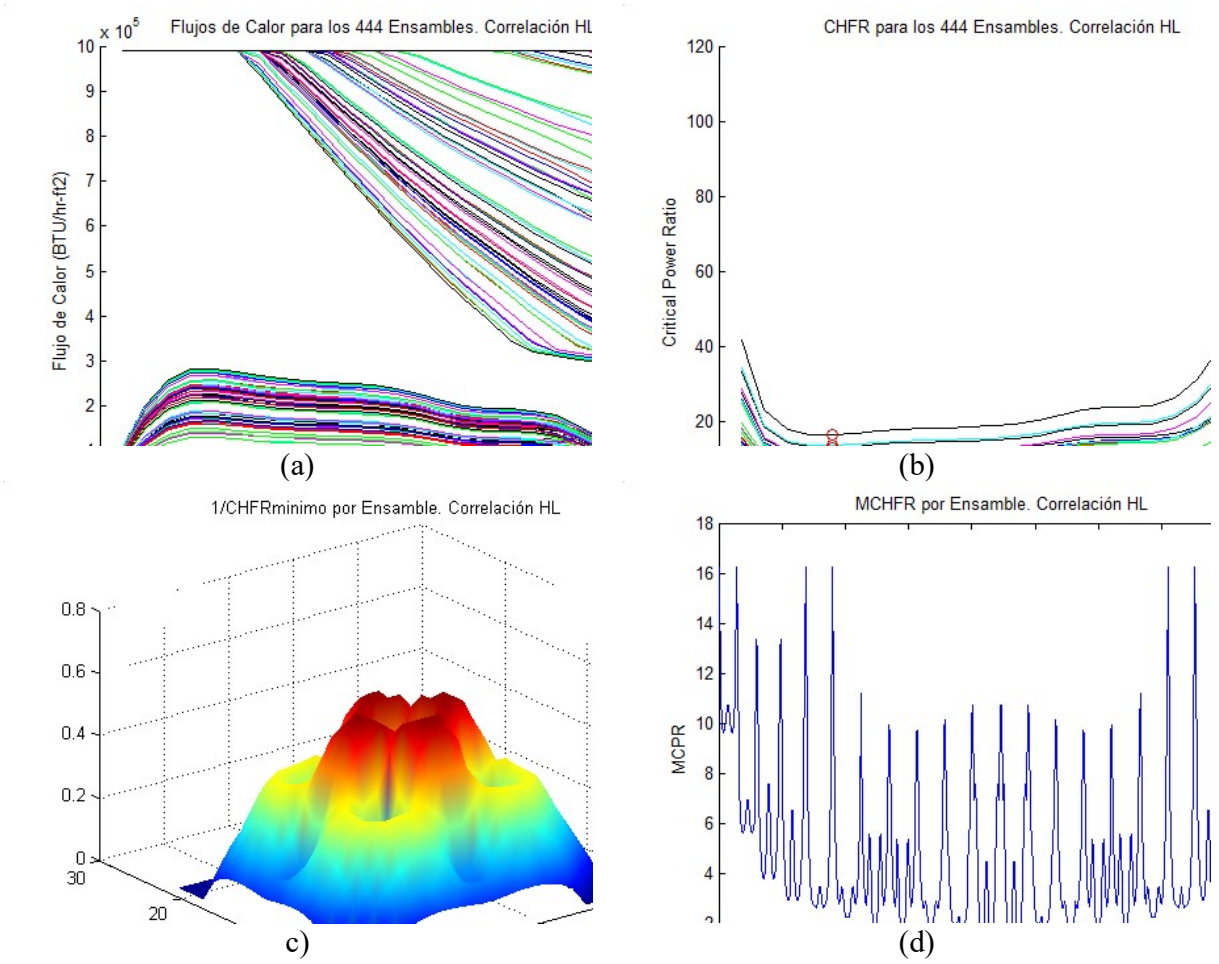


Figura 10. Resultados con la correlación Hench-Levy para el caso base

En la Figura 8d se observa que el MCHFR más pequeño, o limitante, corresponde a los ensambles 145,146,208,215,230,237,299 y 300. La ubicación relativa de estos ensambles más limitantes se muestra en rojo en la Figura 9, y su localización concuerda con la distribución de potencia mostrada previamente en la Figura 3.

La Figura 10 muestra los resultados con la correlación Hench-Levy. Similarmente a la correlación W-3, el valor MCHFR ocurre en el nodo axial 5, pero no en todos los casos. El CHFR presenta valores menos alejados a la unidad con esta correlación. La Figura 10c muestra una distribución 1/MCHFR más pronunciada en los ensambles de mayor generación de potencia.

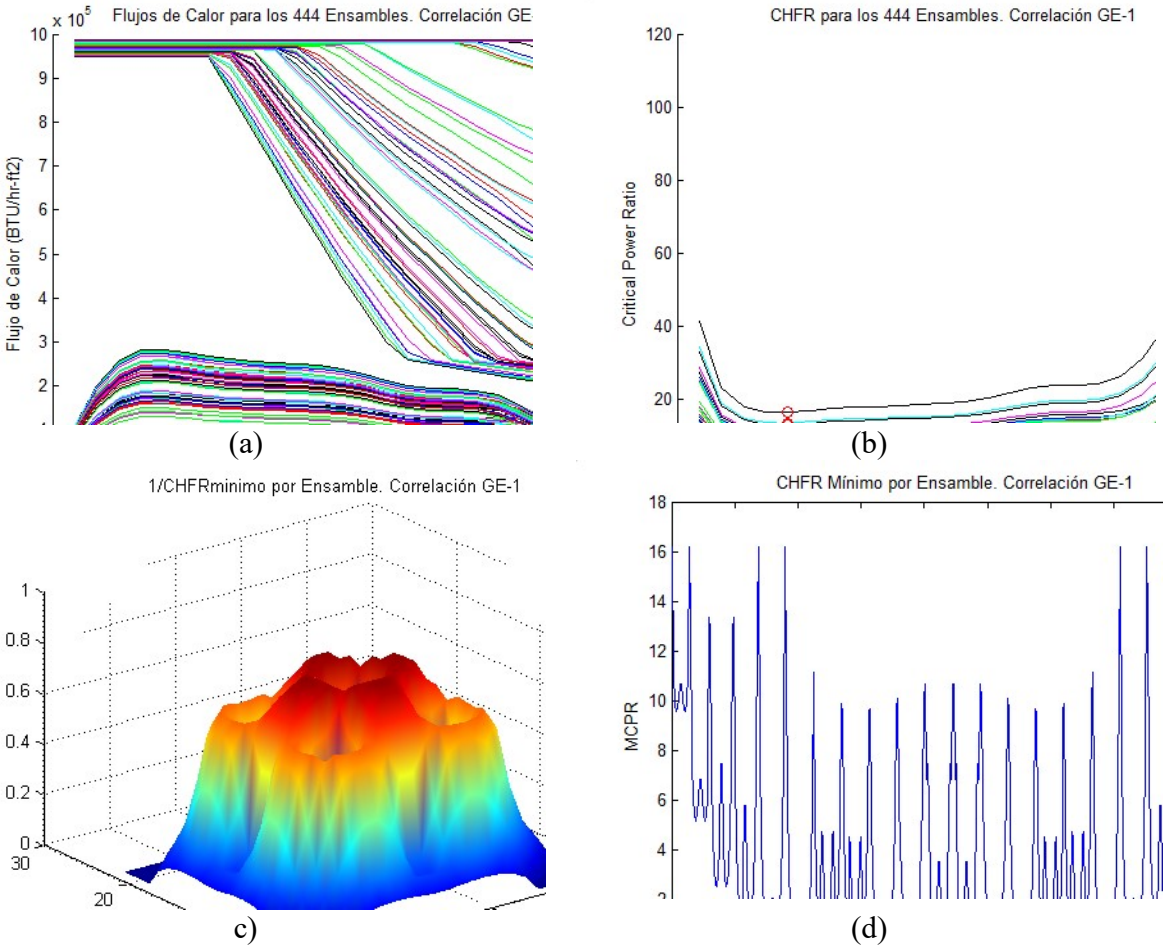


Figura 11. Resultados con la correlación GE-1 para el caso base

La Figura 11 muestra los resultados con la correlación GE-1. Los nodos donde ocurre el MCHFR son similares a los obtenidos con Hench-Levy, aunque la distribución de 1/MCHFR es menos pronunciada para los ensambles de mayor generación de calor.

La Figura 12 muestra los resultados con la correlación GE-2. El valor MCHFR ocurre en diferentes nodos, según su generación de calor y las condiciones termohidráulicas particulares a cada nodo axial. Esta es la correlación que presenta valores MCHFR más cercanos a la unidad. La Figura 12c muestra una distribución del 1/MCHFR considerablemente más pronunciada en los ensambles de mayor generación de potencia.

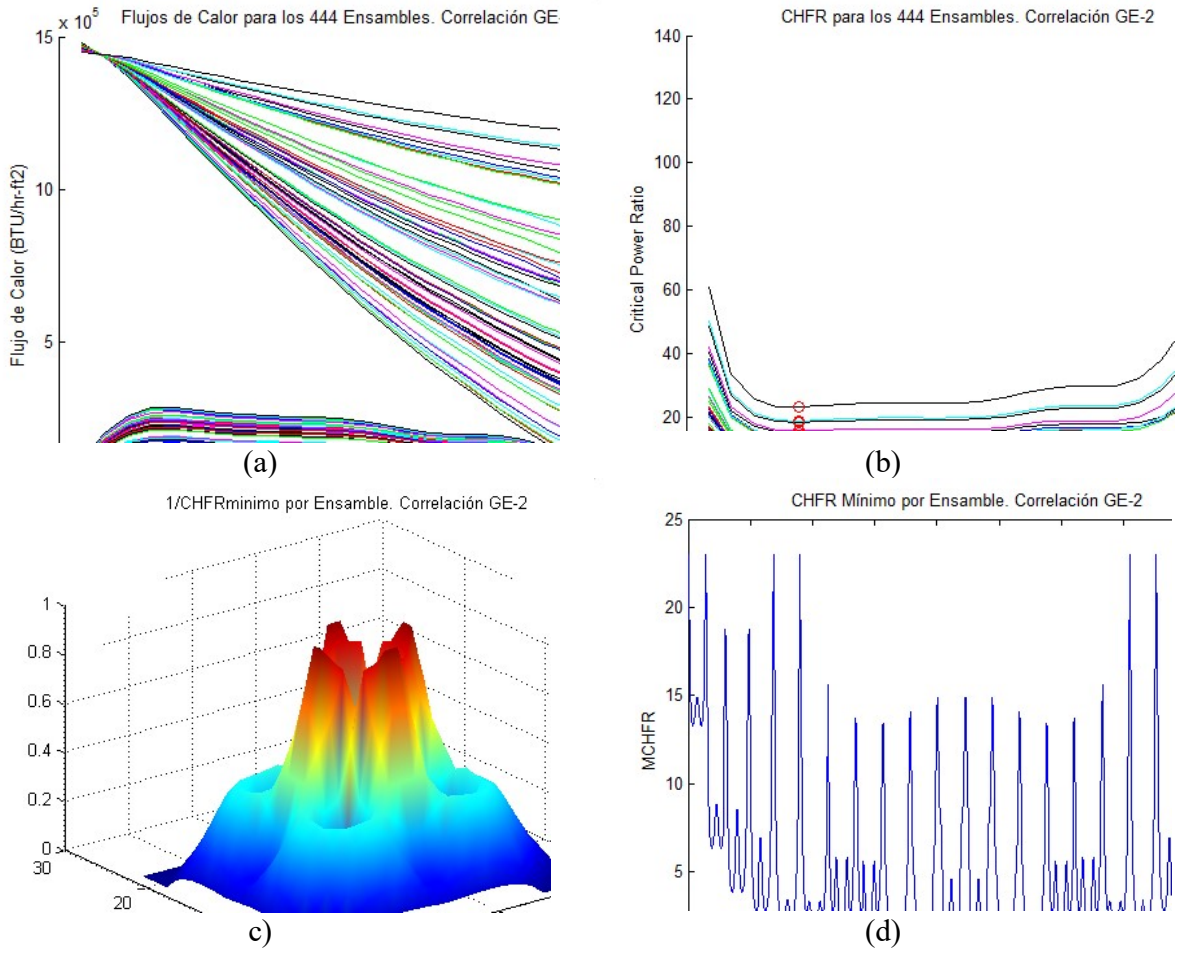


Figura 12. Resultados con la correlación GE-2 para el caso base

Los resultados analizados hasta este punto corresponden al caso base, condiciones nominales. La Tabla I presenta un resumen de los resultados obtenidos para los diferentes puntos del mapa flujo-potencia, y la Figura 13 muestra gráficamente todos los resultados obtenidos. La correlación W-3 presenta una mayor diferencia en sus resultados, lo cual se debe a que no fue diseñada para las calidades propias de un BWR. El resto de las correlaciones presentan resultados más próximos entre sí. La correlación que más se aproxima al valor límite es GE-2, seguida por GE-1.

Las correlaciones Hench-Levy y GE-1 muestran un comportamiento lineal con respecto al flujo en el núcleo. Para los casos listados en la Tabla I, a mayor flujo se tiene también mayor potencia y el MCHFR disminuye. Por otra parte, W-3 y GE-2 presentan un cambio de pendiente en aproximadamente 90% de flujo (correspondiente a 94% de potencia). GE-2 incluso cambia de pendiente negativa a ligeramente positiva. Tanto W-3 como GE-2 se basan en una formulación más dependiente de las condiciones termohidráulicas, como se observa en las Ec (6) y (9).

Tabla I. Resultados de CHF mínimo para diferentes flujos en el núcleo

Caso	Correlación	MCHFR	1/MCHFR	Ensamble	Nodo
100% Flujo 100% Potencia	W3	3.2235	0.3102	145	5
	HL	1.0166	0.9836	145	5
	GE-1	1.2183	0.8208	145	19
	GE-2	1.0070	0.9930	145	22
90% Flujo 94% Potencia	W3	3.3885	0.2951	145	5
	HL	1.7548	0.5699	145	19
	GE-1	1.3479	0.7419	145	19
	GE-2	0.9798	1.0206	145	22
80% Flujo 87% Potencia	W3	3.6216	0.2761	145	5
	HL	1.8646	0.5363	145	19
	GE-1	1.5152	0.6599	145	19
	GE-2	1.0771	0.9284	145	22
70% Flujo 80% Potencia	W3	3.8973	0.2566	145	5
	HL	1.9887	0.5028	145	19
	GE-1	1.6971	0.5893	145	19
	GE-2	1.1624	0.8603	145	22

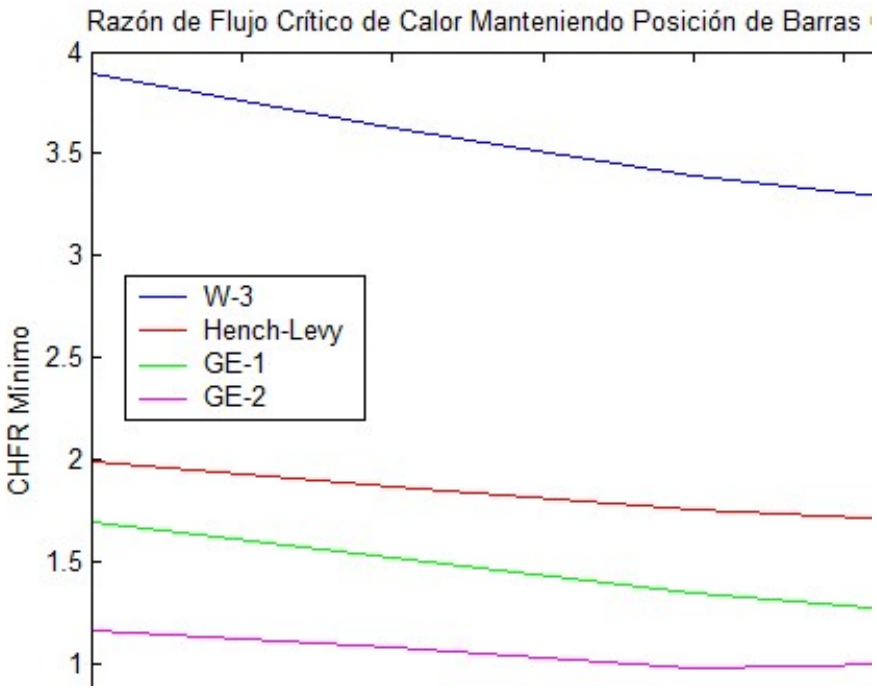


Figura 13. Resultados de MCHFR para las correlaciones analizadas

4. CONCLUSIONES

Se analizaron cuatro correlaciones para flujo de calor crítico, siendo éstas la W-3 de Westinghouse, la Hench-Levy y dos correlaciones de General Electric reportadas en la literatura. La correlación W-3 está limitada a bajas calidades de vapor, por lo que no resulta una opción viable para ensambles de reactores BWR. La correlación de Hench-Levy cubre las calidades de vapor propias de un reactor BWR, pero por la naturaleza de su planteamiento que engloba los datos experimentales de flujo crítico, no resulta la mejor opción si se desea un cálculo tipo mejor estimación. Las correlaciones de General Electric consideran la termohidráulica, que les permite particularizar el cálculo a las condiciones operativas de los ensambles, por lo que producen resultados con mayor detalle.

De las cuatro correlaciones estudiadas, la GE-2 considera el mayor número de parámetros físicos, y es la que produce valores más restrictivos de CHFR. Los resultados obtenidos son la base para realizar trabajo futuro en el desarrollo del cálculo de los límites térmicos de un BWR real, cuyos datos de planta puedan ser usados como benchmark y obtener un simulador de núcleo que pueda ser aplicado para análisis y entrenamiento en el seguimiento operativo de límites térmicos.

REFERENCIAS

1. James J. Duderstadt, Louis J. Hamilton *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley and Sons, 1976.

2. Matlab, The Language of Technical Computing. Release 12. The MathWorks Inc.

3. M. Ceceñas-Falcón, R.M. Edwards, “Stability monitoring tests using a nuclear-coupled boiling channel model”, *Nuclear. Technology*, **131**, 2000.

4. L.S. Tong, Y.S. Tang, *Boiling Heat Transfer and Two-Phase Flow*, Second Edition, Taylor & Francis. 1997.

5. L.S. Tong, *Boiling Crisis and Critical Heat Flux*. U.S. Atomic Energy Commission, 1972.

6. N.E. Todreas, M.S. Kazimi, *Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals*. Hemisphere Publishing, USA., 1989.

Thermodynamic Assessment of a Nuclear Hydrogen Production Cycle with an Optimized Heat Exchanger Network

Luis Carlos Juárez Martínez, Gilberto Espinosa Paredes, Alejandro Vázquez Rodríguez, Hernando Romero Paredes Rubio
Universidad Autónoma Metropolitana
Av. San Rafael Atlixco 186, Leyes de Reforma 1ra Secc, Iztapalapa, 09340 Ciudad de México, CDMX
lcjm@xanum.uam.mx; gepe@xanum.uam.mx; vara@xanum.uam.mx; hrp@xanum.uam.mx

Abstract

In this paper, a thermodynamic analysis of a Sulfur-Iodine thermochemical hydrogen production cycle was performed. At first, a new heat exchanger network configuration was designed by means a heuristic method. Then, an exergy and anergy analysis was carried out in order to analyze the thermal efficiency of the proposed heat exchanger network compared to the reference case. With this study, a reduction of the energy inputs of the process was achieved; being 58.59% for cooling and 52.31% for heating, both lower than the reference case. Regarding the exergy and anergy calculations for the new heat exchanger configuration, the calculated exergy was 365.202 MJ/Kmol-H_2 with an anergy of 187.66 MJ/Kmol-H_2, being the latest lower than that for the reference case 338.97 MJ/Kmol-H_2. This means that less energy it is being wasted improving the thermal efficiency of the cycle and reducing the plant operational cost.

1. INTRODUCTION

Hydrogen is chemical element widely used in the chemical and petrochemical industry to produce a wide variety of goods and services. In addition, it is considered as a clean energy carrier alternative and it is expected to play an important role in the transportation sector because when it is burnt in an engine water is the only by-product, helping to reduce the greenhouse gas emissions (GHG) [1, 2]. Although, hydrogen is the most abundant element in the universe, it cannot be found in a free state over the earth crust, so it needs to be manufactured. Its environmental impact is strongly dependent on the production method. About 96% of hydrogen production comes from fossil fuels i.e. steam reforming and cracking of natural gas, unfortunately both methods led to CO_2 production that causes a negative impact on the environment [3].

Nuclear power is a carbon-free energy base-load that has a high efficiency and capacity to produce electricity, reason why it is an alternative option to fossil power plants. A study showed that a coal power plant emits about 1 kg-CO_2 per kWh produced and a gas power plant emits 400 g-CO_2 per kWh, meanwhile a nuclear power plant showed practically zero CO_2 emissions [4]. This makes the nuclear power a suitable option to produce hydrogen efficiently with a low CO_2 emission. Additionally, the nuclear power can increase its profitability and competitiveness when

it is integrated to a thermochemical, electrochemical or hybrid hydrogen cycles, which also increases its attractiveness for more investors [1].

According to this, the main aim of this paper was to reduce the energy utilization of a Sulfur-Iodine (S-I) thermochemical cycle improving its thermal efficiency by means a new heat exchanger network (HXN) configuration. In addition, to provide technical information that can be applied in any other thermal process.

2. THERMOCHEMICAL SULFUR-IODINE CYCLE

Hydrogen production by direct water decomposition can be performed at very high temperature, about 4310 K [5]. Then, in 1960s thermochemical cycles were proposed to produce hydrogen from water at lower temperature than direct decomposition by combining some endothermic and exothermic chemical reactions [6]. Although there are different thermochemical cycles, the Sulfur-Iodine cycle is one of the most studied methods to produce hydrogen coupled to a nuclear reactor [7].

It can be said that a thermochemical S-I cycle transforms nuclear energy into hydrogen which is an energy carrier. This is achieved by the following general reactions [5].

The Bunsen reaction is an exothermic reaction that proceeds at relatively low temperature ~373 K, as follows:

$$I_{2(l)} + SO_{2(g)} + 2H_2O_{(g)} \rightarrow 2HI_{(aq)} + H_2SO_{4(aq)} \tag{1}$$

The second reaction is an endothermic H_2SO_4 decomposition reaction, which proceeds in two steps at different temperatures: reaction (2) proceeds between 673-773 K and reaction (3) between 1073-1123 K. These temperatures can be supplied by a High Temperature Gas Reactor (HTGR).

$$H_2SO_{4(aq)} \rightarrow SO_{3(g)} + H_2O_{(g)} \tag{2}$$

$$SO_{3(g)} \rightarrow SO_{2(g)} + \frac{1}{2}O_{2(g)} \tag{3}$$

Finally, the third general reaction is an endothermic HI dissociation that proceeds at 723 K, as follows:

$$2HI_{(aq)} \rightarrow H_{2(g)} + I_{2(g)} \tag{4}$$

The reactions 1, 2 and 4 are the general chemical reactions of the cycle. All the products and by-products are recycled, being water and heat the only inputs of the process, as is depicted in Figure 1.

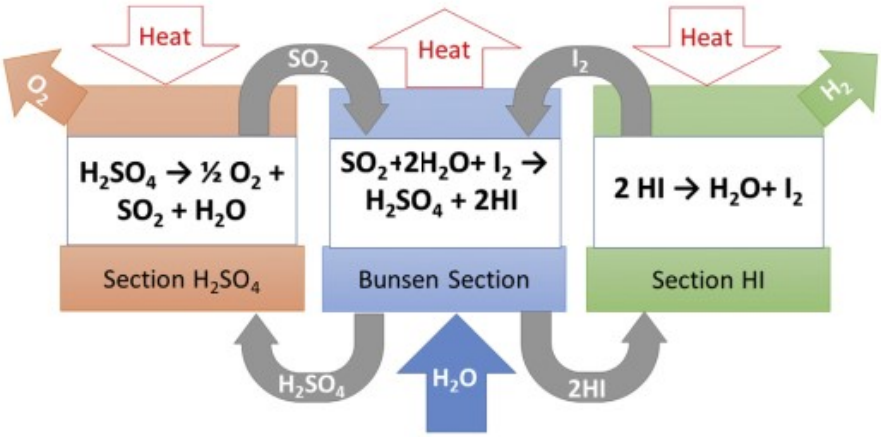


Figure 1. Schematic description of the S-I process [8]

Although some conceptual reactor designs were proposed since 1960s, especially by the USA, Germany and United Kingdome [9], nowadays, there are several reactor concepts around the world that are intended for hydrogen production and co-generation applications, such as: the VHTR: Very High Temperature Reactor (USA), the HTGR: High Temperature Reactor (France), the HTGR-10: High Temperature Gas Reactor (China), the PBMR: Pebble Bed Modular Reactor (South Africa), the VHT: Very High Temperature reactor (Korea) and the HTTR: High Temperature engineering Test Reactor (Japan). They are part of the new generation of nuclear power reactors [10].

3. PLANT OVERVIEW AND CASE DESCRIPTION

The S-I cycle selected for this study was adopted from [11]. This cycle is coupled to the HTTR reactor, which can provide 1223 K of outlet temperature suitable for the endothermic decomposition of H_2SO_4.

The HTTR is a 30 MWth graphite-moderated reactor cooled by helium. The core is formed by 30 prismatic fuel columns with 16 pairs of control rods. The core is surrounded by permanent and removable reflectors as seen in Figure 2. The active core is 2.9 m in height and 2.3 m in diameter with power density of 2.5 MW/cm^3 [12, 13].

The reactor reached its first criticality in November 1998, some safety and control tests were performed in September 1999 and December 2001. In 2004 the maximum coolant temperature was reached (~950°C). The reactor is intended not only for hydrogen production but also to provide experimental information for the HTGRs technology development [14].

Regarding the chemical plant, the process can be described as follows: the exothermic Bunsen reaction proceeds in reactor R_3 and non-miscible products (hydrogen iodide and sulfuric acid) are separated in separator S_2. The sulfuric acid dissociation presented in reaction (2) takes place in reactors R_1 and R_2, respectively. In this step the chemical equilibrium conditions at reaction temperature are taken into account, in which the SO_3 is considered as a new specie in the system

and it is decomposed in reactor R_2. Finally, the production of H_2 and I_2 presented in reaction (4) is performed in reactor R_4. The full plant diagram adopted from [11] is shown in Figure 3.

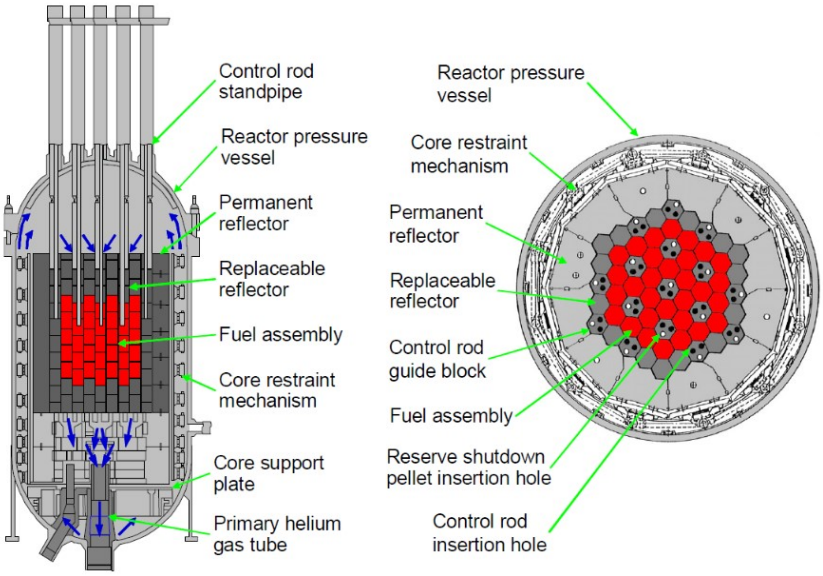
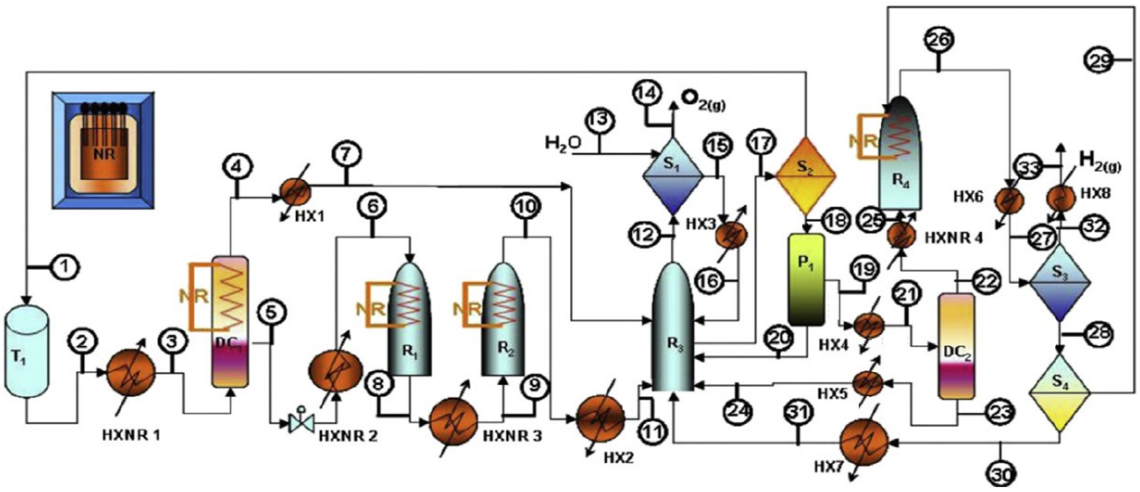


Figure 2. Axial and radial view of the HTTR reactor core and main components [14]



NR: Nuclear Reactor; T_1: Storage Tank H_2SO_4-H_2O: HXNR: Heat Exchangers Nuclear Reactor; HX: Heat Exchangers; R_1: H_2SO_4 Decomposer Reactor; R_2: SO_2 Decomposer Catalytic Reactor; R_3: Bunsen Reactor; R_4: HI Decomposer Reactor; S_1: H_2SO_4-(SO_2+O_2) Separator; S_2: Oxygen Gas Separator; S_3: Liquid-Liquid Phase Gas Separator; P_1: HI_X Purifier; DC_1: H_2SO_4 Column Distillation; DC_2: HI distillation Column.

Figure 3. S-I thermochemical hydrogen production cycle [11]

The mass balance and operating conditions of the whole process are presented in see Table I. The mass balance was made to produce 1 kmol/s of hydrogen.

Table I. Mass balance and operating conditions of the S-I process [11]

Stream No	Phase	Pressure (bar)	Temperature (K)	Molar flow (kmol/s)								
				$H2SO_4*4H2O$	H_2O	H_2SO_4	SO_3	SO_2	O_2	I_2	HI	H_2
1	Liq	1	393	1.000								
2	Liq	1	393	1.000								
3	Liq	1	503	1.000								
4	Gas	1	503		4.000							
5	Liq	1	503			1.000						
6	Gas	1	1123			1.000						
7	Gas	1	393		4.000							
8	Gas	1	1123		1.000		0.171	0.829	0.415			
9	Gas	1	1148		1.000		0.171	0.829	0.415			
10	Gas	1	1148		1.000			1.000	0.500			
11	Gas	1	393		1.000			1.000	0.500			
12	Gas	1	393						0.500			
13	Liq	1	298		1.000							
14	Gas	1	298						0.500			
15	Liq	1	316.7		1.000							
16	Gas	1	393		1.000							
17	Liq	1	393	1.000	10.000					8.000	2.000	
18	Gas	1	393		10.000					8.000	2.000	
19	Gas	1	393		10.000						2.000	
20	Liq	1	393							8.000		
21	Liq	1	353		10.000						2.000	
22	Gas	1	353								2.000	
23	Liq	1	353		10.000							
24	Gas	1	393		10.000							
25	Gas	1	873								2.000	
26	Gas	1	873							1.000	6.000	1.000
27	Gas/Liq	1	450							1.000	6.000	1.000
28	Gas/Liq	1	450							1.000	6.000	
29	Gas	1	450								6.000	
30	Liq	1	450							1.000		
31	Liq	1	293							1.000		
32	Gas	1	450									1.000
33	Gas	1	298									1.000

4. METHODOLOGY

In order to perform the thermodynamic assessment, two tasks were carried out: at first the energy integration was performed with the aim of redesign the heat exchanger network. After, the exergy and anergy values of the new HXN were calculated and compared to the reference case reported in [11].

4.1 Heat Integration

The main aim of the heat integration is to take advantage of the hot and cold streams in a process, in order to reduce the use of external cooling and heating services (utilities). Since 1970s, some methods based on heuristic rules were developed to optimize heat exchanger networks.

The synthesis method was proposed by Rudd et al., in 1973 [15]. They stablished a methodology based on some heuristics to design heat exchanger networks that meets the energy requirements at a lowest cost. The method consists of plotting the heat content of each stream which helps to assign the heat exchanges among the hot and cold streams to design the heat recovery system.

The heuristics are as follows:

- At first, a minimum difference temperature (ΔT_{min}) has to be set up. This parameter is essential to design a heat exchanger network because it must exist a temperature difference in a heat exchanger to provide the best ratio among utility cost and devise cost; normally a ΔT_{min} between 10-20 K is used.
- Once the ΔT_{min} is stablished, the first heat exchange will be between the hot stream with the highest temperature and the cold stream with the highest hot temperature. This is repeated until possible [15].

The use of a minimum difference temperature lower than 10 K increases the heat transfer area leading to a higher investment cost. Hence, in this work a conservative ΔT_{min} of 20 K was used to design the heat exchanger network. The results are presented in Section 5.

The thermal properties of the hot and cold streams involved in a heat exchange process in the reference S-I cycle are shown in Table II.

Table II. Thermal properties of hot and cold streams of the S-I process

ID	Tin (K)	Tout (K)	Pressure (bar)	WCp (kJ/h*K)	Q (kJ/h)
		Hot streams			
HX1	503	393	1	5.003E+05	5.503E+07
HX2	1148	393	1	3.781E+05	2.855E+08
HX4	393	353	1	2.188E+06	8.751E+07
HX6	873	450	1	4.305E+05	1.821E+08
HX7	450	393	1	2.864E+05	1.632E+07
HX8	450	298	1	1.039E+05	1.579E+07
		Cold streams			
HXNR1	393	503	1	1.518E+06	1.670E+08
HXNR2	503	1123	1	5.361E+05	3.324E+08
HXNR3	1123	1148	1	4.265E+05	1.066E+07
HXNR4	353	873	1	2.215E+05	1.152E+08
HX3	316.7	393	1	1.972E+05	1.505E+07
HX5	353	393	1	1.978E+06	7.910E+07

In Table II, it can be seen that hot stream needs to be cooled down and cold stream needs to be heated. In the reference case the use of helium and water are used as the utilities for heating and cooling, respectively.

4.2 Exergy and Anergy Calculations

The exergy (E) is a thermodynamic property used to determine the potential of useful work of a given amount of energy in some specific state and it is useful to evaluate the quality of the energy available. The rest of the energy that cannot be used is discarded as wasted energy; this energy is referred as anergy (A) [11].

Hence, at any specific state, the exergy is calculated as follows:

$$E = h + Ts \tag{5}$$

Where E is the exergy of the substance, h is the specific enthalpy, s is the specific entropy and T is the temperature of the substance. This equation was applied to each stream at inlet and outlet conditions. Then, the exergy difference was computed as shown in Equation 6.

$$\Delta E = (h_i - h_0) - T_0(s_i - s_0) \tag{6}$$

Where ΔE is the change of exergy of a stream in the heat exchanger devise, h is the specific enthalpy, s is the entropy, ith is the specific point of the cycle and the subscript 0 is the reference ambient condition [4, 16]. On the other hand, the global anergy of each heat exchanger was obtained as shown in Equation 7. This is the energy than cannot be used and it is lost due to the irreversibilities of the process.

$$\Delta A = \Delta E_1 + \Delta E_2 \tag{7}$$

Where subscript 1 and 2 refers to the stream 1 and 2 in the heat exchanger. The exergy and anergy calculations were performed for each plant component, e.g. coolers, heaters, chemical reactors, separators and distillation columns. But only the exergy and anergy generated in the heat exchanger network was compared in this paper due to the main aim of this works was to evaluate the new heat exchanger network obtained by the synthesis method. The rest of the process components did not undergo any change.

5. RESULTS AND DISCUSSION

Based on the thermodynamic properties presented in Table II, the heat exchanger network designed by means the synthesis method is as follows: at first, the stream HX2 has the highest hot temperature 1148 K then it can exchange heat with the stream HXNR4 that has highest hot temperature of cold streams, 873 K. The HXNR4 fulfilled its energy requirement leading a remaining HX2' stream with a remaining outlet temperature T' and heat Q' equals to 843.39 K and 1.703E+08 kJ/h, respectively.

Second, the new highest hot temperature of hot streams is 873 K from stream HX6, this was used to heat up the HXNR1 stream from 393 K to 503 K; the result was a remaining HX6' stream with 485.16 K temperature and 1.514E+07 kJ/h of energy.

The third exchange was the remaining HX2' with 843.39 K and stream HX5 with a hot temperature of 393 K. The stream HX5 was completely integrated leading a remaining HX2'' with 634.20 K of outlet temperature and 9.121E+07 kJ/h of energy. Although, the streams HX5 and HX3 have the same hot temperature (393 K), the HX5 has the highest energy requirement (7.910E+07 kJ/h), hence it is chosen first.

Finally, the last heat exchange was between the streams HX2'' and HX3. The energy requirement for HX3 was fulfilled and the stream HX2'' has a new outlet temperature of 594.40 K with a

remaining energy of 7.616E+07 kJ/h, that has to be supplied by an external cooling service to cool it down up to 393 K.

The before mentioned resulted in the addition of four new heat exchangers: A, B, C and D. The energy requirements of the new heat exchanger network are presented in Table III.

Table III. Synthetized heat exchanger network

Heat Exchanger	Streams ID	Tin (K)	Tout (K)	Q (kJ/h)	T' (K)	Q' (kJ/h)
A	HX2	1148	393	2.855E+08	843.39	1.703E+08
	HXNR4	873	353	1.152E+08	fulfilled	fulfilled
B	HX6	873	450	1.821E+08	485.16	1.514E+07
	HXNR1	393	503	1.670E+08	fulfilled	fulfilled
C	HX2'	843.39	393	1.703E+08	634.20	9.121E+07
	HX5	353	393	7.910E+07	fulfilled	fulfilled
D	HX2''	634.20	393	9.121E+07	594.40	7.616E+07
	HX3	316.7	393	1.505E+07	fulfilled	fulfilled

The streams HXNR2 and HXNR3 presented in Table II that are part of the cold streams of the cycle, could not be integrated because there was not enough energy from hot streams to heat them up. Any exchange with any hot stream would have incurred in penalties of the second law of thermodynamics. Hence, both streams must to be heated by an external source of heat; in this case, with the heat generated by the nuclear reactor with and energy requirement of 3.324E+08 kJ/h for HXNR2 and 1.066E+07 kJ/h for HXNR3.

Otherwise, the energy target for cooling that resulted from the synthesis method is about 2.660E+08 kJ/h. This energy is the cumulative energy requirement for cooling down the streams HX1, HX2'', HX4, HX6', HX7 and HX8, previously presented in Table III. Compared to the reference heat exchanger design, the synthesis method reduced the utilities for cooling and heating, respectively. The energy required for cooling was 6.423E+08 kJ/h for the reference case and the energy required by means the synthesis method is 2.660E+08 kJ/h, that is 58.59% lower than the reference case. Regarding the energy for heating, the reference requirement was 7.194E+08 kJ/h and the new value is 3.430E+08 kJ/h, which means 52.31% of reduction, see Table IV.

Table IV. Energy targets comparison

Utility	Reference design (kJ/h)	Synthesis method (kJ/h)	Difference (%)
Cooling	6.423E+08	2.660E+08	58.59
Heating	7.194E+08	3.430E+08	52.31

The grid diagram of the proposed heat exchanger network can be seen in Figure 4; the red circles represent the heaters, the blue ones represent the coolers and grey circles are the proposed heat exchanger obtained by the synthesis method, each heat exchanger has its own energy duty in kJ/h.

In Figure 5, the reference heat exchanger network is presented. It can be observed how each stream is supplied by an external service for heating and cooling, respectively. The red circles represent the heaters, the blue ones represent the coolers.

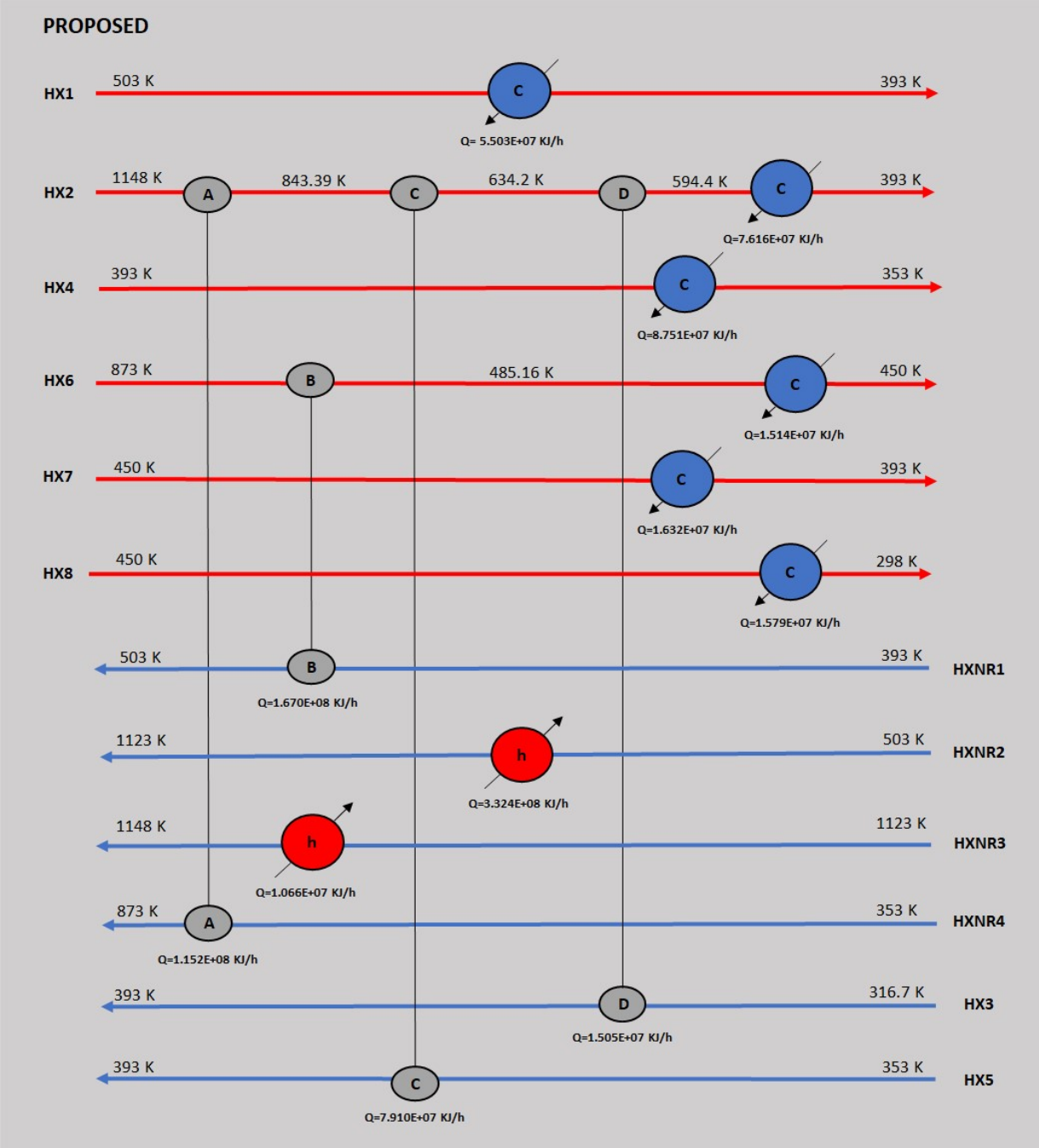


Figure 4. Proposed heat exchanger network

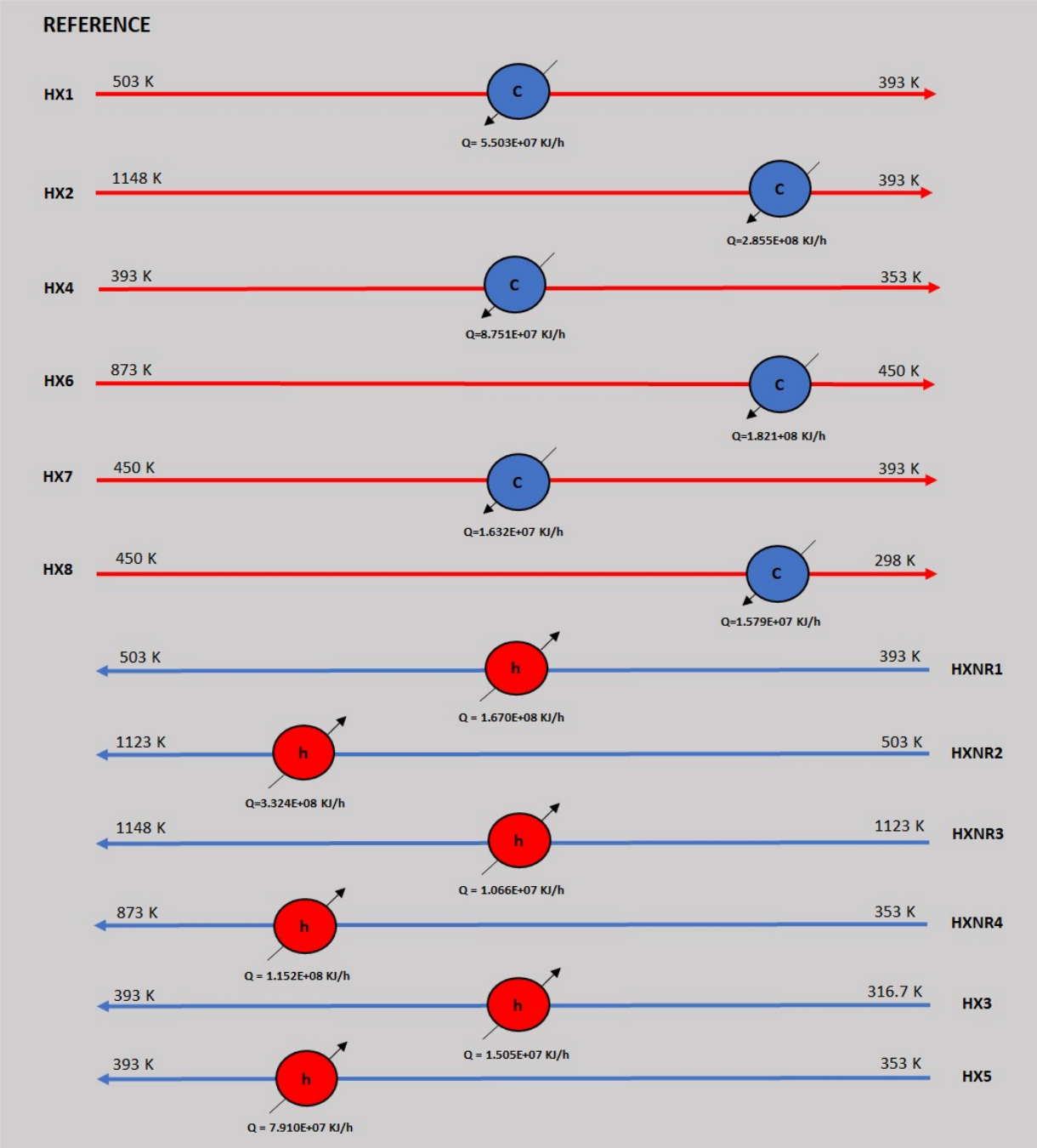


Figure 5. Reference heat exchanger network

Regarding the exergy and anergy change for the synthetized heat exchanger network proposed in this work, the absolute values were calculated for each heat exchanger, but some of them had no changes compared to the reference case since they were not integrated, such as; HXNR2, HXNR3, HX1, HX4, HX7 and HX8, as it can be seen in the upper part of Table V. Moreover, the bottom data, represent the new heat exchangers due to the heat integration. The majority of them are dedicated to cool down the stream HX2, from 1148 K up to 393 K as it was shown previously.

The total exergy and anergy obtained for the new heat exchanger network are 365.202 MJ/Kmol-H_2 and 187.66 MJ/Kmol-H_2, respectively. These values are lower than that reported in [11] for the reference heat exchanger network, being 584.18 MJ/Kmol-H_2 for exergy and 338.97 MJ/Kmol-H_2 for anergy. This means that less energy is being wasted with the new heat exchangers configuration.

Table V. Exergy and anergy changed for the synthetized heat exchanger network

Heat exchanger	Exergy change (MJ/Kmol-H_2)	Anergy change (MJ/Kmol-H_2)
	Not integrated heat exchangers	
HXNR2/He	81.95	10.57
HXNR3/He	2.19	0.30
HX1/H_2O	5.06	3.86
HX4/H_2O	87.16	39.81
HX7/H_2O	1.32	0.92
HX8/H_2O	0.84	0.49
	Integrated heat exchangers	
HX2/HXN4	24.52	9.105
HX2/HX3	11.09	6.835
HX2/HX5	86.87	73.51
HX6/HXNR1	56.54	41.14
HX2/H_2O	7.662	1.120
Total absolute	365.20	187.66
Reference	584.18	338.97

6. CONCLUSIONS

In this work an energy integration of a S-I thermochemical water splitting cycle was performed along with an exergy and anergy calculations.

The heat exchanger network was successfully synthetized by a heuristic method. A reduction of the hot and cold utilities was achieved, being 58.59% for cooling and 52.31% for heating, compared to the reference design. Most of the new heat exchangers are devoted to cool down the stream HX2 which has the highest temperature difference of all the process streams (1149 K to 393 K). A lower ΔT_{min} of 10 K was also analyzed leading the same result than that obtained for a ΔT_{min} of 20 K. Because the lower the ΔT_{min} the greater the area of the heat exchanger and therefore the cost, a conservative ΔT_{min} of 20 K is enough for this study.

On the other hand, the new heat exchanger network configuration led a reduction of the anergy compared to the reference case. The new anergy value was 187.66 MJ/Kmol-H_2 which is 44.63% lower than that obtained for the reference case 338.97 MJ/Kmol-H_2, this means that less energy it is been wasted.

With this study an enhanced energy utilization of the S-I thermochemical cycle was achieved. In addition, the reduction of the hot and cold utilities also reduced the plant operational cost which is good in terms of profitability and environment, especially because less cooling water in needed.

As a future work, the dimensioning of the proposed heat exchangers will be performed in order to evaluate the technical and economic feasibility of the new heat exchanger configuration. The Logarithmic Mean Temperature Difference (LMTD) method is a suitable tool to determine the area of such heat exchangers. In addition, the dynamic modelling of the HTTR reactor coupled with the chemical plant is being performed by means the object-oriented programming. The main aim is to develop a computational tool suitable to analyze the dynamics of the whole S-I thermochemical cycle and explore the possibility of any other co-generation application, e.g. electricity, water desalination, other industrial application.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the financial support received from the Mexican Secretariat of Public Education SEP, under the project 12513383, entitled; *Energy Optimization of the Hydrogen Production Process with New Generation of Nuclear Reactors*, by which it was possible to develop this research work.

REFERENCES

1. M. Al-Zareer, I. Dincer, M.A. Rosen, "Development and assessment of a novel integrated nuclear plant for electricity and hydrogen production", *Energy Conversion and Management,* **Vol. 134** p. 221–234, (2017).
2. R.S. El-Emam, I. Khamis, "Advances in nuclear hydrogen production: Results from an IAEA international collaborative research project", *International Journal of Hydrogen Energy,* **Vol. 44**, p. 19080-19088, (2019).
3. R. Elder, R. Allen, "Nuclear heat for hydrogen production: Coupling a very high/high temperature reactor to a hydrogen production plant", *Progress in Nuclear Energy*, **Vol. 5**, p. 500-525, (2009).
4. M.F. Orhan, H. Kahraman, B.S. Babu, "Approaches for integrated hydrogen production based on nuclear and renewable energy sources: Energy and exergy assessments of nuclear and solar energy sources in the United Arab Emirates", *International Journal of Hydrogen Energy*, **Vol. 42** p. 2601-2616, (2017).
5. X.L. Yang, R. Hino, *Nuclear Hydrogen Production Handbook*, Taylor and Francis Group, LLC, USA, (2011).
6. International Atomic Energy Agency, *Hydrogen Production Using Nuclear Energy*, IAEA Nuclear Energy Series No.NP-T-42, Vienna, Austria (2013).
7. G.F. Naterer, I. Dincer, C. Zamfirescu, *Hydrogen Production from Nuclear Energy*, Springer-Verlag, London, (2013).
8. D. González Rodríguez, C.A. Brayner de Oliveira Lira, L.R. García Parra, C.R. García Hernández, R. de la Torre Valdés, "Computational model of a sulfur-iodine thermochemical water splitting system coupled to a VHTR for nuclear hydrogen production", *Energy*, **Vol. 147**, p. 1165-1176, (2018).
9. H.C. No, J.H. Kim, H.M. Kim, "A Review of Helium Gas Turbine Technology for High-Temperature Gas-Cooled Reactors", *Nuclear Engineering and Technology*, **Vol. 39** No.1, p. 21-30, (2007).
10. S. Deokattey, K. Bhanumurthy, P.K. Vijayan, I.V. Dulera, "Hydrogen production using high temperature reactors: an overview", *Advances in Energy Research,* **Vol. 1** No. 1, p. 013-033, (2013).
11. H. Romero-Paredes, A. Vázquez Rodríguez, G. Espinosa Paredes, H.I. Villafan Vidales, J.J. Ambriz García, A. Nuñez-Carrera, "Exergy and separately anergy analysis of a thermochemical nuclear cycle for hydrogen production", *Applied Thermal Engineering*, **Vol. 75**, p. 1311-1320, (2015).
12. J.D. Bees, N. Fujimoto, J.W. Sterbentz, L. Snoj, A. Zukeran, "Evaluation of the Start-Up Core Physics Tests at Japan's High Temperature Engineering Test Reactor (Annular Core Loadings)", *INL/EXT-09-15794*, (2010).
13. A. Flores, J.M. Izquierdo, K. Tucek, E. Gallego, "Assessment of damage domains of the High-Temperature Engineering Test Reactor (HTTR)", *Annals of Nuclear Energy*, **Vol. 72**, p. 242–256, (2014).
14. S. Nakawa, D. Tochio, K. Takamatsu, M. Goto, T. Takeda, "Improvement of Analysis Technology for Hight Temperature Gas-Cooled Reactor by Using Data Obtained in Hight Temperature Engineering Test Reactor", *Journal of Power and Energy Systems*, **Vol.2** No.1, p. 83-91, (2008).
15. D.F. Rudd, G.J. Powers, J.J. Siirola, *Process Synthesis*, Prentice Hall, USA, (1973).

16. T. Kowalczyk, J. Badur, M. Bryk, "Energy and exergy analysis of hydrogen production combined with electric energy generation in a nuclear cogeneration cycle", *Energy Conversion and Management*, **Vol. 198**, p. 111805, (2019).

Enfriamiento de Material Fundido en el Fondo de la Vasija de un Reactor Nuclear Durante un Accidente Severo

Heriberto Sánchez Mora
Instituto Politécnico Nacional
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n, Edificio 9, Col. San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, C. P. 07738, Ciudad de México.
heribertosanchez7@hotmail.com

Marco Antonio Polo Labarrios y Sergio Quezada García
Universidad Nacional Autónoma de México
C.U., Coyoacán, C. P.04510, Ciudad de México.
plabarrios@hotmail.com; sequga@gmail.com

Javier Ortiz Villafuerte
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Municipio de Ocoyoacac, C. P. 52750, Méx.
javier.ortiz@inin.com

Resumen

Este trabajo presenta el desarrollo de un modelo matemático en una dimensión para simular los procesos de transferencia de masa y energía durante el enfriamiento del combustible nuclear fundido y reubicado en el fondo de la vasija durante un accidente severo. El efecto de enfriamiento se produce mediante el fenómeno de termosifón, en el que la remoción del calor de decaimiento nuclear se realiza mediante el agua que posiblemente penetra entre la pared del fondo de la vasija y el material fundido. El agua se calienta y cambia de fase produciendo vapor. Este vapor genera una presión lo suficientemente fuerte como para levantar el material fundido formando una cavidad. A través de esta cavidad, el vapor de agua fluye para mantener el material fundido parcialmente enfriado. El modelo matemático incluye un modelo del material fundido y el agua remanente. El crecimiento de la costra del material fundido y su perfil de temperatura, con generación de calor por decaimiento, se describen mediante el enfoque del problema de Stefan en una dimensión. Los resultados muestran que para potencias térmicas menores de 4.15 kW m^{-3} es posible solidificar y enfriar el material fundido en menos de 2.5×10^{6} s, es decir, en aproximadamente 29 días.

1. INTRODUCCIÓN

Los Accidentes Severos (AS), en las Centrales Nucleares (CN), son eventos poco probables, pero con graves consecuencias, como el accidente de abril de 2011 en las CN japonesas de Fukushima, donde todos los sistemas de protección fallaron. Esta situación se llama *Station Blackout*. Cuando

los sistemas de remoción de calor residual no funcionan, se evapora el refrigerante y la acumulación de vapor dentro de la vasija de presión del reactor (VPR). Durante la evaporación del agua se descubre la región activa del núcleo, causando la interacción refrigerante-combustible la cual genera hidrógeno. Esta pérdida de agua también tiene como consecuencia el enfriamiento inadecuado del núcleo y finamente su fundición. Posteriormente, el material del núcleo fundido forma un lecho de partículas constituido por los desechos del núcleo en el fondo de la VPR o en la cavidad del reactor [1]. Entonces, ante un AS, la principal acción es mantener el núcleo del reactor enfriado por cualquier medio disponible; esto se considera como una estrategia crucial para mitigar un AS y mantener la integridad de la VPR. Por lo tanto, es necesario comprender plenamente la progresión del daño al núcleo así como los mecanismos posibles para refrigerar el material fundido acumulado en el fondo de VPR.

En un AS ocurrido en reactores de agua ligera, se crea una mezcla fundida parecida a la lava llamada *corium* (compuestos de UO_2, ZrO_2 y Zr) debido a la desintegración radiactiva y al calor de la fisión. El análisis de tales accidentes requiere datos precisos de las propiedades termofísicas del *corium* hasta 5000 K [2]. Además, la fusión inicial del *corium* sobrecalentado, determinada a partir de tales propiedades, es clave para predecir las interacciones entre el combustible y el refrigerante [3] y la convección y retención del *corium* en escenarios de AS. Debido a las altas temperaturas, los datos sobre el *corium* fundido y sus constituyentes son limitados, debido a que hay una gran cantidad de dispersión de datos y en su mayoría se han utilizado extrapolaciones (incluso de estado sólido) [4]. Kim et al. [5] predicen las propiedades termofísicas del UO_2 y ZrO_2 fundido utilizando simulaciones clásicas de dinámica molecular, por lo que las propiedades del *corium* se predicen utilizando las teorías de mezcla de las propiedades del UO_2 y el ZrO_2. Estas propiedades predichas son la densidad, la capacidad de calor, el calor de fusión, la compresibilidad, la viscosidad, la conductividad térmica y la tensión superficial, hasta 5000 K y sus correlaciones útiles dependientes de la temperatura.

Durante la fase tardía de un AS con fusión del núcleo, en un reactor moderado por agua ligera, los desechos del núcleo en el fondo de la VPR pueden ser reubicados y acumulados. La transferencia de calor del material fundido determina las cargas térmicas sobre el material de la estructura del fondo del reactor, incluidas la pared del reactor, los tubos guía de las barras de control y los tubos de instrumentación. Cuando la refrigeración es deficiente, el calor excesivo lleva a un sobrecalentamiento de la estructura y a su fundición, esto causa la falla de la vasija. Posteriormente, se presentan amenazas a la integridad de la contención asociadas a posibles explosiones de vapor fuera de la vasija y a la deficiente refrigeración los desechos radioactivos. Esto depende de la composición, el sobrecalentamiento y la cantidad de material fundido disponible para ser descargado por la falla de la vasija.

Muchos procesos como el derretimiento, la congelación, el transporte masivo de sedimentos, el crecimiento de tumores, etc., en el campo de la ciencia y la industria implican el desplazamiento de límites/fronteras. Estos problemas se denominan problemas de límites móviles o problemas de Stefan [6]. Inicialmente, el problema de Stefan se aplico a problemas de transferencia de calor formulados con propiedades térmicas constantes [7]. Sin embargo, los problemas de Stefan no se limitan sólo a estos problemas, algunos problemas de Stefan con diferentes propiedades térmicas y otros sistemas de transporte controlados por difusión se discuten en Zhou y Li-jiang [8].

En el estudio de los AS se ha utilizado la modelización mecánica para investigar, por ejemplo, la transferencia de calor por convección en el material fundido [9], los efectos de la transferencia de calor por convección dentro de una capa metálica [10], entre otros, tales como las inestabilidades del material fundido, así como su fragmentación y dispersión en el contacto con el agua [11,12].

En este trabajo se desarrolla un modelo matemático para analizar el proceso de remoción de calor y enfriamiento del material fundido acumulado en el fondo de la VPR, donde el calor es removido por el agua que posiblemente penetra entre la pared interior del fondo de la estructura de la vasija y el material fundido, como se muestra en la Figura 1. Esta masa de agua, cuando se calienta por el calor de decaimiento, cambia de fase produciendo vapor. Este vapor genera una presión lo suficientemente fuerte como para levantar el material fundido formando una cavidad a través de la cual el vapor de agua fluye manteniendo el material fundido parcialmente enfriado. El modelo matemático se desarrolla en una dimensión para simular los procesos de transferencia de masa y energía durante el enfriamiento del material fundido acumulado en el fondo de la vasija. Se considera una geometría fija y definida, sin tener en cuenta los cambios de geometría que se producen debido al proceso de enfriamiento. El modelo, mediante el enfoque del problema de Stefan en una dimensión, permite describir el crecimiento de la costra del material fundido en el fondo de la VPR y el perfil de temperatura con la generación de calor por decaimiento. Los resultados muestran que para potencias menores de 4.15 kW m^{-3} es posible solidificar y enfriar el material fundido en menos de 2.5×10^{6} s, es decir, en aproximadamente 29 días.

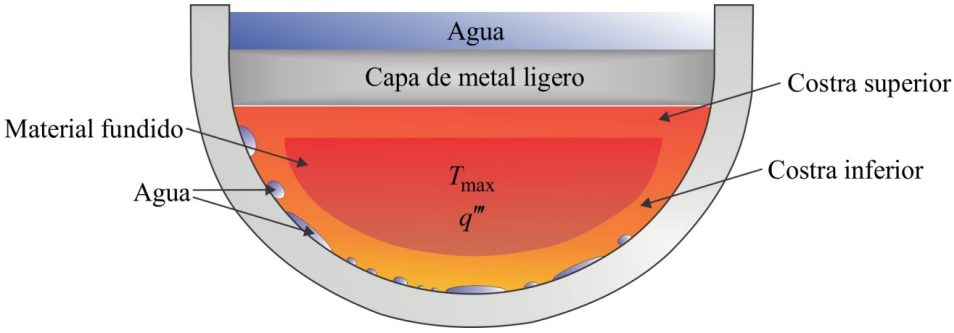


Figura 1. Agua atrapada entre la pared interior del fondo de la estructura de la vasija y el material fundido.

2. MODELO MATEMÁTICO

El modelo matemático permite describir el crecimiento de la costra del material fundido en el fondo de la vasija y su perfil de temperatura considerando el calor de decaimiento generado, aplicando el enfoque del problema de Stefan en una dimensión y en un estado transitorio [6]. El material fundido se considera como una mezcla homogénea que se encuentra a la temperatura de cambio de fase y tiene la misma composición de los materiales solidificados en la costra; en consecuencia, tienen las mismas propiedades termofísicas.

Para la eliminación del calor en el material fundido, el modelo considera el caso en que una pequeña fracción de agua queda atrapada entre el material fundido y el fondo de la estructura de la vasija del reactor, como se muestra en la Figura 1. Esta masa de agua, cuando se calienta por el calor de decaimiento cambia de fase produciendo vapor. Este vapor genera una presión lo

suficientemente fuerte como para levantar el material fundido formando una cavidad, a través de la cual el vapor de agua fluye manteniendo el material fundido parcialmente enfriado.

El modelo desarrollado incluye: un modelo de parámetros agrupados para el conjunto de material fundido y para el agua remanente; y un modelo de parámetros distribuidos para la costra. El fondo de material fundido tiene una geometría preestablecida, mientras que en la costra se considera la dinámica de crecimiento. Durante la solidificación del material fundido, es decir, la formación de la costra, el espesor de la capa solidificada es una función que depende del tiempo. En el cálculo del espesor de la capa solidificada se supone que la velocidad de transferencia de calor desde el material fundido hacia la capa solidificada (inferior) es proporcional a su superficie.

El material fundido se enfría a través de su superficie inferior por la entrada de agua en la cavidad, donde se considera que la transferencia de calor de la superficie caliente está limitada por el régimen de ebullición, y la cantidad de agua cerca de la costra o la superficie calentada. La transferencia de calor en la sección transversal superior de la cavidad está limitada por el flujo de agua que penetra, por el flujo de fluido en contracorriente y el calor que no puede ser eliminado se transfiere a la pared de la VPR.

Durante el aumento de la temperatura del agua, el calor de descomposición se almacena en el agua, lo que permite alcanzar la temperatura de ebullición a la presión de la VPR. Cuando el agua alcanza la temperatura de ebullición, el calor de la descomposición es transportado completamente por el vapor de agua.

2.1. Modelo simplificado

Para describir el crecimiento de la costra del material fundido en el fondo de la vasija y el perfil de temperatura con generación de calor por decaimiento, mediante el enfoque del problema de Stefan en una dimensión, primero se da la ecuación que describe la transferencia de calor en la costra del material solidificado,

$$\rho_{ci} Cp_{ci} \frac{\partial T_{ci}}{dt} = \frac{k_{ci}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial T_{ci}}{\partial r} \right) + q''', \qquad R_c - \delta(t) < r < R_c \tag{1}$$

donde ρ representa la densidad, Cp es el calor específico, t es el tiempo, r es el componente radial, δ es el espesor de la costra, R_c es el radio del corio, T es la temperatura, k es la conductividad térmica, q''' es la generación de calor por decaimiento y el subíndice ci representa las propiedades asociadas a la costra inferior. La Ec. (1) presenta las siguientes condiciones límites,

$$-k_{ci} \left. \frac{\partial T_{ci}}{\partial r} \right|_{r=R_c} = h_{ag}\left(T_{ci}(r,t) - T_{ag} \right), \qquad r = R_c \tag{2}$$

$$T_{ci}(r,t) = T_{mf}, \qquad r = R_c - \delta(t) \tag{3}$$

$$q_l''\big|_{r=R_c-\delta(t)} - q_{ci}''\big|_{r=R_c-\delta(t)} = \rho_{ci}\lambda_{sl}\frac{d\delta(t)}{dt} \tag{4}$$

La Ec. (2) tiene en cuenta la transferencia de calor por convección de la costra y el agua, h_{ag} es el coeficiente de convección de la mezcla de vapor y agua, T_{ag} es la temperatura del agua. La Ec. (3) considera la temperatura en la interface entre el material fundido y la costra, T_{mf} es la temperatura de cambio de fase, donde el subíndice *mf* está asociado a las propiedades del material fundido. La Ec. (4) representa la dinámica de crecimiento de la costra a través del problema de Stefan [6], donde q'' es el flujo de calor, λ_{sl} es la energía de cambio de fase de sólido a líquido y el subíndice *l* representa la parte líquida de la interface.

En este trabajo se considera un esquema de equilibrio de energía en el que coexisten dos fases, es decir, en la interface sólido-líquido, en la que ambas se encuentran al mismo valor de temperatura. Bajo esta consideración, la costra aumenta su espesor a medida que el calor es removido del material fundido. Aquí se consideran dos efectos en la interface sólido-líquido: el primer efecto favorece el crecimiento de la costra debido a la remoción del calor por fenómenos de conducción en la interface. El segundo efecto reduce el espesor de la costra debido al calor generado por la desintegración radiactiva. Estos efectos se consideran a través del problema de Stefan y se representan en las Ecs. (5) y (6), respectivamente:

$$q_{ci}\big|_{r=R_c-\delta(t)} A_t = -k_{ci}\left.\frac{dT_{ci}}{dr}\right|_{r=R_c-\delta(t)} A_t \tag{5}$$

$$q_l\big|_{r=R_c-\delta(t)} A_t = -q'''\Delta V \tag{6}$$

donde, el segundo miembro de la Ec. (5) se calcula como:

$$q'''\Delta V = q'''\left\{\frac{2\pi}{3}\left[R_c^3 - \left(R_c - \Delta\delta\right)^3\right]\right\} \tag{7}$$

donde A_t es la superficie de transferencia de calor, ΔV representa el cambio de volumen de la costra, ambos considerados para una media esfera. $\Delta\delta$ representa el cambio de espesor en el límite de la interface sólido-líquido, donde se aplica el balance energético. Es importante mencionar que la Ec. (6) no considera el fenómeno de transferencia de calor por convección entre el material fundido y la costra, porque se considera que sus temperaturas son iguales en este punto (T_{mf}). El material fundido tiene esta misma temperatura.

Ahora bien, desarrollando el binomio de tercer grado en el segundo miembro de la Ec. (7), y sustituyendo el término $\Delta\delta$ por un término diferencial $d\delta$, permite considerar un muy pequeño incremento en volumen, y despreciar los dos términos $d\delta^2$ y $d\delta^3$, la Ec. (7) se puede reescribir como,

$$q'''dV \approx q'''A_t\, d\delta \tag{8}$$

La Ec. (8) representa el calor generado por la desintegración radiactiva dentro del material fundido que cambió a fase sólida y se integra al espesor de la costra a través del límite de la interface sólido-líquido, $d\delta$. Ahora, sustituyendo la Ec. (8) por la Ec. (6), se obtiene:

$$q_l\big|_{r=R_c-\delta(t)} A_t = -q''' A_t d\delta \tag{9}$$

Dividiendo las Ecs. (5) y (9) entre A_t y sustituyéndolas en la Ec. (4), se obtiene:

$$k_{ci} \frac{dT_{ci}}{dr}\bigg|_{r=R_c-\delta(t)} - q''' d\delta = \rho_{ci}\lambda_{sl} \frac{d\delta}{dt} \tag{10}$$

Finalmente, la condición inicial para la Ec. (1) viene dada por,

$$T_{ci}(r,0) = T_{mf}, \qquad R_c - \delta(t) < r < R_c \tag{11}$$

La **Figura 2** muestra una representación esquemática de las condiciones límite.

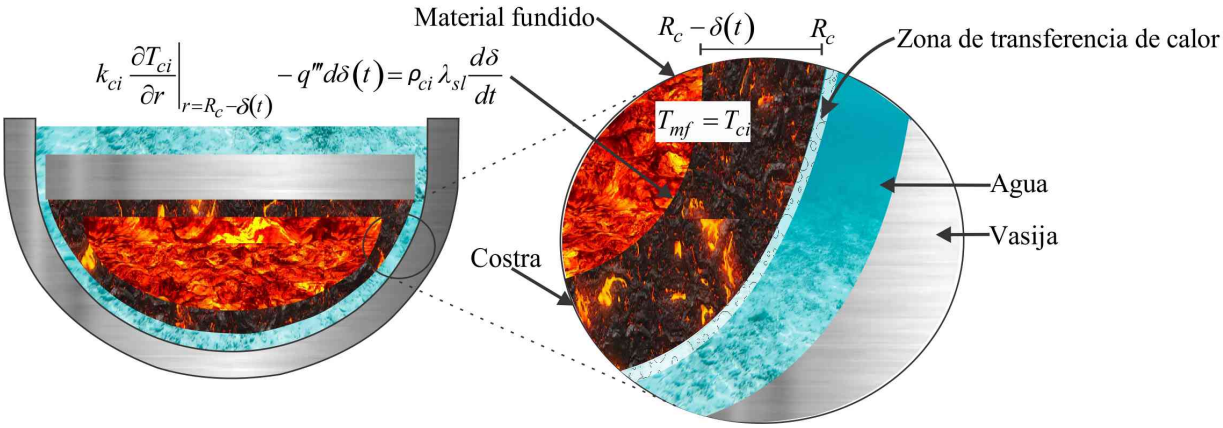


Figura 2. Representación esquemática de la formación de la costra inferior y de las condiciones de frontera.

2.2. Interacción vasija—costra

Si se asume que el calor proveniente de la superficie exterior de la costra inferior, mencionado en la Ec. (2), se transfiere al agua en la cavidad en función del régimen de ebullición, la radiación y la conducción de vapor (ver **Figura 3**). Este flujo de calor está dado por:

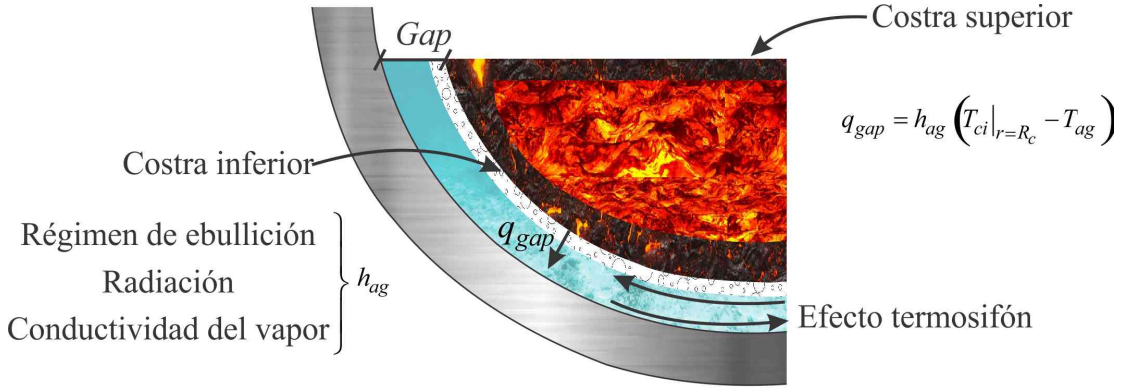


Figura 3. Interacción de calor entre la superficie exterior de la costra y el flujo en el *gap*.

$$-k_{ci}\left.\frac{\partial T_{ci}}{\partial r}\right|_{r=R_c} = q_{gap} = h_{ag}\left(T_{ci}\big|_{r=R_c} - T_{ag}\right) \tag{12}$$

El coeficiente h_{ag} se calcula como:

$$\frac{1}{h_{ag}} = \frac{\delta}{2k_{ci}} + \frac{1}{h_{gap}} \tag{13}$$

donde h_{gap} representa el coeficiente de transferencia de calor de la superficie exterior de la costra inferior con el fluido. El primer término del lado derecho de la Ec. (13) es la resistencia térmica de la costra inferior y el segundo término considera los mecanismos de radiación, la conducción de vapor y el régimen de ebullición. Para calcular el coeficiente h_{gap}, se supone que la transferencia de calor depende de la temperatura en exceso de la pared calentada; este coeficiente se calcula de la siguiente manera:

$$h_{gap} = \max\left\{\varepsilon\sigma\frac{\left(T_{ci}\big|_{r=Rc}^{4} - T_v^4\right)}{T_{ci}\big|_{r=Rc} - T_v}, h_{RE}\right\} + \frac{k_s}{\delta_{gap}} \tag{14}$$

donde T_v es la temperatura de la vasija, ε es la emisividad de la superficie de la costra, σ es la constante de Stefan-Boltzmann, δ_{gap} es el espesor de la cavidad entre la costra y la vasija, h_{RE} representa el coeficiente de transferencia según el régimen de ebullición y el subíndice s está asociado al vapor. La Ec. (14) incluye la conducción de calor por el vapor en el gap, puede ser insignificante con un gran tamaño del gap, así como la transferencia de calor por radiación.

La correlación propuesta por Kutateladze [13] se utiliza para la transferencia de calor en los diferentes regímenes de ebullición:

$$\mathrm{Nu} = \left(\frac{q''_{ci}\big|_{r=R_c}}{\Delta T_{sat}}\right)\left(\frac{\delta_{gap}}{k_{ag}}\right) = C\left(\frac{k_{ag}\Delta T_{sat}}{\rho_s h_{fg}\nu_{ag}}\right)^{n1}\left(\frac{PL_c}{\sigma_{ag}}\right)^{n2} = \frac{h_{RE}L_c}{k_{ag}} \tag{15}$$

donde ΔT_{sat} es la temperatura en exceso ($\Delta T_{sat}=T_{ci}|_{r=Rc}-T_{sat}$), ν es la viscosidad cinemática, P es la presión del sistema, Lp es la longitud característica de la alberca, h_{fg} es la entalpía de cambio de fase del agua, σ_{ag} es la tensión superficial del agua. Para una baja temperatura en exceso, la constante numérica C y el número del exponente $n1$ se obtienen de los datos de Fujita et al. [14], a una presión de 0,1 MPa, el número del exponente $n2$ se obtiene de los datos de Kohler et al. [15], a una presión de 10 MPa. Los valores son C=1,1, $n1$=0,3 y $n2$=0,32.

Para condiciones de alta temperatura en exceso, la constante y el número del exponente se obtienen de los datos de Henry y Hammersley [16]:

- Ebullición nucleada C=2.2, $n1$=-0.1 y $n2$=0.32
- Ebullición en transición $C=1.2\times10^{14}$, $n1$=-0.1 y $n2$=0.32

Para $n2$, se utiliza el mismo valor de 0.32 para los datos de Kohler et al. [15], porque no hay datos de alta temperatura en exceso y alta presión. Cuando el fenómeno tiene película en ebullición, el coeficiente de transferencia de calor se evalúa con la correlación de Berenson [17]:

$$h_{gap} = 0.425\left[\frac{k_s^3 \rho_s g\left(\rho_{ag}-\rho_s\right)\Delta h_s}{\mu_s\left(T_{ci}\big|_{r=R_c}-T_{sat}\right)\sqrt{\sigma_{ag}/g}\left(\rho_{ag}-\rho_s\right)}\right]^{1/4} \tag{16}$$

donde:

$$\Delta h_s = h_{fg} + 0.5Cp_s\left(T_{ci}\big|_{r=R_c}-T_{sat}\right) \tag{17}$$

donde g es la aceleración de la gravedad, T_{sat} es la temperatura de saturación del agua y Δh_s es el cambio de entalpía del vapor.

2.3. Alcance y limitaciones del modelo matemático

Para analizar sistemas compuestos de materiales que se encuentran en un proceso de cambio de fase, existen dos tipos de métodos: el método de malla móvil y los métodos basados en la entalpía. Éstos se aplican dependiendo del tipo de sistema o malla de discretización aplicado [18]. La principal diferencia entre ambos tipos de métodos es: el método de malla móvil permite que la malla se deforme a medida que el material se funde o solidifica, mientras que el método de la entalpía considera una malla de discretización fija que impide determinar la posición exacta en la que coexisten las fases.

En este trabajo se aplica el método de la malla móvil, que muestra la deformación y el crecimiento del material fundido en cada paso de tiempo. Esto permite conocer la dinámica de

crecimiento de la costra que se forma durante la solidificación del material fundido reubicado en el fondo de la vasija, así como su cambio en el perfil de temperatura.

Los códigos de simulación especializados MELCOR y RELAP/SCDAP no tienen la capacidad de simular la dinámica de crecimiento de la costra. La razón principal de esta limitación es la visión del problema; es decir, no consideran la formación de la cavidad entre el material fundido y el fondo de la vasija, donde la presión ejercida por el vapor formado por el agua atrapada es capaz de levantar el material fundido, y así permitir la entrada de agua que enfría el material hasta que se solidifica.

Por otra parte, para discretizar la malla del recipiente, los códigos RELAP/SCDAP y MELCOR utilizan una malla rígida que no permite que se adapte a la deformación del material cuando se produce el cambio de fase. Además, aplican un método basado en la entalpía para predecir el crecimiento de la costra.

Las principales limitaciones del modelo matemático desarrollado en este trabajo son: no considera el mecanismo de transporte de energía por convección libre entre la costra y el material fundido; no se consideran los efectos de las fallas estructurales que podrían dañar la integridad de la costra, modificar su dinámica de crecimiento, así como su geometría.

3. SIMULACIONES NUMÉRICAS

Para analizar el posible enfriamiento del material fundido en el fondo de la vasija de presión del reactor utilizando el agua remanente, la solución numérica del modelo matemático desarrollado se implementa en el lenguaje de programación C para hacer simulaciones numéricas.

3.1. Método numérico

El modelo matemático que se presenta a continuación, tiene una solución aproximada por el método de diferencias finitas para las Ecs. (1), (10) y (12). La Ec. (1) se resuelve por el método de diferencias finitas, es aproximada a cada término de la ecuación, como se muestra a continuación:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \approx \left(\frac{T_{i+1}^{t+\Delta t} - 2T_i^{t+\Delta t} + T_{i-1}^{t+\Delta t}}{\Delta r^2} \right) \tag{18}$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} \approx \left(\frac{T_{i+1}^{t+\Delta t} - T_i^{t+\Delta t}}{\Delta r} \right) \tag{19}$$

$$\frac{dT}{dt} \approx \left(\frac{T_i^{t+\Delta t} - T_i^{t}}{\Delta t} \right) \tag{20}$$

donde el subíndice i es la posición del nodo en el espacio, el superíndice $t+\Delta t$ indica la temperatura en el tiempo futuro y el superíndice t es el valor de la temperatura en el tiempo actual, Δr representa la distancia entre nodos en dirección radial y Δt es el paso del tiempo. Para obtener la solución numérica de la Ec. (1) por las aproximaciones de la Ec. (18), es necesario resolver una matriz tridimensional en cada paso de tiempo, donde n es el rango de la matriz y representa el número de nodos en el espacio, cuya solución se obtiene al aplicar el algoritmo de Thomas.

La Ec. (10) y la Ec. (12), se resuelve por el método de Euler:

$$\frac{d\psi}{dt} = f(t) \quad \rightarrow \quad \psi_{i+1} = \psi_i + \Delta t\left(f_{i+1} + f_i\right) \tag{21}$$

donde ψ representa, según el caso: el espesor de la costra inferior dada por la Ec. (10), o la transferencia de flujo de calor al agua en la cavidad entre el material fundido y la vasija dada por la Ec. (12).

3.2. Parámetros y propiedades físicas

Los parámetros geométricos y las propiedades de los materiales del experimento COPO [19,20] se seleccionan para el análisis numérico. Las propiedades termofísicas de los materiales se presentan en la **Tabla 1** y las características geométricas del material fundido en la **Tabla 2** [21].

Tabla 1. Propiedades termofísicas de los materiales que constituyen la geometría analizada [22].

Parámetro	Magnitud
ρ_{ci} [kg m^{-3}]	8000
Cp_{ci} [J kg^{-1} K^{-1}]	600
k_{ci} [W m^{-1} K^{-1}]	3
λ_{sl} [kJ kg^{-1}]	400
T_{mf} [K]	2840
T_{ag} [K]	428

Tabla 2. Características geométricas del material fundido [21].

Parámetro	Magnitud
R_c [m]	2.3
δ_{gap} [m]	0.001
P [MPa]	0.3501
nodos [dimensionless]	24

4. RESULTADOS

Los resultados del fenómeno se presentan a través de la interfaz gráfica generada con las bibliotecas OpenGL. En la **Figura 4** se muestra la geometría de la vasija y los componentes

considerados en el modelo matemático desarrollado en este trabajo, en el que se utiliza una potencia térmica de 3.735 kW m^{-3}.

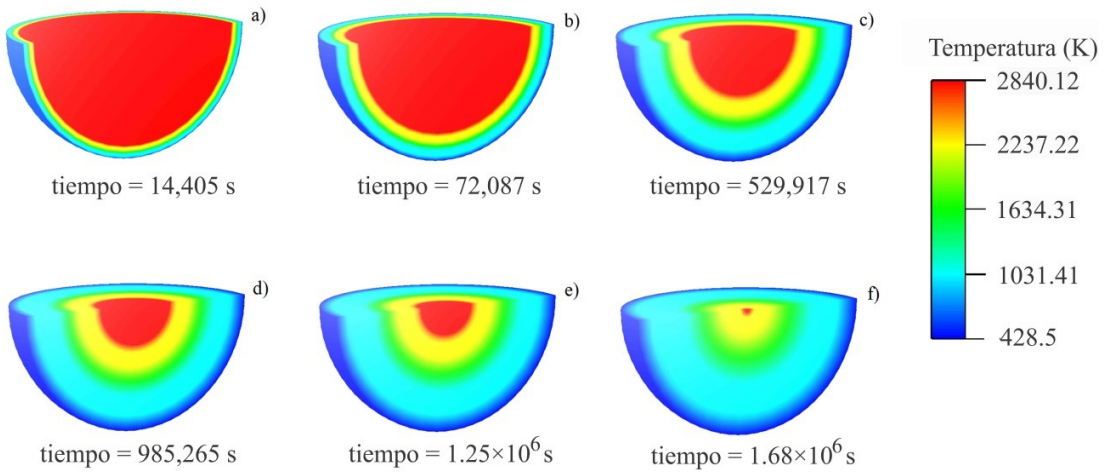


Figura 4. Interfaz gráfica generada con las bibliotecas OpenGL. Perfil de temperatura para una potencia de 3.735 kW m^{-3}.

El crecimiento de la costra inferior puede ocurrir cuando hay un cambio de temperatura descendente en el área externa de la alberca de material fundido, esto se debe al intercambio de calor con el agua que permanece en recirculación en el plenum inferior causando que el material se solidifique. Para conocer la capacidad de enfriamiento se eligen seis valores de potencia, generada por el decaimiento radiactivo del material fundido: 2.49 kW m^{-3}, 3.735 kW m^{-3}, 4.150 kW m^{-3}, 6.225 kW m^{-3}, 8,5 kW m^{-3} y 12,45 kW m^{-3}. En todos los casos se considera que en el momento $t = 0$ todo el material está fundido.

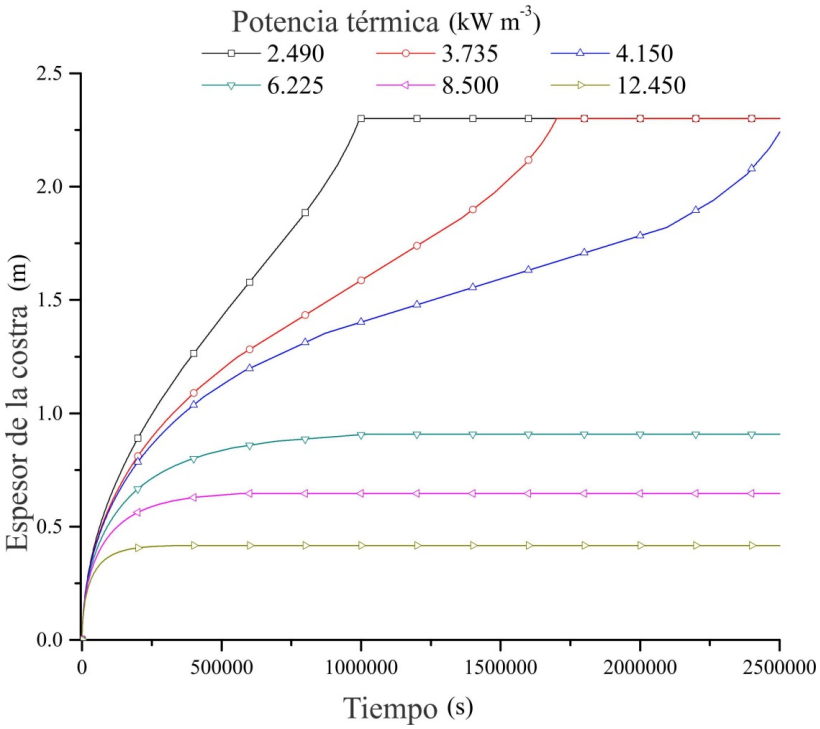


Figura 5. Tasa de crecimiento de la costra inferior.

La **Figura 5** muestra la dinámica de crecimiento de la costra inferior. En todos los casos se observa que la tasa de crecimiento de la costra inferior es rápida al comienzo de la simulación, donde el espesor de la costra alcanza un valor de 0.17 m en aproximadamente 40,000 segundos. Posteriormente, se observa que para potencias inferiores a 4.15 kW m^{-3}, el material fundido se solidifica en menos de 2.5×10^6 s, es decir, aproximadamente 29 días. Para potencias superiores a 6.225 kW m^{-3} el material fundido no se solidifica completamente, se observa que para tiempos menores de 1×10^6 s el espesor de la costra crece, sin embargo para tiempos mayores se observa que la tasa de crecimiento de la costra es cero porque su espesor permanece constante.

La **Figura 6** muestra el perfil de temperatura del espesor de la costra al final de la simulación. Es importante mencionar que el valor de cero en el eje del espesor de la costra indica el centro del hemisferio. Se puede ver que para potencias inferiores a 4.15 kW m^{-3}, después de que el material se solidifica, comienza a enfriarse, donde el valor máximo de temperatura se produce en el centro del hemisferio y disminuye con un comportamiento parabólico, a medida que se acerca a la pared de la vasija. Para potencias superiores a 6.225 kW m^{-3} la temperatura permanece constante en el material fundido mientras que en la costra se observa una disminución lineal de la temperatura.

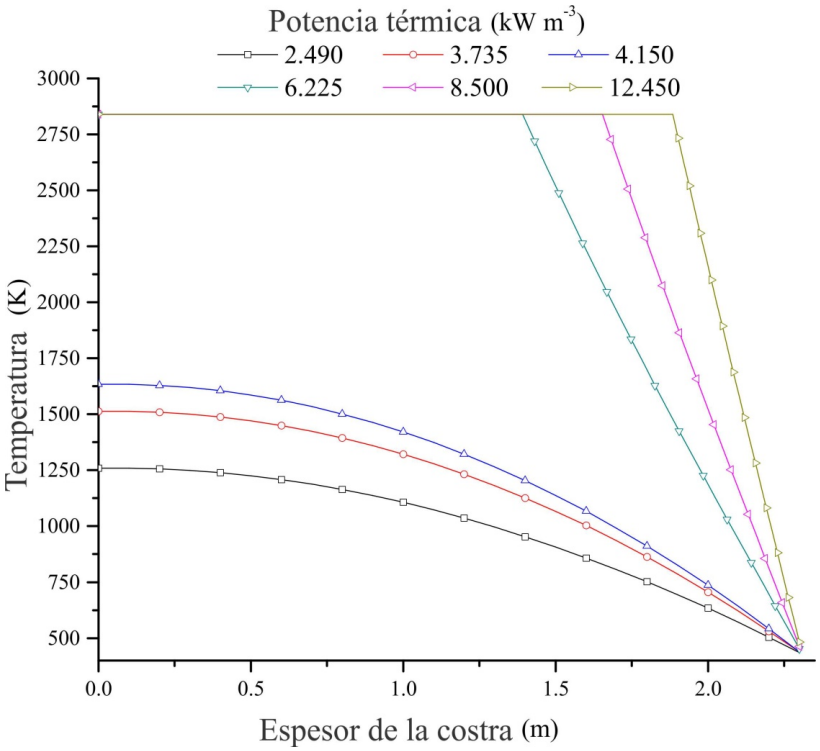


Figura 6. Perfil de temperatura de la costra inferior al final de los transitorios simulados.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo, analizamos el enfriamiento del material fundido, reubicado y acumulado en el fondo de la vasija del reactor durante un accidente severo, por el agua remanente. Se analizó el proceso de remoción de calor del material fundido por el agua que posiblemente penetra entre la pared del fondo de la vasija y el material fundido.

Esto se hizo con un modelo matemático desarrollado en una dimensión y en régimen transitorio para describir tanto el crecimiento del espesor de la costra en el material fundido como su perfil de temperatura. Considerando el crecimiento dinámico de la costra a través del enfoque del problema de Stefan. Para resolver el modelo, se aplicó el método de malla móvil, ya que permite conocer la dinámica de crecimiento del espesor de la costra en cada paso de tiempo de integración, así como el cambio en su perfil de temperatura. Los resultados muestran que para potencias inferiores a 4.15 kW m^{-3} es posible solidificar y enfriar el material fundido en menos de 2.5×10^{6} s, es decir, en aproximadamente 29 días.

REFERENCIAS

[1] G. Espinosa-Paredes, R. Camargo-Camargo, A. Nuñez-Carrera, Severe accident simulation of the laguna verde nuclear power plant, Sci. Technol. Nucl. Install. 2012 (2012). doi:10.1155/2012/209420.

[2] P. Piluso, J. Monerris, C. Journeau, G. Cognet, Viscosity measurements of ceramic oxides

by aerodynamic levitation, Int. J. Thermophys. 23 (2002) 1229–1240.

[3] G. Hwang, M. Kaviany, K. Moriyama, H.S. Park, B. Hwang, M. Lee, E. Kim, J.H. Park, Y. Nasersharifi, FARO tests corium-melt cooling in water pool: Roles of melt superheat and sintering in sediment, Nucl. Eng. Des. 305 (2016) 569–581. doi:10.1016/j.nucengdes.2016.05.039.

[4] D.A. MacInnes, D. Martin, A calculation of the electron band gap in molten UO2, J. Nucl. Mater. 98 (1981) 241–246. doi:10.1016/0022-3115(81)90150-1.

[5] W.K. Kim, J.H. Shim, M. Kaviany, Thermophysical properties of liquid UO2, ZrO2 and corium by molecular dynamics and predictive models, J. Nucl. Mater. 491 (2017) 126–137. doi:10.1016/j.jnucmat.2017.04.030.

[6] A. Kumar, A.K. Singh, Rajeev, A Stefan problem with temperature and time dependent thermal conductivity, J. King Saud Univ. - Sci. (2018). doi:10.1016/j.jksus.2018.03.005.

[7] J. Crank, Free and Moving Boundary Problems, Clarendon Press, Oxford, 1984.

[8] Y. Zhou, L.J. Xia, Exact solution for Stefan problem with general power-type latent heat using Kummer function, Int. J. Heat Mass Transf. 84 (2015) 114–118. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.01.001.

[9] T.N. Dinh, R.R. Nourgaliev, Turbulence Modeling for Large Volumetrically Heated Liquid Pools, Nucl. Eng. Des. 169 (1997) 131–150.

[10] T.N. Dinh, V.A. Bui, R.R. Nourgaliev, B.R. Sehgal, Modeling of Heat Transfer Processes in Reactor Vessel Lower Plenum During Late Phase of In-Vessel Core Melt Progression, in: Proc. Int. Top. Meet. Nucl. React. Therm., NURETH-8, Kyoto, Japan, 1997: pp. 157–164.

[11] V.A. Bui, T.N. Dinh, B.R. Sehgal, Numerical Simulation of Surface Instability Phenomena Associated with Fuel-Coolant Interaction, in: Proc. Eighth Int. Top. Meet. 'Nuclear React. Therm. Hydraul. (NuReTH-8)', Kyoto, Japan, 1997.

[12] N.E. Todreas, M.S. Kazimi, Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals, Hemisphere Publishing Corporation, USA, 1990.

[13] S.S. Kutateladze, Heat transfer in condensation and boiling, 2d ed., re, State Scientific and Technical Publishers of Literature on Machinery, Moscow, 1952.

[14] Y. Fujita, H. Ohta, S. Uchida, K. Nishikawa, Nucleate boiling heat transfer and critical heat flux in narrow space between rectangular surfaces, Int. J. Heat Mass Transf. 31 (1988) 229–239. doi:10.1016/0017-9310(88)90004-X.

[15] W. Kohler, H. Schmidt, O. Herbst, W. Kratzer, Experiments on Heat Removal in a Gap between Debris Crust and RPV Wall, n.d.

[16] R.E. Henry, R.J. Hammersley, Quenching of mellow surfaces in a narrow annular Gap, in: Int. Conf. Simul. Methods Nucl. Eng., Montreal, Canada, 1996.

[17] P.J. Berenson, Film-boiling heat transfer from a horizontal surface, J. Heat Transfer. 83 (1961) 351–356. doi:10.1115/1.3682280.

[18] A. Caggiano, C. Mankel, E. Koenders, Reviewing Theoretical and Numerical Models for PCM-embedded Cementitious Composites, Buildings. 9 (2018) 3. doi:10.3390/buildings9010003.

[19] O. Kymalainen, O. Hongisto, J. Antman, H. Tuomisto, T.G. Theofanous, COPO: Experiments for Heat Flux Distribution from a Volumetrically Heated Corium Pool, in: Proc. 20-Th Water React. Saf. Inf. Meet. Bethesda, Bethesda, Maryland, 1992.

[20] O. Kymäläinen, H. Tuomisto, O. Hongisto, T.G. Theofanous, Heat flux distribution from a volumetrically heated pool with high Rayleigh number, Nucl. Eng. Des. 149 (1994) 401–

408. doi:10.1016/0029-5493(94)90305-0.

[21] R.E. Henry, H.K. Fauske, External cooling of a reactor vessel under severe accident conditions, Nucl. Eng. Des. 139 (1993) 31–43. doi:10.1016/0029-5493(93)90260-G.

[22] L.A. Dombrovsky, Approximate model for break-up of solidifying melt particles due to thermal stresses in surface crust layer, Int. J. Heat Mass Transf. 52 (2009) 582–587. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.07.025.

Análisis del Reactor AP 600 Ante Diferentes Accidentes de Pérdida de Refrigerante.

M.C. María Felicia Jiménez Lavié
M.C. Edgar Salazar Salazar
Departamento de Sistemas Energéticos
Facultad de Ingeniería, UNAM
felicia0387@gmail.com; salelas@gmail.com

Resumen

La energía, sin lugar a dudas, es de vital importancia para el desarrollo de la humanidad, siendo esencial para el desarrollo económico y social de cualquier país. De acuerdo con las proyecciones de consumo y uso final de la energía a nivel mundial, ésta irá en aumento en los años venideros. Entre las diferentes fuentes de energía primaria que actualmente se encuentran disponibles, la energía nuclear es una de las opciones que permite producir energía ambientalmente amigable debido a su baja emisión de Gases de Efecto Invernadero. Entre los reactores nucleares de tercera generación se encuentran el AP 600, el cual presenta sistemas de seguridad pasivos, lo que le permite una mejor respuesta ante accidentes con pérdida de refrigerante. En este trabajo se analizará cómo responde este reactor ante los siguientes accidentes: a) Apertura inadvertida de la válvula de alivio del presurizador CV22, b) Rompimiento en cizalla de la tubería de vapor principal y c) Rompimiento en cizalla de una pierna fría, para este análisis se empleará el Simulador de Reactor Avanzado de Agua Presurizada, el cual es uno de los simuladores académicos del Organismo Internacional de Energía Atómica.

1. INTRODUCCIÓN

La energía, sin lugar a dudas, es de vital importancia para el desarrollo de la humanidad, siendo esencial para el desarrollo económico y social de cualquier país. De acuerdo con las proyecciones de consumo y uso final de la energía a nivel mundial, esta irá en aumento en los diferentes sectores económicos en los años venideros; impulsada mayormente por el desarrollo económico mundial [1]. Entre las distintas fuentes de energía primaria disponibles en la actualidad, la energía nuclear representa una de las opciones que permite producir energía en condiciones ambientalmente amigables debido a su baja emisión de Gases de Efecto Invernadero (GEI); de hecho, si se considera únicamente la etapa de generación eléctrica, la emisión de GEI es prácticamente nula [2].

En un reactor nuclear el máximo accidente creíble o Accidente Base de Diseño (DBA, por sus siglas en inglés), corresponde con los accidentes más significativos del criterio de fallo único. Los DBA son un conjunto de accidentes postulados frente a los cuales se deben incluir métodos específicos de protección y mitigación en el reactor, de forma que éste pueda afrontarlos sin exceder los límites autorizados. Entre los diferentes DBA considerados el Accidente con Pérdida

de refrigerante (LOCA, por sus siglas en inglés), está considerado como uno de los peores accidentes, debido a que no se considera un solo accidente, sino todo un espectro de distintos accidentes; es por eso que ha sido uno de los más preocupantes y estudiados desde los inicios de la energía nuclear [3]. Los LOCA provocan una pérdida del inventario de refrigerante del Sistema de Refrigeración del Reactor (RCS, por sus siglas en inglés), los que pueden resultar debido a roturas en las tuberías del sistema de refrigeración, o bien debido a la apertura inadvertida de alguna válvula de alivio y seguridad, entre otros.

Entre los reactores de tercera generación se encuentra el AP 600, teóricamente éste proporciona una mejor respuesta ante un LOCA debido a sus sistemas pasivos de seguridad. De ahí que surge el interés y la pertinencia de estudiarlo de manera más profunda; en el desarrollo de este trabajo se analizará cómo responde éste reactor ante ciertos eventos de LOCA, para ello se empleará el Simulador de Reactor Avanzado de Agua Presurizada del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA).

1.1. Tecnología AP 600.

El reactor AP 600 se basa en el diseño de un reactor PWR de 600 MWe, ambos desarrollados por Westinghouse. La Comisión Reguladora Nuclear de Estados Unidos (U.S. NRC, por sus siglas en inglés) concedió la certificación al diseño del AP 600 en diciembre de 1999. Fue el primer reactor nuclear con sistemas de seguridad pasivos en obtener la aprobación para operar en occidente y Asia. Sus características pasivas permiten simplificar su operación y mantenimiento. Se basa en una tecnología con respaldo de más de 30 años de experiencia operativa del reactor PWR [4]. Su funcionamiento es similar al de su antecesor el PWR; entre sus principales componentes están: dos generadores de vapor, cada uno conectado a la vasija del reactor por una pierna caliente “hot legs” y dos piernas frías “cold legs”; cuatro bombas que proporcionan la circulación del refrigerante en la Vasija a Presión del Reactor (RPV) y un presurizador conectado a la tubería del circuito frío para mantener la presión del circuito primario; su sistema también incluye: tuberías de interconexión, válvulas e instrumentación necesaria para el control operacional y la actuación de salvaguardias [4].

1.1.1. Sistemas pasivos de seguridad.

Los sistemas de seguridad pasivos (PSS, por sus siglas en inglés) se basan en procesos naturales como la gravedad, la circulación natural y principios físicos básicos; no se hace uso de bombas, ventiladores, enfriadores u otros elementos adicionales para que dichos entren en funcionamiento. Esto elimina la necesidad de fuentes de alimentación de corriente alterna relacionadas con la seguridad proporcionando mejoras medibles en la simplificación de la planta, seguridad, confiabilidad y protección de la inversión. Al incluir menos componentes, se reducen las pruebas requeridas, inspecciones y mantenimiento. Los PSS cumplen con los criterios de falla única de la U.S.NRC, el análisis de seguridad ha sido completado y documentado en el Informe Estándar de Seguridad (SSAR, por sus siglas en inglés) y en la Evaluación Probabilística de Riesgo (PRA, por sus siglas en inglés) [4].

Los sistemas de seguridad del AP 600 fueron diseñados siguiendo una filosofía de defensa en profundidad. Además de los sistemas de seguridad de un PWR convencional, presenta sistemas

adicionales entre los que podemos encontrar: a) Sistema Pasivo de Refrigeración de Emergencia del Núcleo (PXS); este sistema protege a la planta contra eventos transitorios o fugas del RCS, también provee al núcleo de un Sistema de Remoción de Calor Residual (PRHR, por sus siglas en inglés), un sistema de inyección de seguridad (SIS) y despresurización. El PXS emplea tres fuentes de agua para mantener al núcleo enfriado a través del SIS los cuales son: los Acumuladores (ACC), el Depósito de Aporte al Núcleo (CMT, por sus siglas en inglés) y el Depósito de Almacenamiento de Agua de Recarga en el Interior de la Contención (IRWST, por sus siglas en inglés) y b) Sistema de Refrigeración Pasiva de la Contención (PCS, por sus siglas en inglés). Este sistema proporciona el último disipador de calor relacionado con la seguridad de la planta, ya que enfría el sistema de contención una vez que ocurre un accidente, de modo que la presión comienza a reducirse [4].

El uso de sistemas pasivos y elementos basados en la experiencia operativa aumentan la seguridad, confiabilidad y mejoran la aceptación de su uso.

2. SIMULADORES DE PROPÓSITOS ACADÉMICOS DEL ORGANISMO INTERNACIONAL DE ENERGÍA ATÓMICA.

El OIEA patrocina el desarrollo de simuladores de reactores nucleares para apoyar a los estados miembros de la organización para la educación de sus profesionales del área nuclear. El objetivo del programa es proveer una compresión de las características de operación, sistemas de control de la reactividad, sistemas de seguridad, respuestas a transitorios o accidentes, de una variedad de plantas.

Estos constituyen instrumentos de capacitación para profesores universitarios e ingenieros que imparten temas de energía nuclear, y también se les facilitan directamente a estudiantes y científicos interesados en ampliar su compresión del tema. Presentan una respuesta dinámica con la fidelidad suficiente para proporcionar respuestas de la planta durante operaciones normales y/o en situaciones de accidente. Presentan una interfaz usuario-máquina que imita la instrumentación real del panel de control, incluido el sistema de visualización de la planta y, lo que es más importante, permite la interacción del usuario con el simulador durante la operación de la planta simulada [5].

El organismo coordina el suministro y desarrollo de esos programas de simulación, patrocina cursos y talleres de capacitación, distribuye documentación y programas computacionales. Entre los programas de simulación patrocinados por el OIEA se encuentran: a) Simulador de Reactor de Agua Presurizada, desarrollado por Micro-Simulation Technology of USA, el cual emplea el software PCTRAN. Este simulador es un PWR genérico de dos lazos y de 600 MWe, con generador de vapor en forma de U invertida, b) Simulador de Reactor Avanzado de Agua Presurizada (APWR, por sus siglas en inglés), desarrollado por Cassiopeia Technologies Inc of Canadá, el mismo se basa en un diseño de PWR de 600 MWe con sistemas pasivos de seguridad, muy similar al AP 600 de Westinghouse, c) Simulador de Reactor de Agua en Ebullición, desarrollado por Cassiopeia Technologies Inc , el mismo representa un ABWR típico de 1300 MWe con bombas internas de recirculación y un sistemas de barras de control con movimientos finos, d) Simulador de Reactor de Agua-Pesada Presurizada (PHWR, por sus siglas en inglés), desarrollado por Cassiopeia Technologies Inc y se basa en un Reactor Candu de 900 MWe, e)

Simulador del Reactor Avanzado de Agua Pesada Presurizada (APHWR, por sus siglas en inglés), desarrollado por Cassiopeia Technologies Inc from Canadá, se basa en un ACR-700, f) Simulador de Reactor Avanzado de Agua en Ebullición, el cual representa el diseño del Reactor Económico Simplificado de Agua en Ebullición (ESBWR, por sus siglas en inglés) de General Electric, el mismo fue diseñado por Cassiopeia Technologies Inc, y g) Simulador del reactor WWER-100, diseñado por Instituto de Ingeniería y Física de Moscú, Rusia [5].

Es importante destacar que los equipos y procesos modelados en estos simuladores con fines académicos representan características reales de los reactores, aunque como su propósito es académico, hay simplificaciones necesarias y suposiciones hechas en los modelos, por lo que las respuestas manifestadas por el simulador, en situaciones de accidente, no deben utilizarse con fines específicos de la central; tales como: el diseño, la evaluación de la seguridad, la concesión de licencias o la capacitación de los operadores, [6].

2.1. Simulador del Reactor Avanzado de Agua en Ebullición.

El simulador del AP 600 está basado en el diseño del PWR avanzado de 600 MWe; incluye el modelo termohidráulico del Sistema de Seguridad Pasivo de Enfriamiento del Núcleo el cual está basado en el diseño de Westinghouse del reactor AP 600, [5].

Este simulador presenta 14 pantallas de visualización interactiva, cada pantalla tiene la misma información en la parte superior y en la parte inferior. En la parte superior de cada pantalla se muestran 21 alarmas de la planta y anuncios, los cuales indican los cambios importantes en la planta que requieren acción del operador; en la parte inferior de cada pantalla se muestran los valores de mayor importancia en la planta como son: potencia neutrónica, potencia térmica, potencia de salida del generador, presión del refrigerante primario, flujo en el núcleo, presión del vapor principal, flujo de agua de alimentación y temperatura media del combustible [5]. Como regla general, todos los valores dinámicos mostrados en el simulador cumplen con las siguientes convenciones: a) los valores de presión son designados por “P” y tienen unidades de kPa, b) la temperatura es designada por “T” y tiene unidades de °C, c) los valores de flujo son designados por “F” y tiene valores de kg/s, d) las calidades de fase se indican como “X” y se expresa en %, e) el estado de las válvulas se encuentra en rojo cuando está completamente abierta, verde cuando está completamente cerrada y parcialmente roja-verde cuando está parcialmente abierta, f) el estado de las bombas es rojo cuando se encuentra funcionando y verde cuando está detenida.

Este programa de simulación emplea una variedad de modelos matemáticos para realizar los cálculos en los diferentes sistemas y subsistemas, por ejemplo: el modelo neutrónico es un modelo cinético espacial que utiliza un enfoque nodal basado en la teoría cinética de la región acoplada de Avery, en el cual el núcleo del reactor es dividido en varias zonas (o nodos) axial y radialmente, para el cálculo de la población temporal de neutrones.

Este simulador cuenta con tareas programadas basadas en eventos (transitorios y/o accidentes) que pudiesen ocurrir en un reactor AP 600. Estos eventos resultan de gran utilidad para observar la respuesta de dicha tecnología [5]. De los 20 eventos que presenta el simulador se van analizar los siguientes eventos: a) Apertura inadvertida de la válvula de alivio del presurizador CV22, b) Rompimiento en cizalla de la tubería de vapor principal y c) Rompimiento en cizalla de una

pierna fría, debido que son los que permiten analizar la respuesta del reactor ante un LOCA.

3. SIMULACIÓN DE LOS EVENTOS Y RESULTADOS.

El análisis de cada uno de los LOCA se hizo durante el transcurso de 2 horas en el programa, en éste período se observó; la evolución de cada uno de los parámetros más importantes, la actuación de los ECCS, así como el desempeño del reactor de manera general.

3.1. Apertura Inadvertida de la Válvula de Alivio del Presurizador CV22.

El control de la presión del reactor es desempeñado por el presurizador, éste tiene la capacidad de mantener o restaurar la presión de diseño en caso de variaciones de la presión; esto se logra a través del control de los calentadores o el rocío en el presurizador. En caso de un aumento súbito de la presión del presurizador, por arriba de la capacidad de control del rocío, se abrirán dos válvulas de alivio que son CV22 y CV23 con el fin de reducir la presión del presurizador; las cuales descargarán en el condensador de descarga el vapor desalojado del presurizador.

Este evento causa la despresurización del presurizador con un flujo de vapor que va hacia el condensador de descarga a través de la válvula CV22 (circulada en rojo y amarillo) que se abrió de forma inadvertida, como se puede observar en la Figura 1.

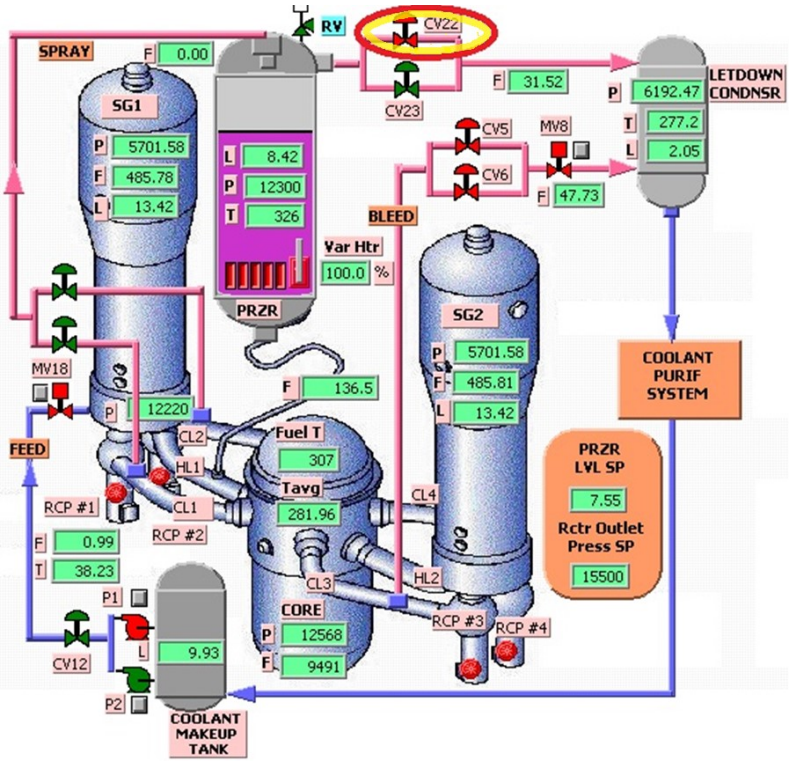


Figura 1. Apertura inadvertida de la válvula CV22.

3.1.1. Desarrollo del evento 1.

Al iniciarse este evento la presión en el presurizador comienza a caer debido al flujo de vapor que se escapa a través de la válvula CV22, por lo que los calentadores eléctricos se encenderán para compensar esta caída de presión, a pesar de que los calentadores se encuentren encendidos, éstos no pueden contener la pérdida de presión del presurizador. Al mismo tiempo debido al evento aumenta el nivel, la temperatura y la presión del condensador de descarga y aunque debería disminuir el nivel del condensador de descarga debido al aumento de presión, éste aumenta ya que el flujo de sangría también descarga en este tanque lo que a su vez contribuye al aumento del nivel de vapor que se condensa.

Debido a la despresurización del presurizador el nivel de refrigerante en éste aumentará, lo que causará que el flujo de sangría aumente tratando de reducir el inventario de refrigerante y la presión del refrigerante disminuirá, lo que dará lugar a Disparo o Parada Rápida del Reactor (SCRAM) por baja presión del refrigerante primario aproximadamente a los 25 segundos. Después del SCRAM habrá una disminución del flujo de vapor que va hacia la turbina, lo que conducirá a una reducción automática de la potencia de ésta, que llevará a un disparo de la misma a los 60 segundos de haberse iniciado la falla, lo que a su vez provocará una reducción de la potencia del reactor. Con el SCRAM se van apagar los calentadores del presurizador, por lo que el flujo de escape a través de la CV22 comienza a disminuir hasta que se hace nulo debido a que la presión del reactor se iguala a la presión del condensador de descarga y comienza a disminuir la presión y la temperatura en el éste último.

3.1.2. Actuación de los sistemas pasivos de enfriamiento del núcleo en el evento 1.

Durante el período de tiempo analizado ninguna de las fuentes de inyección que conforman al PXS experimentó ningún flujo. Para que se inyecte refrigerante proveniente de los ACC y del IRWST, la presión del RCS debe caer por debajo del punto de ajuste. Tampoco se pudo observar flujo a través de los intercambiadores de calor, ver Figura 2. Cabe destacar que la temperatura del combustible después del SCRAM, va disminuyendo en función de la variación de los diferentes parámetros de los subsistemas que forman parte del RCS.

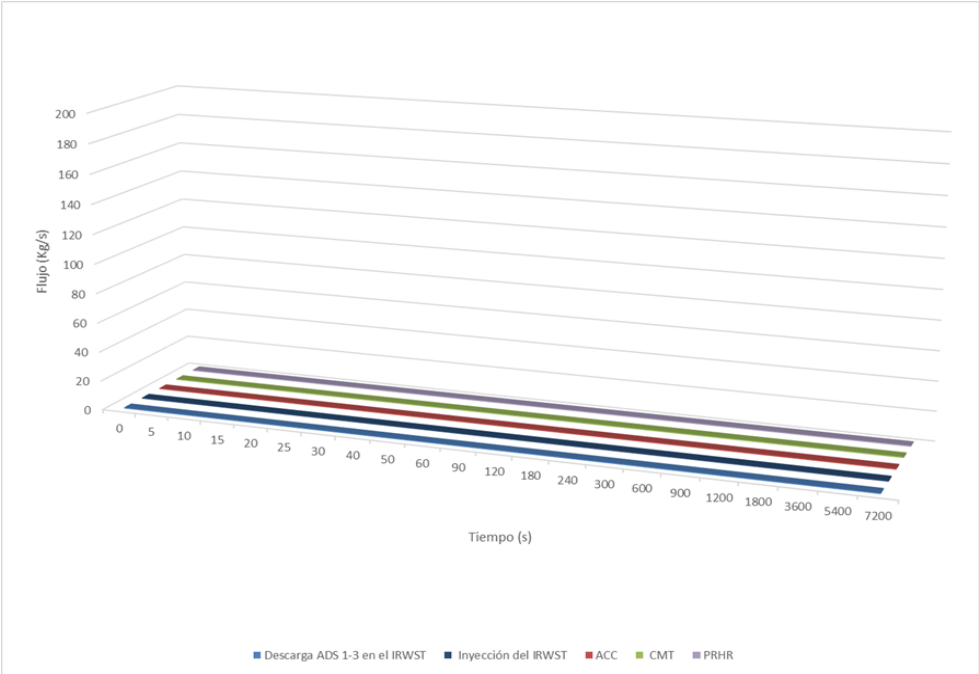


Figura 2. Variación del flujo de los principales sistemas pasivos de seguridad en el transcurso del tiempo, en el desarrollo del evento 1.

3.2. Rompimiento en Cizalla de la Tubería de Vapor Principal.

Este evento causa un rompimiento del 100% de la tubería de vapor principal dentro de la contención, justo ante de la Válvula de Corte (Cierre) de Vapor Principal (MSV) como se puede observar en la Figura 3, lo que lleva a una rápida disminución de la presión de vapor principal que va hacia la turbina.

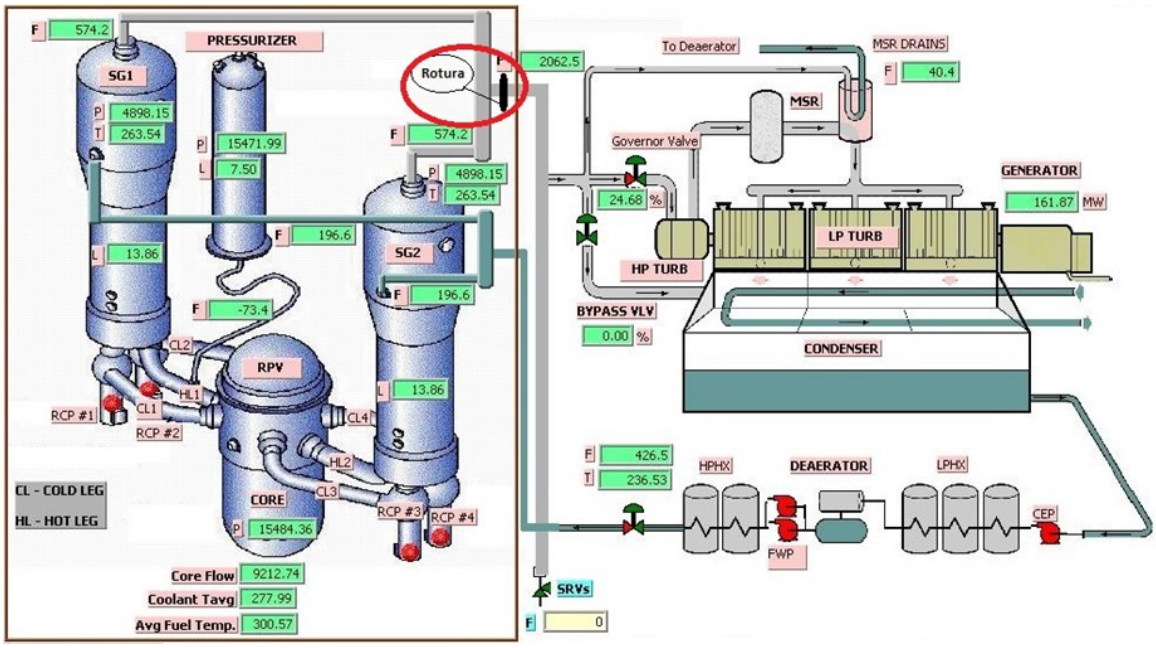


Figura 3. Rompimiento en cizalla de la tubería de vapor principal.

3.2.1. Desarrollo del evento 2.

El rompimiento de la tubería de vapor principal provocará una disminución del flujo de vapor principal que va hacia la turbina a través de la MSV; con el fin de compensar esto habrá un incremento en el flujo de salida de vapor de los generadores de vapor, lo que conducirá a SCRAM del reactor por alto flujo de vapor a los 5 segundos de haberse iniciado la falla.

Al mismo tiempo, el aumento del flujo de vapor de los generadores de vapor provocará un incremento en la remoción del calor del sistema de refrigeración del reactor; por lo que, la presión y temperatura del refrigerante primario disminuirá. Como no se repuso el flujo de vapor principal que va hacia la turbina debido al evento y al SCRAM, habrá una reducción automática de potencia de la turbina, lo que llevará a un disparo de ésta a los 15 segundos de haberse iniciado la falla, por lo que habrá una reducción de la potencia eléctrica de salida del generador. También se puede observar que el nivel de refrigerante en el presurizador disminuirá debido a la baja temperatura y presión del refrigerante primario, lo que causará que el flujo de carga aumente tratando de reponer el inventario de refrigerante en éste.

3.2.2. Actuación de los sistemas pasivos de enfriamiento del núcleo en el evento 2.

Durante el período de tiempo analizado solo se pudo observar la inyección de agua borada proveniente de los ACC, ver Figura 4, los cuales son una de las fuentes de inyección pasiva del PXS después de un evento de LOCA. Los ACC inyectan agua borada cuando la presión del sistema cae por debajo de la presión de él, en el simulador se pudo observar que esto sucedió a partir de que la presión del refrigerante primario fuera inferior a los 4000 kPa aproximadamente. Tampoco se observó flujo a través de los intercambiadores de calor.

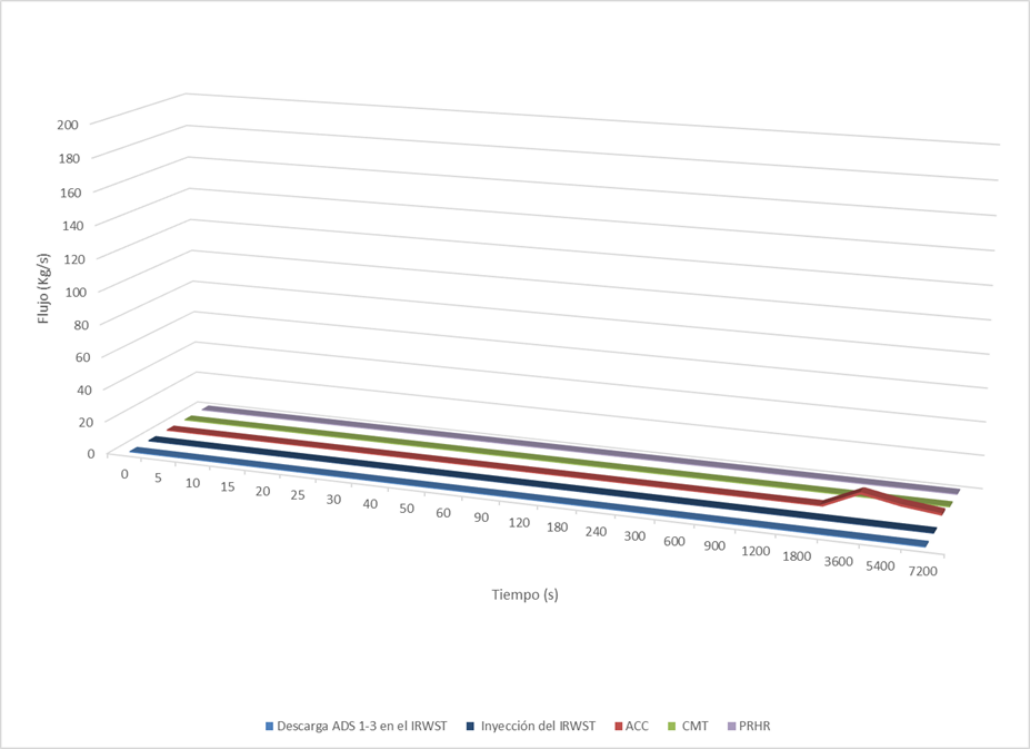


Figura 4. Variación del flujo de los principales sistemas pasivos de seguridad en el transcurso del tiempo, en el desarrollo del evento 2.

3.3. Rompimiento en Cizalla de una pierna fría

El RCS del AP 600 consta de dos circuitos de transferencia de calor. Cada circuito contiene un generador de vapor, dos bombas de refrigerante, una pierna caliente y dos piernas frías para la circulación del refrigerante entre el reactor y los generadores de vapor. Este evento causará un rompimiento de la pierna fría 4 (esta pierna se encuentra conectada al generador de vapor número dos) como se puede observar en la Figura 5 (circulada en rojo), provocando una pérdida de refrigerante.

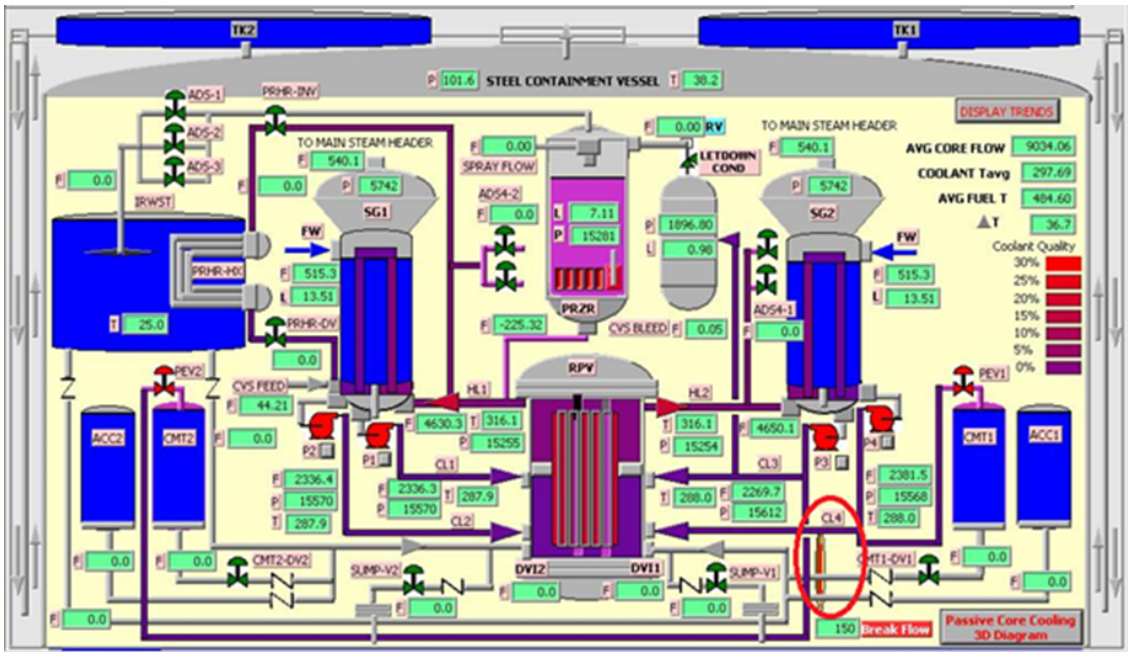


Figura 5. Rompimiento en cizalla de la pierna fría #4.

3.3.1. Desarrollo del evento 3.

Una vez iniciado el evento podemos ver como aumenta el flujo de refrigerante a través de la rotura en la pierna fría # 4, lo que provocará una disminución del flujo medio de refrigerante en el núcleo, por lo que empieza a disminuir la presión de éste; dando lugar a SCRAM del reactor por: baja presión del refrigerante aproximadamente a los 30 segundos. Después de esto se da otra señal de SCRAM por: alta presión de la contención a los 50 segundos aproximadamente.

Después del SCRAM habrá una disminución del flujo de vapor que va hacia la turbina, lo que conducirá a una reducción automática de la potencia de ésta, que llevará a un disparo de la misma a los 60 segundos de haberse iniciado la falla, por lo que habrá una reducción de la potencia del reactor. En el desarrollo de este evento también se puede observar que el nivel de refrigerante en el presurizador disminuirá debido a la caída de presión y fuga del refrigerante a través de la rotura, lo que causará que el flujo de carga aumente tratando de reponer el inventario de refrigerante en éste.

3.3.2. Actuación de los sistemas pasivos de enfriamiento del núcleo en el evento 3.

En el análisis de este evento se pudo observar que en la primera fase el líquido sub-enfriado a alta presión es ventilado desde la rotura de la pierna fría # 4 bajo condición de flujo mínimo; debido a esto, la presión y el inventario de refrigerante en el presurizador decrecerá. Después del SCRAM, se aíslan los generadores de vapor, se disparan dos bombas de refrigeración y se abren las

válvulas del PRHR y del CMT; a partir de este momento se establece una circulación natural en los circuitos del PRHR y del CMT, con el fin de disminuir la temperatura media del refrigerante primario (a partir del inicio del evento comienza a aumentar la temperatura de los diferentes subsistemas del RCS), ver Figura 6.
Como el inventario de refrigerante primario continúa disminuyendo debido a la rotura, comienzan a drenar los CMT. A los 90 segundos aproximadamente de haberse iniciado el evento, el nivel de los CMT ha caído por debajo del 67.5% de su capacidad por lo que se abrirán las válvulas del Sistema de Despresurización Automática (ADS, por sus siglas en inglés) 1-3 en el IRWST; la apertura de éstas hará que disminuya la presión del sistema primario. Una vez que disminuya la presión del sistema, por debajo de la presión de los ACC, empezará a fluir hacia la vasija del reactor el agua borada que éstos contienen, ver Figura 6.

A los 15 minutos, aproximadamente de haberse iniciado el evento el nivel del CMT ha caído por debajo del 20% de su capacidad, por lo que se abrirá las válvulas ADS-4 (son dos). Cuando las válvulas ADS-4 se abran, la presión del sistema primario caerá por debajo de la presión del IRWST, por lo que comenzará a drenar por gravedad el agua borada que está contenido en él, ver Figura 6. Cabe destacar que el agua borada del IRWST como drena por gravedad dentro de la vasija del reactor, sale del ciclo a través de la rotura. El vapor descargado a través de las válvulas ADS-4 es condensado en la superficie interior de la vasija de contención (sistema PCS). El condensado dentro de la contención retorna al sumidero de contención y al IRWST donde está disponible para el enfriamiento por recirculación. Eventualmente, los niveles del líquido dentro del IRWST y del sumidero de contención se igualarán y se establecerá un enfriamiento por recirculación a largo plazo al abrir las válvulas del sumidero.

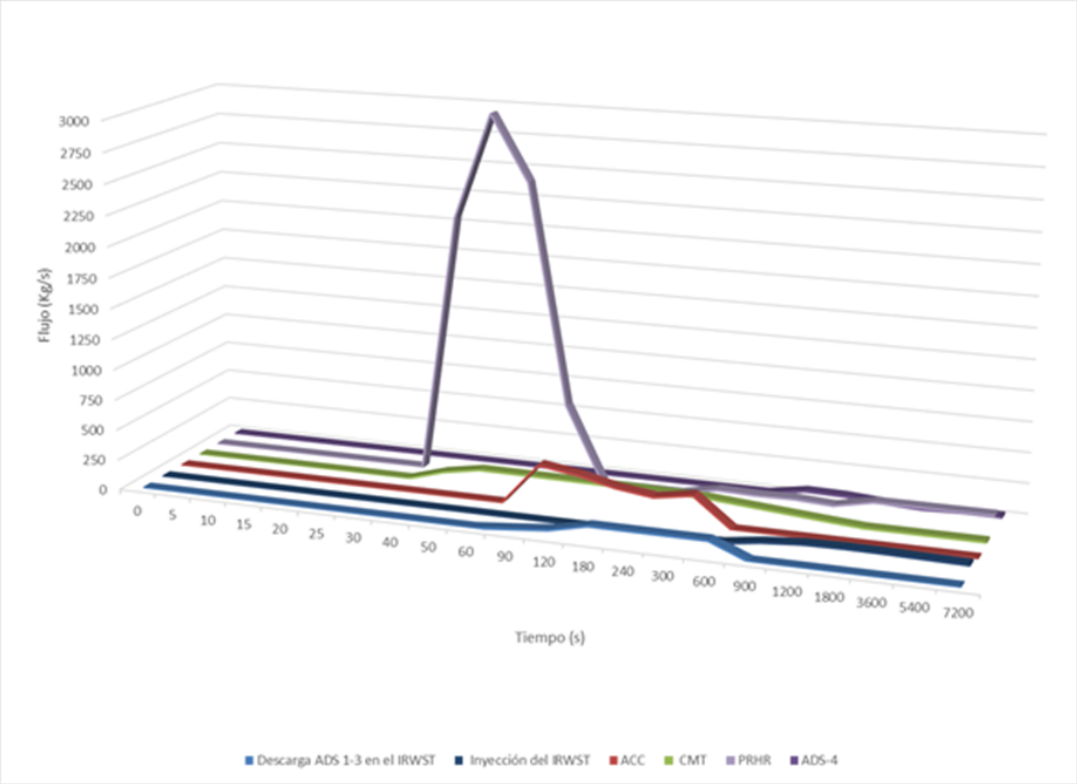


Figura 6. Variación del flujo de los principales sistemas pasivos de seguridad en el transcurso del tiempo, en el desarrollo del evento 3.

4. CONCLUSIONES

Durante el análisis de cada uno de los eventos estudiados, se pudo observar que a pesar de que el simulador académico presenta simplificaciones y suposiciones hechas en sus modelos de cálculos, los resultados obtenidos fueron bastantes fieles a los predichos teóricamente, por lo que su empleo brindó información útil durante el análisis de cada uno de los eventos estudiados. Esto nos permitió comprobar de una manera teórica-práctica que el empleo de éste reactor es seguro ante eventos de LOCA y que sus sistemas de seguridad pasiva son una muy buena opción para la mitigación de accidentes sin la presencia de corriente alterna. De igual forma el empleo de este simulador ofrece a sus usuarios una visión del funcionamiento general de la planta, así como de sus sistemas principales, ya sea en operación normal o ante uno de los eventos predeterminados que éste posee.

El empleo de reactores nucleares como el AP 600 o el AP 1000 (ambos reactores son muy semejantes, puesto que el diseño del AP 1000 evolucionó a partir del AP 600) son una opción muy buena para satisfacer una parte de la creciente demanda energética de los años venideros con una baja emisión de GEI.

REFERENCIAS

1. EIA U.S. Energy Information Administration, "Energy Outlook 2019 with projections to 2050", September 24, 2019, http://www.eia.gov/ieo
2. Ricardo Reyes Ramírez, Cecilia Martín del Campo (2006). "Metodología para la Comparación Integral de Reactores Nucleares: Selección de un reactor para México", *Primer Congreso Americano del IRPA2006, XXIV Reunión Anual de la SMSR y XVII Congreso Anual de la SNM*, Acapulco México, del 3 al 8 de septiembre 2006.
3. Juan González Cadelo, "Tesis doctoral: Análisis de secuencias de Accidente de Pérdida de Refrigerante en centrales nucleares de agua a presión mediante la Metodología ISA", E.T.S.I. Industriales (UPM), 2015.
4. OIEA, "Status report 75 – Advanced Passive pressurized water reactor (AP600)", 2011 https://aris.iaea.org/PDF/AP-600.pdf
5. Cassiopeia Technologies Inc. Canada, "Advanced Pressurized Water Reactor Simulator", 2011.
6. OIEA, "Developing a Systematic Education and Training Approach Using Personal Computer Based Simulators for Nuclear Power Programmes", Proceedings of a Technical Meeting Held in Vienna, 15–19 May 2017

Modelado Térmico de una Alberca de Combustible Gastado por Diferencias Finitas, para Estado Estacionario, Fase 1

Salvador Sandoval Valenzuela y Miguel Ceceñas Falcón
Instituto Nacional de Electricidad y Energías Limpias
Reforma 113, Col. Palmira, Cuernavaca, Morelos, México, C.P. 62490
sandoval@ineel.mx; mcf@ineel.mx

Resumen

En una planta nuclear, los ensambles que han sido descargados de la vasija del reactor para producir electricidad se alojan, por un tiempo, en la Alberca de Combustible Gastado (ACG). Eso permite la reducción de la tasa de generación de calor, como preparación para su almacenamiento a largo plazo. El alojamiento de ensambles se hace en bastidores dispuestos en el volumen de agua de la alberca, la cantidad de ensambles y su distribución generan a su vez una distribución de temperaturas en la ACG, que es de interés para diferentes aplicaciones, siendo una de ellas la comparación entre diferentes configuraciones para valorar sus ventajas y desventajas, otra de ellas es para realizar una comparación cruzada con el modelado de la ACG que hace el simulador de accidentes severos MAAP. En el presente trabajo se presenta el desarrollo de la primera fase de un modelo Térmico de una Alberca de Combustible Gastado por diferencias finitas, para estado estacionario. Así mismo, se presentan los resultados del comportamiento del modelo para diferentes representaciones de una ACG, variando el número de planos axiales de las regiones activas y no activas de los ensambles de combustible. Las variaciones tienen el objetivo de encontrar las mejores representaciones de la ACG, considerando tanto los resultados como el tiempo de los cálculos.

1. INTRODUCCIÓN

En la Alberca de Combustible Gastado (ACG) de una planta nuclear se aloja, de manera temporal, el combustible que ha sido usado para producir electricidad. Ese alojamiento tiene el beneficio de reducir la tasa de generación de calor, como preparación para su almacenamiento a largo plazo. Una ACG cuenta con bastidores que tienen canales en donde se alojan los ensambles y se mantienen siempre cubiertos de agua, para enfriamiento y como blindaje contra la radiación que emiten, como se observa en la Figura 1. Como es sabido, los ensambles se constituyen por vainas metálicas dentro de las cuales se aloja el combustible; aparte de las vainas existen otros elementos estructurales y todo el conjunto es circundado por un canal metálico.

En la Figura 2 se ilustra la conformación de una ACG con bastidores. La cantidad de ensambles, su distribución en los bastidores y la generación de calor de cada ensamble dan por resultado una distribución de temperaturas en la ACG. Esa distribución es de interés para diferentes aplicaciones, siendo una de ellas la comparación entre diferentes configuraciones para valorar sus ventajas y

desventajas, otra de ellas es para realizar una comparación cruzada con el modelado de la ACG que hace el simulador de accidentes severos MAAP [1].

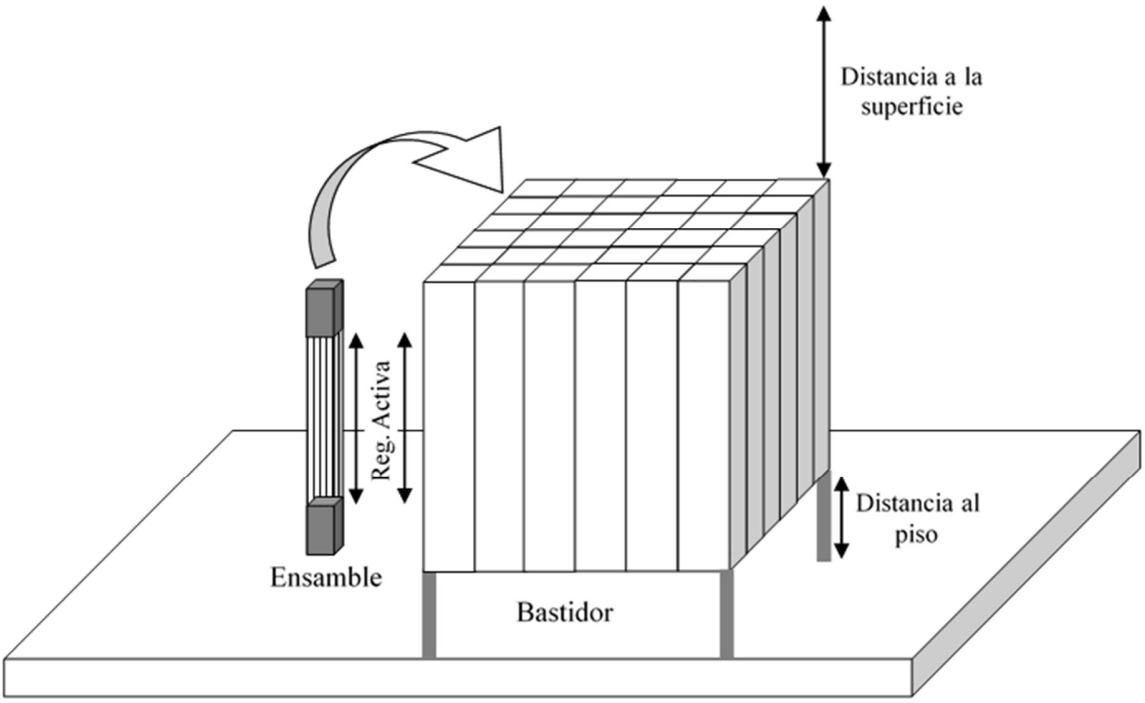


Figura 1. Ilustración de un ensamble y un bastidor dentro de una ACG.

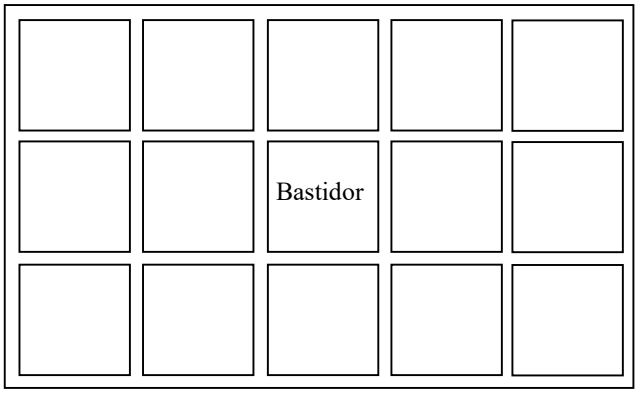


Figura 2. Ilustración de un arreglo de bastidores dentro de una ACG.

2. FORMULACIÓN E IMPLANTACIÓN

La ACG se puede dividir en planos axiales (Z) y horizontales (X-Y). Con respecto a los planos axiales, y de acuerdo con la geometría de los bastidores, se pueden definir los siguientes tipos de planos:

- Plano inferior de la ACG, se encuentra debajo de los bastidores.
- Plano inferior no activo, es la parte baja de los bastidores que corresponde a la región inferior no activa de los ensambles.
- Plano activo, corresponde a la región activa de los ensambles.
- Plano superior no activo, es la parte alta de los bastidores que corresponde a la región superior no activa de los ensambles.
- Plano superior de la ACG, se encuentra arriba de los bastidores y contiene un volumen considerable de agua que detiene la radiación emitida por los ensambles gastados.

La ACG también se puede dividir en planos verticales que pueden ser de los siguientes tipos:

- Tipo bastidor, corresponden a canales dentro de un bastidor.
- Tipo intersticial, corresponden a espacios intersticiales entre los bastidores, o entre los bastidores y los muros de la ACG.

Conjugando los planos axiales y horizontales se forma un arreglo tridimensional de celdas. Si se define como unidad de análisis una celda, se puede aplicar un modelo térmico basado en el método de diferencias finitas. La formulación puede ser como sigue:

- A partir del balance de energía térmica en torno a una celda, ver Figura 3, se obtiene la ecuación 1. En esa ecuación, el término q''' representa el calor de decaimiento adicionado a la celda. Así mismo, los términos q'' representan el flujo de calor en cada una de las caras de la celda de la Figura 3.
- Haciendo discreta la ecuación 1 se obtiene la ecuación 2, que rige el modelo de este trabajo. La discretización se realiza de la siguiente manera. Tomando como ejemplo la dirección izquierda – derecha (eje X) de la Figura 3, para la interacción térmica entre las celdas *i,j,k e i-1,j,k* se puede escribir la ecuación 3. Si se iguala el inverso de la resistencia con el término *CC,* y se reordenan términos, se puede escribir la ecuación 4. Si se aplica el mismo procedimiento a los ejes Z e Y se obtiene la ecuación 2. En donde CC_T es la suma de los términos CC_{xI}, CC_{yN}, CC_{zAr}, CC_{xD}, CC_{yS} y CC_{zAb}. Los subíndices son: I, izquierda, D, derecha, N, norte, S, sur, Ar, arriba, Ab, abajo, T, total. Los índices "x", "y" y "z" se refieren a las direcciones izquierda – derecha, norte – sur, y axial (arriba - abajo). Los índices i, j, k se refieren a un elemento del rango "x", "y" y "z", respectivamente.

$$0 = q''' + q''_{i-1,j,k} + q''_{i,j-1,k} + q''_{i,j,k-1} + q''_{i+1,j,k} + q''_{i,j+1,k} + q''_{i,j,k+1} \qquad (1)$$

$$0 = q''' + CC_{xI}T_{i-1,j,k} + CC_{yN}T_{i,j-1,k} + CC_{zAr}T_{i,j,k+1} +$$
$$CC_{xD}T_{i+1,j,k} + CC_{yS}T_{i,j+1,k} + CC_{zAb}T_{i,j,k+1} - CC_T T_{i,j,k} \qquad (2)$$

$$q''_{i-1,j,k} = \frac{(T_{i-1,j,k} - T_{i,j,k})}{Resistencia_{xI}} \qquad (3)$$

$$q''_{i-1,j,k} = CC_{xI}T_{i-1,j,k} - CC_{xI}T_{i,j,k} \qquad (4)$$

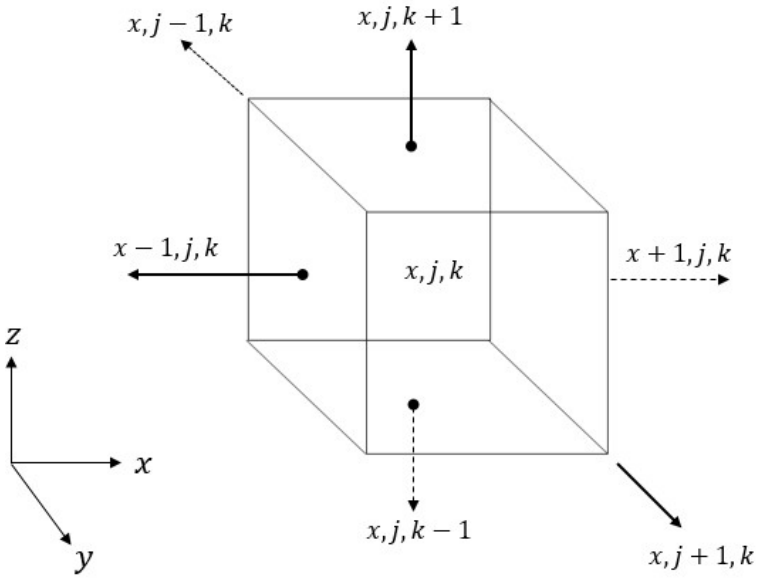


Figura 3. Ilustración de las interacciones térmicas de una celda con sus vecinas.

Adicionalmente, se hacen las siguientes consideraciones:

- Los muros son adiabáticos.
- La resistencia al flujo de calor se modela con un modelo colapsado (*lumped*) de celda.
- La tasa de generación de calor axial es uniforme.
- Por la estructura de los bastidores y de los ensambles: En la dirección axial (Z), se modela el flujo de calor por convección natural. En el plano horizontal (X, Y) se modela el flujo conductivo para metales y el convectivo para el refrigerante; para este último, se emplea el modelo de convección natural por fluido dentro de un recinto (*natural convection inside enclosure*) y se calcula la conductividad efectiva de acuerdo con la ecuación 5 [2] y [3].

$$\dot{Q} = hA(T_2 - T_1) = \frac{kNuA}{\Delta l}(T_2 - T_1) \qquad (5)$$

Para el cálculo de la resistencia equivalente en el plano X-Y y para el caso de celdas contiguas en los bastidores, y que contienen ensamble, se emplea la composición que se muestra en la Figura 4. La Figura 4 se incluye como ilustración de una de entre varias configuraciones aplicables; cada configuración depende de la posición de la celda (i.e. dentro o fuera de bastidor) y de la celda vecina en una dirección y sentido determinados. Así mismo, si la celda y la celda vecina contienen

ensamble o no. Para las propiedades de los materiales se emplearon los valores de la referencia [4] y las propiedades del agua se tomaron de las tablas de vapor del ASME. En la Figura 4, el Boral es un material absorbedor de neutrones que circunda cada canal de los bastidores junto con el acero.

Una vez formulado el modelo se implementó en el lenguaje de programación C#. Para la implantación se usó un esquema iterativo en el cual se hace un cálculo inicial de propiedades y de resistencia equivalente para las celdas, posteriormente se hace un primer cálculo de temperaturas y a partir de esas temperaturas se recalculan propiedades y resistencias hasta lograr el criterio de convergencia deseado, por ejemplo, cuando la diferencia entre iteraciones sucesivas es menor a 0.1°C.

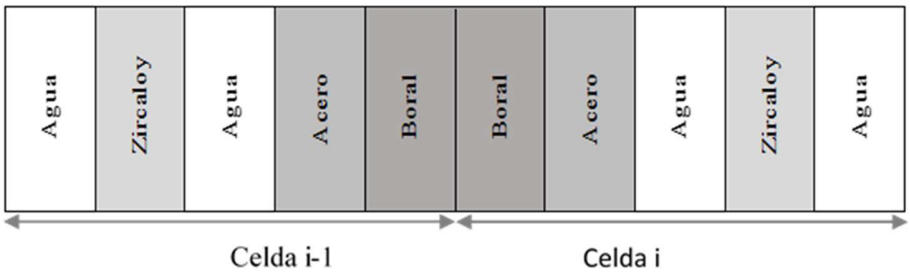


Figura 4. Composición de materiales en las direcciones izquierda - derecha (X) y norte - sur (Y), para celdas contiguas dentro de un bastidor y con ensamble de combustible dentro.

3. RESULTADOS

Existen diferentes maneras de representar una ACG en el modelo desarrollado, esto es, para algunas regiones, como es el caso de la región activa, se pueden emplear diferente número de planos axiales para su representación. Para conocer las mejores representaciones se hicieron varios cálculos y en esta sección se muestran los resultados de esos cálculos. Primero se presentan cálculos para 1 y 2 bastidores con diferente número, quemado y distribución de ensambles y posteriormente se presentan resultados para dos configuraciones de 6 bastidores y finalmente para una ACG completa. Los ensambles están distribuidos en 12 niveles de potencia, ver Tabla 1, obtenidos de las referencias [5] y [6].

Tabla 1. Potencia en función del tiempo @ 40,000 MWD/MTU

Potencia (W/MTU)	8470.1	4802.5	3231.3	2462.2	2030.2	1617.1	1361.9	1080.5	899.3
Tiempo (Años)	1	2	3	4	5	7	10	11	12

3.1. Configuración con 1 y 2 Bastidores

En la Figura 5 se muestran dos configuraciones, a saber: una con un bastidor y otra con dos bastidores. En el lado izquierdo se muestra la configuración con un bastidor y en el lado derecho se muestra la configuración con dos bastidores.

En el lado izquierdo de la Figura 5 se observa un perímetro de celdas en azul obscuro, esas celdas corresponden a espacios intersticiales entre el bastidor y las fronteras del modelo, que son, como se mencionó, adiabáticas. Dentro del perímetro se observan celdas en azul claro, que corresponden a canales del bastidor que no están ocupados por ensambles. Las celdas con un número dentro, por ejemplo 9, 4 u 11 son canales del bastidor que contienen ensambles. Esos números corresponden al grupo de quemado al que corresponden. Entre más pequeño sea el valor del grupo, más reciente es su quemado. De igual manera, en el lado derecho de la Figura 5 se observan dos recuadros circundados por celdas perimetrales en azul obscuro, celdas sin ensamble en azul claro y celdas con un número dentro, que corresponde al grupo de quemado al que corresponden.

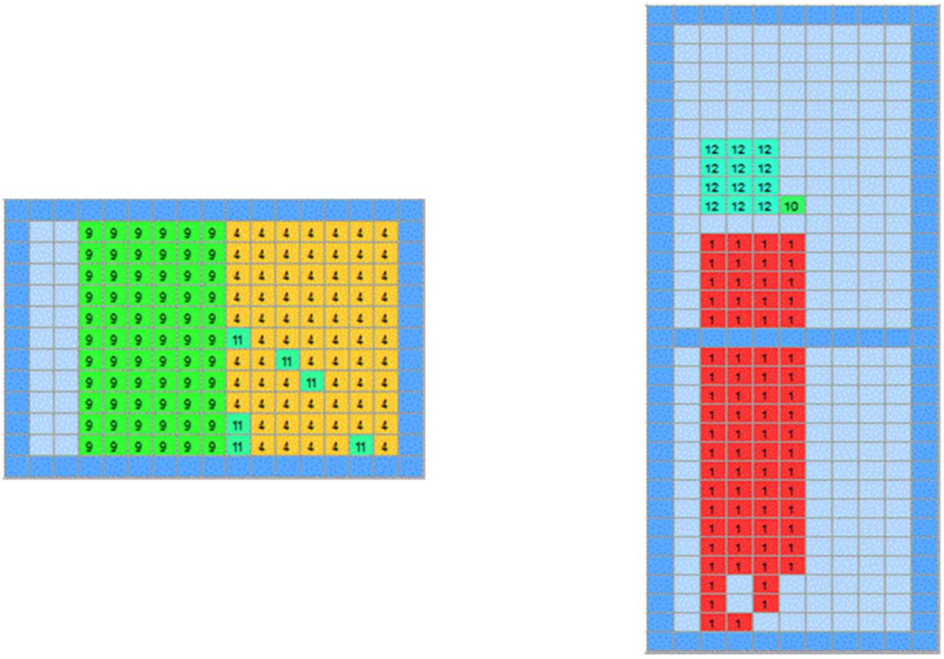


Figura 5. Distribución de ensambles para arreglos de un bastidor, izquierda, y dos bastidores, derecha.

3.1.1. Zona activa

En el lado izquierdo de la Figura 6 se muestra el resultado del cálculo para un bastidor. En esa figura se muestra, en el eje de las abscisas, la tendencia de la temperatura, en el canal más caliente, variando el número de planos axiales de la región activa. En el eje de las ordenadas se muestra la distancia relativa del piso de la ACG al espejo de agua. En la parte superior de la figura se encuentra una leyenda que muestra dos números, e.g. 23-14, el primer número (23) es el número de planos totales y el segundo número (14) es el número de planos en la región activa.

En el lado derecho de la Figura 6 se muestra el resultado del cálculo para dos bastidores. En esa figura se muestra la tendencia de la temperatura, en el canal más caliente, variando el número de planos axiales de la región activa.

Cabe señalar que, para esta fase de implantación del modelo, el número de planos axiales está limitado por la relación altura/longitud requerida por las correlaciones empleadas para el cálculo del coeficiente convectivo de trasferencia de calor. Para este caso, el número límite superior de planos axiales en la región activa es 22 (que, sumados a los 9 planos axiales de las regiones no activas suman 31 planos totales) y el límite inferior de planos axiales en la región activa es 12 (i.e. 21 planos totales).

Para ambas configuraciones, es decir, en ambos lados de la Figura 6, se puede observar que la temperatura mayor registrada crece, de manera amortiguada, a medida que se incrementa el número de planos axiales. También se puede observar una ligera disminución en la temperatura de los planos superiores. Esta situación no necesariamente es desfavorable, es conservador tener una temperatura superior mayor en escenarios de reducción de inventario de agua, ya que se descubren primero los planos superiores.

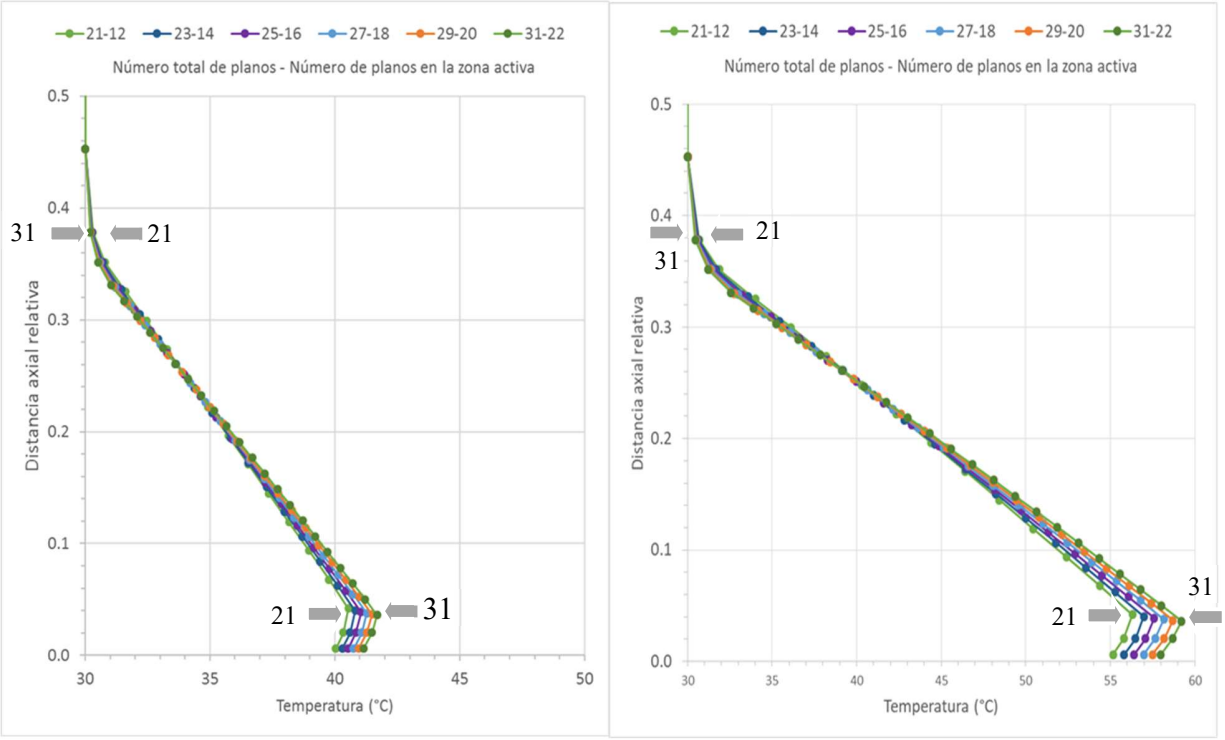


Figura 6. Perfil axial del canal con mayor temperatura, variando el número de planos, para los casos de un bastidor, izquierda, y dos bastidores, derecha.

3.1.2. Zonas superior e inferior

La zona superior está constituida por el volumen de agua arriba de los bastidores (región superior) y por el volumen ocupado por la región no activa superior de los ensambles. Para la zona superior de la ACG modelada se consideró un tirante de agua de 7 m (277.3 in), lo cual da margen para ser representado con un número de planos que va de 5 a 43 planos, manteniendo la validez de las correlaciones empleadas. En la parte izquierda de la Figura 7 se muestra la variación de la

temperatura en el canal más caliente, variando el número de planos de la región superior (entre 5 y 17 con pasos de 4 planos axiales), para el arreglo de dos bastidores. Como se puede observar, la variación en función del número de planos es pequeña.

Para el caso de la región no activa superior, las dimensiones son tales que solo permite ser representada con 1 o con 2 planos axiales, todos los cálculos realizados en este trabajo emplean 2 planos axiales y, para observar su impacto, en la parte derecha de la Figura 7 se presenta el perfil axial del canal más caliente, empleando 1 y 2 planos. Como se puede observar, el cambio es muy pequeño, aunque el incremento en el tiempo de cálculo con un plano axial adicional no es elevado por lo que el uso de 1 o 2 planos para representar esta región no hace gran diferencia.

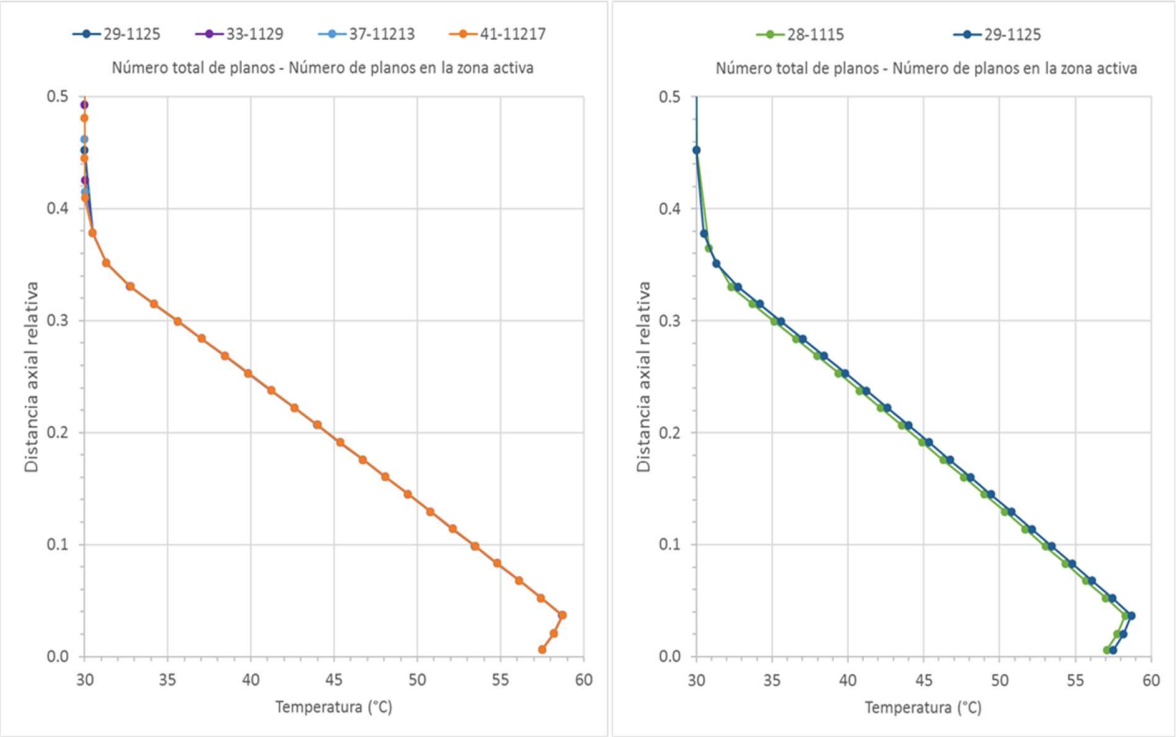


Figura 7. Perfil axial de temperatura en el canal más caliente, variando el número de planos en la zona superior, izquierda, y en la zona no activa superior, derecha.

3.2. Dos Configuraciones con Seis Bastidores

En esta sección se muestra el resultado de cálculos para dos configuraciones. Cada una de esas configuraciones corresponde a seis bastidores de una ACG y se hacen cálculos independientes para explorar el comportamiento del modelo. Las configuraciones se muestran en la Figura 8 y en la Figura 9. En ambos casos, los cálculos se hicieron empleando 20 planos axiales para la zona activa, 5 para la región superior, 2 para la región superior no activa y uno para cada una de las regiones inferiores, 29 planos axiales en total.

La configuración 1 tiene 1326 canales disponibles, de los cuales 923 están ocupados con ensambles gastados, 183 son a espacios intersticiales y el resto son canales que no tienen ensamble. Los

ensambles están distribuidos en 12 niveles de potencia. Para la configuración 2 se tienen 1496 canales disponibles, de los cuales 364 están ocupados con ensambles gastados, 341 son espacios intersticiales y el resto son canales que no tienen ensamble. Los ensambles están distribuidos en 12 niveles de potencia. Para esta fase del modelo las celdas de los espacios intersticiales tienen las mismas dimensiones que las celdas de los canales.

Como se puede observar, para la configuración 1, el perfil de temperaturas del canal más caliente se encuentra dentro del rango de valores reportado por la referencia [7], 20°C a 49°C. Como se puede observar en la Figura 8, los ensambles más recientemente quemados para la configuración 1 corresponden al grupo 3. Para la configuración 2, los ensambles más recientemente quemados corresponden al grupo 1, son los más calientes, recordemos que entre más pequeño el valor del grupo es más reciente su quemado. En los resultados de la configuración 2 se refleja la influencia del mayor calor de decaimiento ya que hay un incremento de 13.6°C comparando la mayor temperatura del canal más caliente de las configuraciones 1 y 2. El mayor valor obtenido para la configuración 2 (56.3°C) que es cercano a los valores reportados en las referencias [8] y [9].

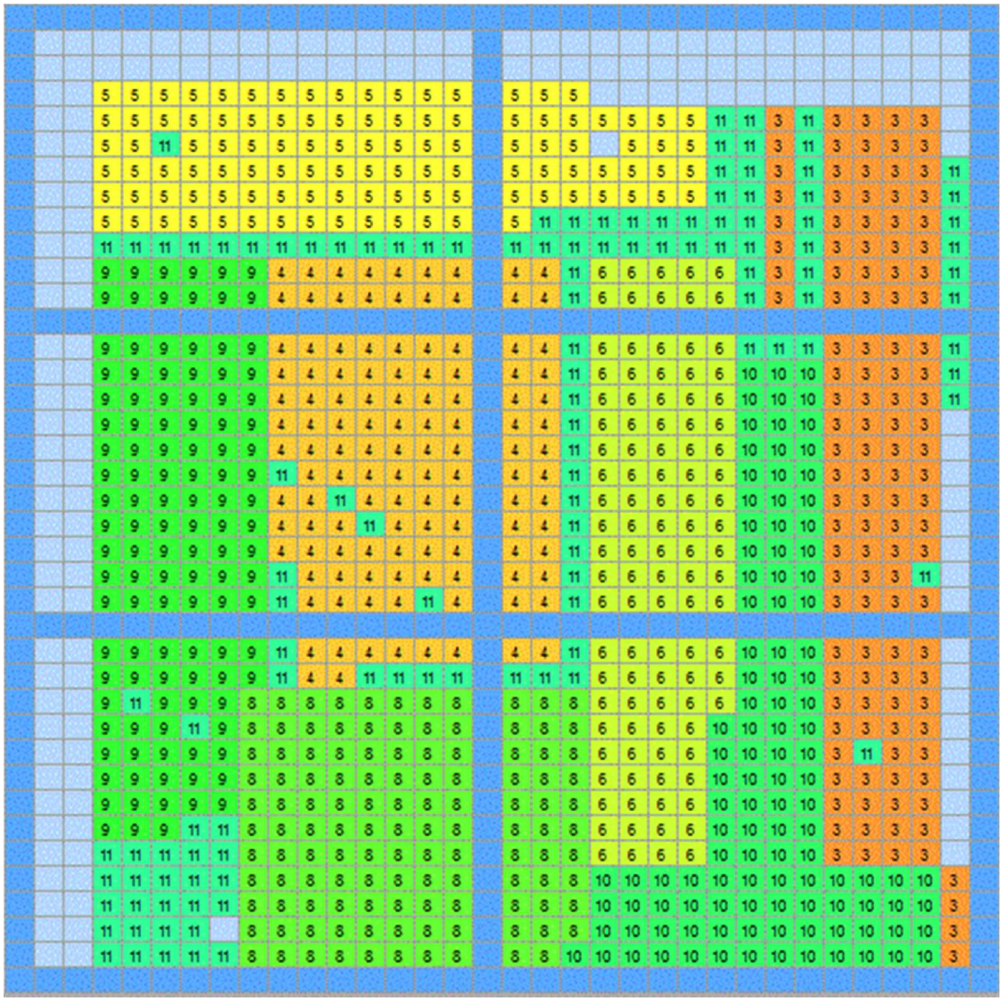


Figura 8. Distribución de ensambles para la configuración 1, de seis bastidores.

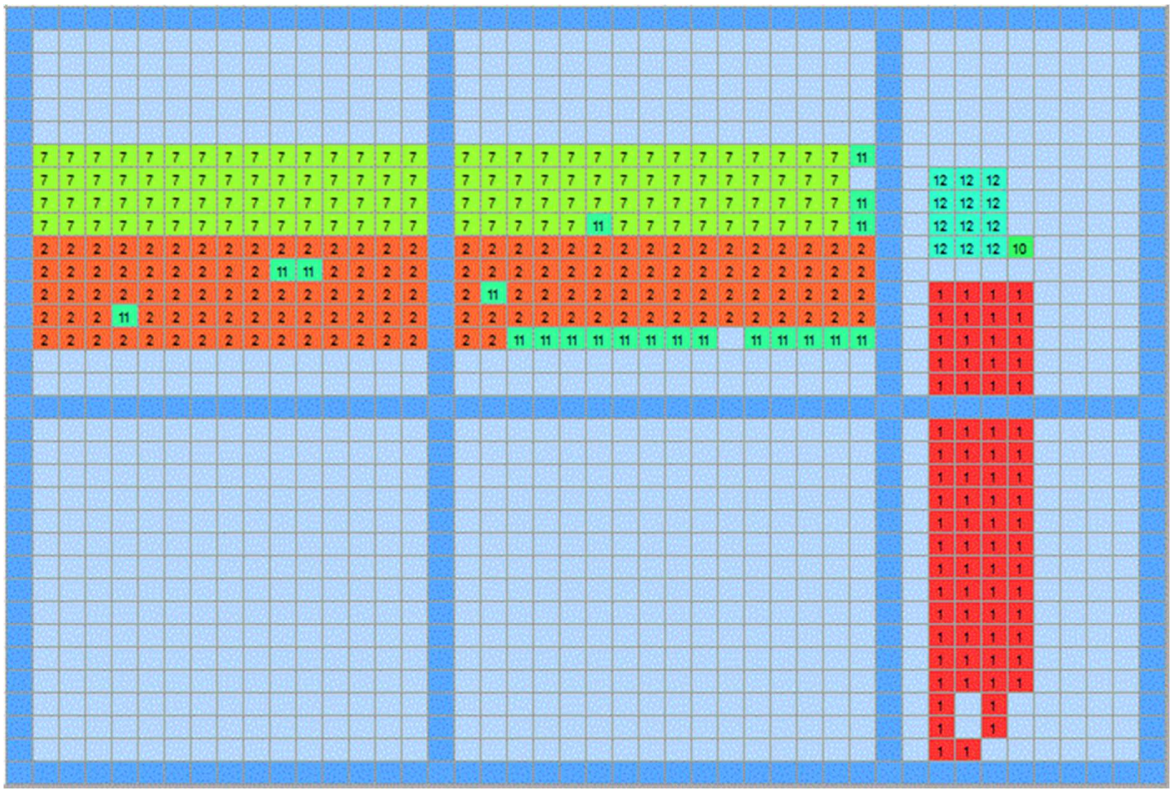


Figura 9. Distribución de ensambles para la configuración 2, de seis bastidores.

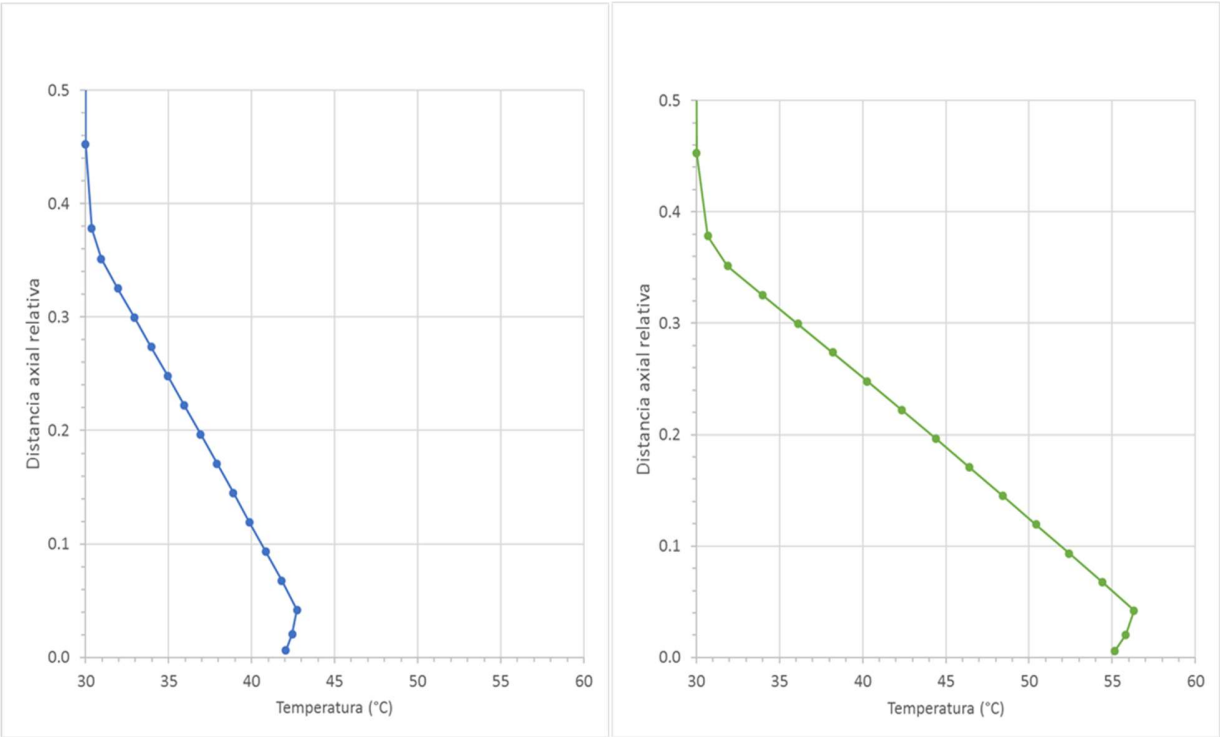


Figura 10. Perfil axial del canal más caliente para la configuración 1, izquierda, y para la configuración 2, derecha.

3.3. Una Alberca de Combustible Gastado

Para conformar una ACG, se unieron las configuraciones 1 y 2 y se adicionaron bastidores; para llegar a un total de 15 bastidores con 3080 canales disponibles, de los cuales, 1287 están ocupados con ensambles gastados, 506 son espacios intersticiales y el resto son canales que no tienen ensamble; la configuración se muestra en la Figura 11. El perfil axial del canal más caliente corresponde al de la parte derecha de la Figura 10 y en la Figura 12 se muestra la superficie del plano más caliente. Como se comentó en la subsección anterior, la distribución de temperaturas calculada se encuentra dentro de los valores reportados por las referencias [7], [8] y [9].

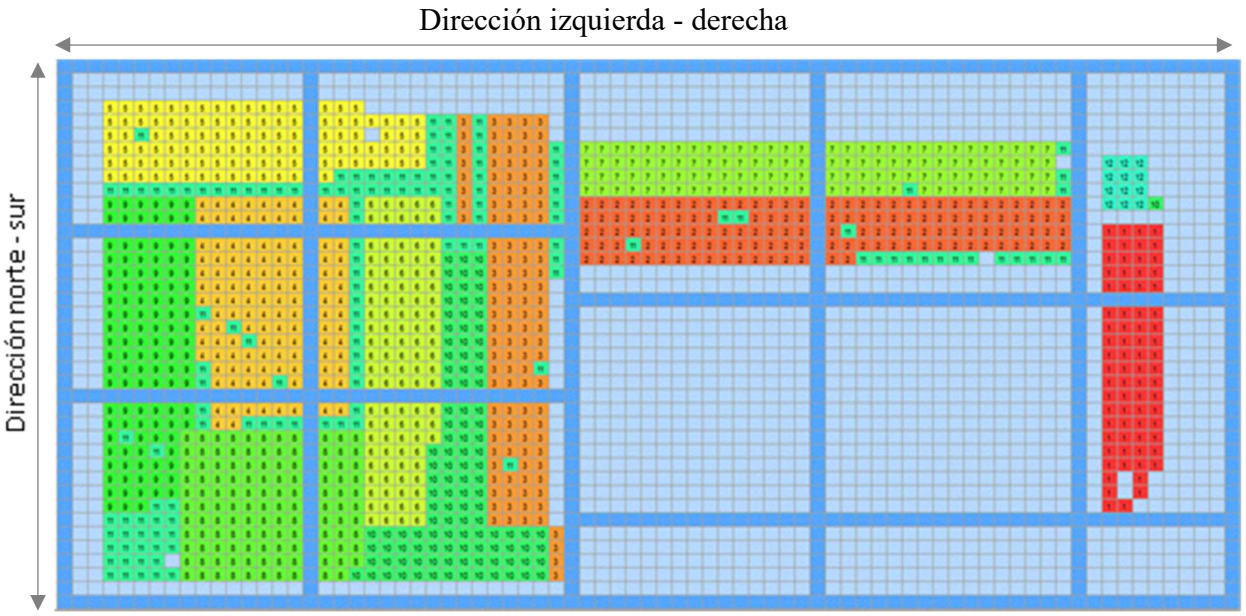


Figura 11. Distribución de ensambles para la ACG.

4. CONCLUSIONES

Se concluyó la primera fase de un Modelo Térmico de una Alberca de Combustible Gastado, por Diferencias Finitas, para Estado Estacionario. Se exploró el modelo para observar su comportamiento con diferente número de bastidores, número de ensambles y quemado de los ensambles, también se realizaron cálculos para una ACG completa. A partir de los resultados obtenidos se puede concluir lo siguiente:

- El tiempo de cálculo crece en proporción al cuadrado del número de planos axiales, por lo que existe un incentivo para determinar las mejores y más eficientes formas de representación de las diferentes regiones de la ACG, i.e. región inferior, región inferior no activa, región de combustible activa, región superior no activa y región suprior.

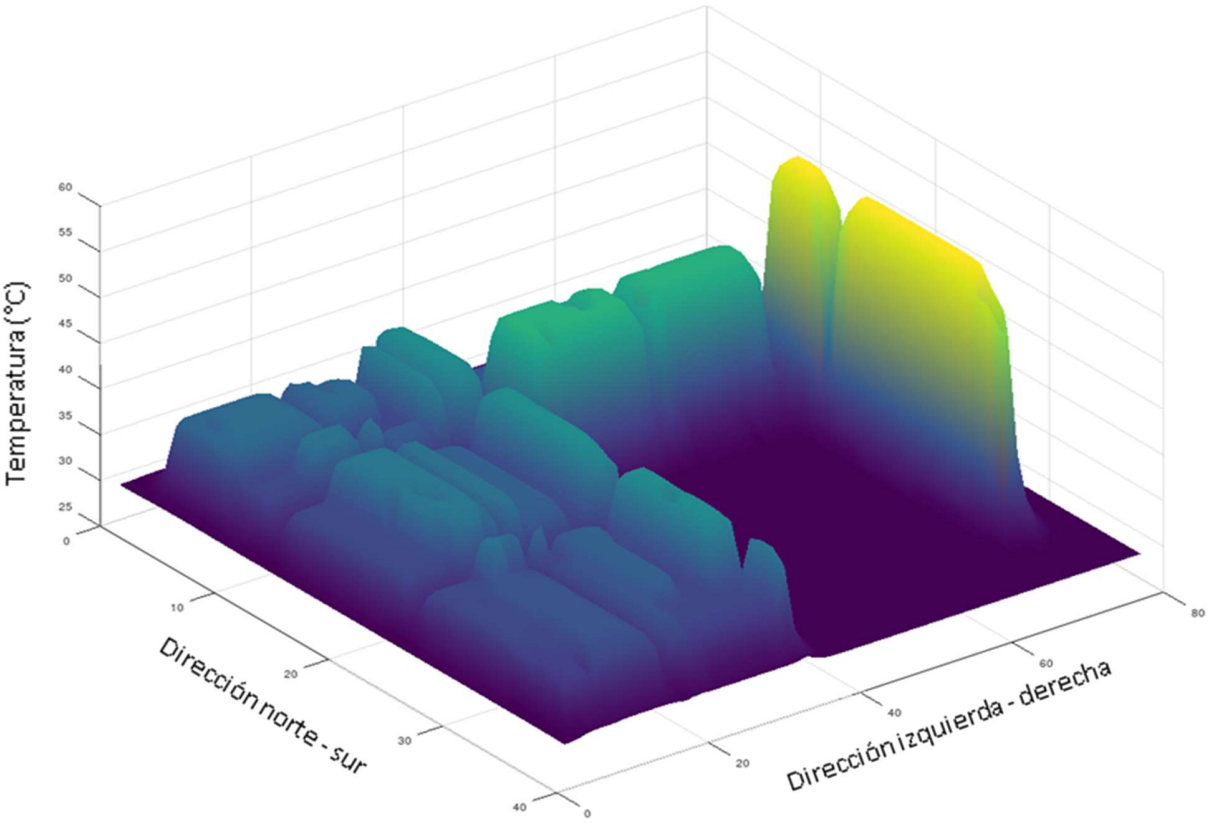


Figura 12. Superficie de temperaturas para el plano más caliente.

- El número de planos con los que se puede representar una región puede estar limitado por las correlaciones empleadas, como es el caso de una de las correlaciones empleadas en esta fase de desarrollo del modelo; la cual limita la relación "altura / longitud característica" a un rango en el cual se conserva la validez de la correlación.
- Para esta fase del modelo no existe beneficio en el incremento del número de planos axiales de la región superior y el mejor valor fue 5. Así mismo, para la región no activa superior se pueden emplear 1 o 2 planos con diferencias no significativas en los resultados.
- Para la región activa el número de planos axiales recomendado es de 12 a 23, que combinados con 9 planos para las regiones no activas da un total de 21 a 32 planos axiales totales. Dentro de ese rango, la temperatura mayor registrada crece, de manera amortiguada, a medida que se incrementa el número de planos axiales. Así mismo, hay una ligera disminución en la temperatura de los planos superiores. Esta situación no es desfavorable, es conservador tener una temperatura superior mayor en escenarios de reducción de inventario de agua, ya que se descubren primero los planos superiores.
- El modelo permite identificar la representación más adecuada, tomado en cuenta tanto el resultado como el tiempo de cálculo, para contar con datos de referencia sobre el comportamiento de la temperatura en una alberca de combustible gastado en estado estacionario.

REFERENCIAS

1. EPRI, MAAP5, *Modular Accident Analysis Program for LWR Power Plants*, Vol. 1-4, Palo Alto, CA.
2. Cenguel Yanus, *Heat Transfer A Practical Approach*, Mc Graw Hill, Second Edition, 2003, New York, N.Y.
3. Necati Ozisik, M, *Heat Transfer A Basic Approach*, Mc Graw Hill, International Edition 1985, New York, N.Y.,
4. NRC, *Predictions of Spent fuel Heatup After a Complete Loss of Spent Fuel Pool Coolant*, NUREG-1726, June 200, Washington, DC.
5. NRC, *Analysis of Spent Fuel Heatup Following Loss of Water in a Spent Fuel Pool,* NUREG/CR-6441, March 2002, Washington, DC.
6. Herman, O.W., C.V., Parks, and J.P. Renier, *Technical Support for Proposed Decay Heat Guide Using SAS2H/ORIGEN-S Data*, NUREG/ CR-5625, ORNL-6698, September 1994.
7. Johnson Jr. A. B., "*Behavior or Spent Nuclear Fuel in Water Pool Storage*", Pacific Northwest Laboratory, Battelle, BNWL-2256, September 1977, Springfield, Virginia.
8. De la Rosa, J.C., et al. "*Analysis of the inherent response of nuclear spent fuel pools*", Annals of Nuclear Energy 124 (2019) 295–326.
9. A. Grazevicius and A. Kaliatka, "*Modelling of the spent fuel heat-up in the spent fuel pools using one dimensional system codes and CFD codes*", Kerntechnik 82 (2017) 3.

Herramienta de Visualización para el Análisis Pos-Proceso en RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4

Heriberto Sánchez Mora
Instituto Politécnico Nacional
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n, Edificio 9, Col. San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, C. P. 07738, Ciudad de México.
heribertosanchez7@hotmail.com

Javier Ortiz Villafuerte
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Municipio de Ocoyoacac, C. P. 52750, Méx.
javier.ortiz@inin.com

Marco Antonio Polo Labarrios y Sergio Quezada Garcia
Universidad Nacional Autónoma de México
C.U., Coyoacán, C. P.04510, Ciudad de México.
plabarrios@hotmail.com; sequga@gmail.com

Resumen

Para el análisis de resultados proveniente de códigos nucleares son necesarias las herramientas de visualización, ya que la cantidad de información a analizar es bastante amplia, por lo que es difícil su manipulación. Como un esfuerzo de ello, se encuentra en desarrollo una herramienta de visualización pos-proceso de simulación para el código de termohidráhulica y accidentes severos en reactores nucleares: RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4. Dicha herramienta permite la elaboración nodal de la planta nuclear con base a su diseño y la reproducción de la simulación en un ambiente gráfico con la finalidad que sea amigable con el usuario, versátil para cualquier planta nuclear simulada en el RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4 y de pocos recursos computacionales necesarios para la instalación de este nuevo programa. Hasta ahora se han añadido algunas variables termohidráhulicas como lo son: presión, temperatura del agua, temperatura del vapor, temperatura de saturación, energía interna del agua, energía interna del vapor, vacíos por agua y vacíos por vapor. En comparación al programa GRAPE, desarrollado previamente para éste propósito, se muestra la facilidad de instalación y de uso de este nuevo programa. El código es desarrollado en C++ y con el utilización de las librerías de OpenGL, que se obtienen como programas de libre uso, mostrando lo económicamente factible que resulta elaborar este código de visualización.

1. INTRODUCCIÓN

La necesidad de análisis durante y después los procesos de simulación de Plantas de Energía Nuclear (PEN), es uno de los pasos fundamentales para entendimiento de la fenomenología y toma de decisiones. Bajo esta premisa, las herramientas de visualización forman un pilar en el

apoyo del investigador y la generación de sus conclusiones bajo algún escenario simulado. Esto último no solo aplica para simulación de PEN sino que también para toda la amplia gama de matemáticas aplicadas. Lo que se puede decir que la visualización es el aspecto del modelado y la simulación [1].

Ante la necesidad de análisis de resultados en la simulación PEN varios códigos han implementado sus propias herramientas de análisis como lo han hecho; MELCOR [2], MAAP [3] y RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4 [4,5], por mencionar algunos. Los códigos citados tienen internamente su interfaz de análisis integrada para simulaciones en curso o pos-proceso, excepto RELAP/SCDAPSIM. RELAP/SCDAPSIM tiene una herramienta externa para el análisis pos-proceso llamada GRAPE [4], la cual es muy versátil para cualquier PEN simulada en RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4, 3.5 y 4.0, en cambio el costo para su adquisición se tiene considerarse además del costo por la adquisición del código, tenerse en cuenta los requerimientos computacionales y la instalación de programas auxiliares como Ruby[6].

Una iniciativa por la simulación pos-proceso en RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4 es la implementación y creación de un ambiente gráfico que requiera pocos recursos computacionales y que sea flexible para cualquier modelo de PEN y complementar las necesidades de análisis.

2. RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4

RELAP/SCDAPSIM MOD 3.4 es un código de simulación de termohidráhulica en PEN para reactores enfriados por agua ligera y agua pesada, como lo son los Boiling Water Reactors (BWR), Pressurized Water Reactors (PWR), CANDUs y reactores de investigación como los TRIGA. Está dividido en dos secciones: RELAP, el cual simula los sistemas hidrodinamicos y estructuras de calor (las cuales pueden simular barras de control y de combustible) y SCDAP que simula los componentes del núcleo (barras de control y combustible, sistemas de aislamiento y espada de barras de control para BWR). Es capaz de simular daño severo al núcleo (fundición de barras de combustible y barras de control, dinámica de corium, reacciones eutécticas de materiales, generación de hidrógeno, etc.) considerando el cambio de configuración geométrica para el flujo de agua y vapor de agua incluso en convección natural [7].

El código considera el flujo en dos fases bajo el esquema de 6 ecuaciones, en otras palabras, las ecuaciones de conservación: momento, energía y masa, son implementadas en cada una de las fases. Permite hacer una nodalización detallada del sistema termohidráhulico, y una nodalización de los componentes del núcleo de hasta 20 nodos axiales en las versiones comerciales. Es considerado un código de mejor estimación por el nivel de detalle en que se puede modelar una PEN.

3. HERRAMIENTA DE VISUALIZACIÓN

Como ya ha sido discutido, la cantidad información a organizar para analizar después de una simulación es bastante amplia en una PEN, y en RELAP/SCDAPSIM no es la excepción, por lo que la elaboración de un programa de visualización facilitaría la abstracción y la manipulación de resultados. Por lo anterior, se encuentra en desarrollo el siguiente programa, el cuál está dividido

en dos secciones: *RELAP DRAWER* y *RELAP VIEWER,* ambas partes desarrolladas en C++*,* el primero de ellos permite dibujar la nodalización de volúmenes del sistema hidrodinámico de la PEN y el segundo ejecuta, tanto la visualización generada por *RELAP DRAWER* como la lectura del archivo de salida o *output* generado por RELAP/SCDAPSIM después de la simulación dando como resultado una interfaz dinámica del proceso en el tiempo.

3.1.1 RELAP DRAWER

Permite dibujar la interfaz gráfica y asociar los volúmenes a las figuras añadidas. Una vez seleccionada la figura con el ratón se puede asociar el número de volumen, dicho numero debe ser el mismo que el que aparece en el archivo *output* de la simulación, la cual consta de una estructura: nnn-nn0000, donde n es un número entero, no debe ser olvidado añadir el guion medio. A dichas figuras se les puede seleccionar la posición en el área de trabajo mediante el ratón de la computadora o con los cursores del teclado, se les puede ajustar la medida con el teclado una vez que la figura ha sido seleccionada con las teclas siguientes: X=aumentar longitud, x=disminuir longitud, Y=aumentar altura, y=disminuir altura. Las figuras pre-diseñadas incluyen rectángulos, semi-círculos y círculos. La **Figura 1** muestra un ejemplo de la interfaz de *RELAP DRAWER.*

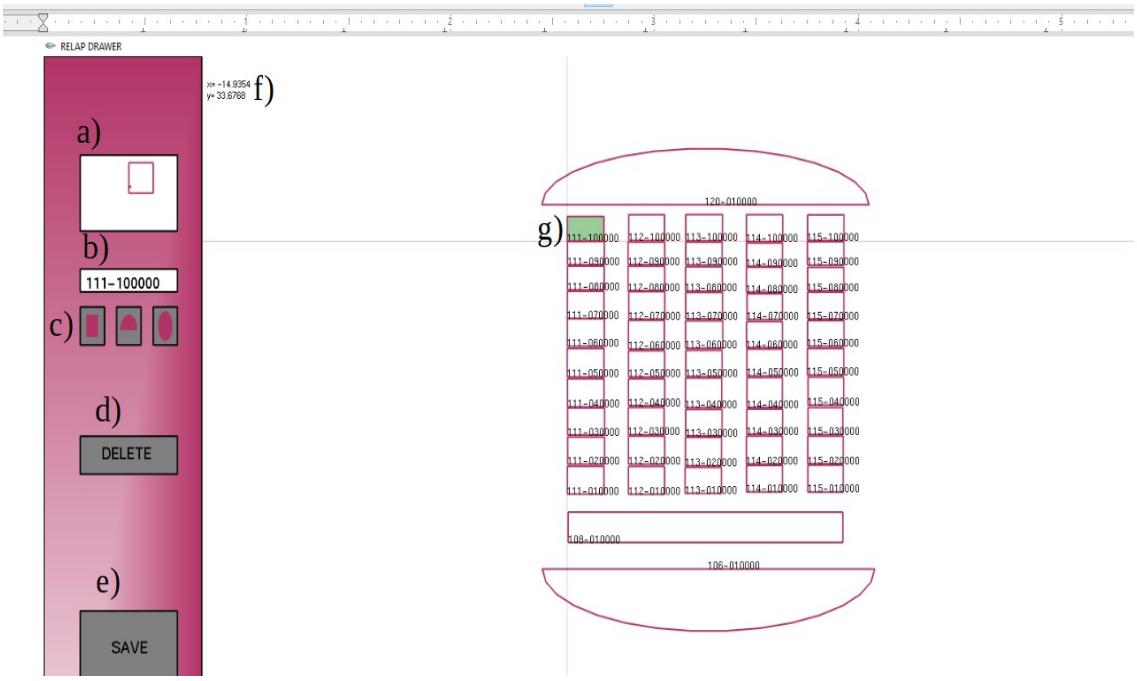


Figura 1. Ejemplo de interfaz de RELAP DRAWER. a) Caja donde aparece el siguiente volumen a añadir, b) número de volumen, c) menú de la figura del volumen a añadir (cuadrado, semi-círculo y círculo), e) guardar proyecto, f) posición del volumen seleccionado, g) volumen seleccionado (el volumen se torna verde al ser selccionado), h) área de trabajo.

Una vez guardado el proyecto, el programa crea un archivo en la misma carpeta, cuyo nombre del archivo es "compview.i", el cual contiene todas las especificaciones del dibujo y será leído por el programa RELAP VIEWER.

3.1.1 RELAP VIEWER

Este programa tiene la finalidad de ejecutar la lectura del archivo "compview.i" y del output de la simulación, y así ejecutar la visualización. Para que esto ocurra, el programa RELAP VIEWER, el archivo "compview.i" y el output deben existir en la misma carpeta. Se sabe que los archivos output de salida de RELAP/SCDAPSIM se guardan con el mismo nombre con que se tiene el archivo de entrada (input) de la simulación, por lo que, para que se lleve acabo la lectura de forma satisfactoria el archivo output debe de tener el nombre de "output.o". Adicionalmente, se tiene que tener en la misma carpeta el archivo glut32.dll. Lo anterior se muestra en la **Figura 2**.

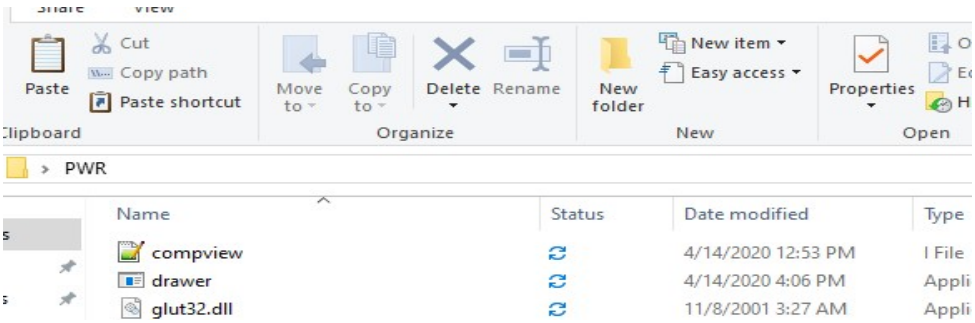


Figura 2. Archivos necesarios para la ejecución de *RELAP VIEWER*.

Una vez hecho lo anterior y ejecutar *RELAP VIEWER* el resultado es el mostrado en la **Figura 3 y Figura 4**. La **Figura 3** muestra el sistema nodalizado y el menú de variables, mientras que la **Figura 4** muestra las gráficas de traza y el menú de variables.

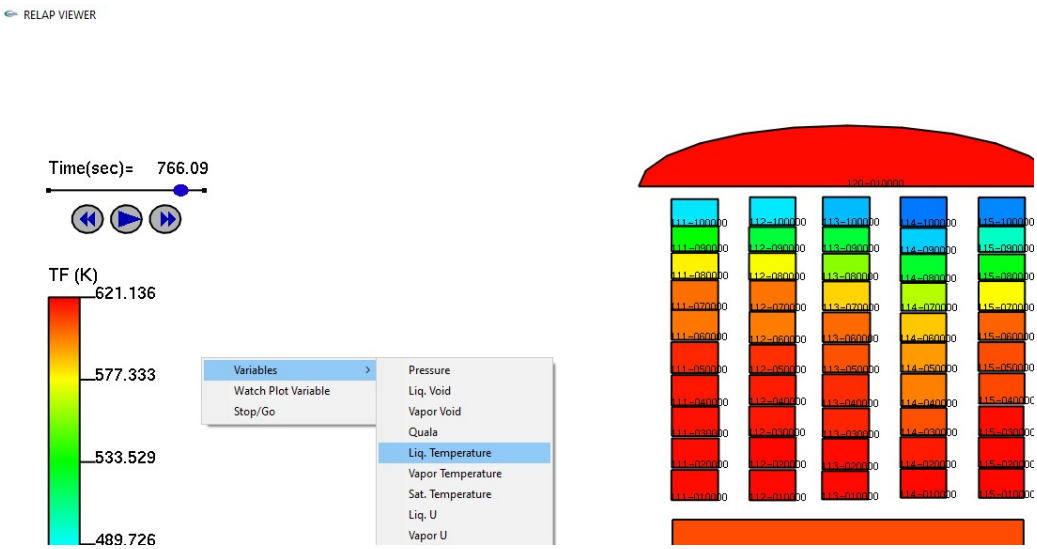


Figura 3. Interfaz de nodalización de *RELAP VIEWER*.

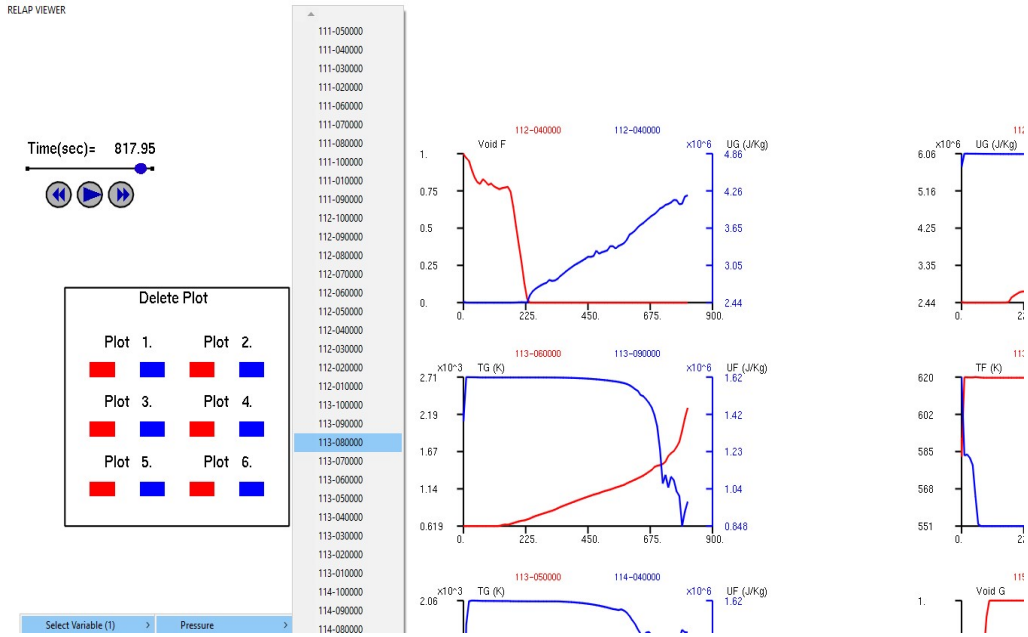


Figura 4. Interfaz de gráficas de traza de *RELAP VIEWER*.

4. LIMITACIONES Y VENTAJAS

Las limitaciones y ventajas del código son las siguientes:

Limitaciones:

- Solo admite 150 volúmenes.

- Contiene 9 parámetros extraídos del *output.*
- Permite 12 gráficas de traza.
- No muestra la línea de uniones entre volúmenes.
- Solo muestra información de componentes hidrodinámicos.

Ventajas:

- Pocos requerimientos computacionales (peso del programa : 3 MB).
- No requiere instalación.
- No tiene ningún costo.
- Se cuenta con la fuente, por lo que se puede mejorar.
- Fácil manipulación.

5. CONCLUSIONES

El análisis de las simulaciones se verán altamente favorecidas con esta herramienta, ya que fue pensaba para ser aplicada a cualquier archivo de salida de simulación del código RELAP/SCDAPSIM. Además de mostrar una facilidad en su ejecución en comparación del programa GRAPE. Se espera en un futuro añadir más variables de análisis como lo son los componentes SCDAP.

REFERENCIAS

1. Diallo S., Tolk A., "Effective Visualization in Modeling and Simulation", *2015 Spring Simulation Multiconference*, Alexandria Virginia, April 2015.
2. "Página de SANDIA" https://energy.sandia.gov/wp-content/gallery/uploads/MELCOR.pdf (2020)
3. "Página de Fauske" https://www.fauske.com/nuclear/maap-modular-accident-analysis-program (2020)
4. Tatsumi M., Tsujita K., Sato K., Tamari Y., "GRAPE: Graphical RELAP/SCDAPSIM Analysis Platform for Education and Engineering", *ICONE-24*, Charlotte, California , USA,Octubre 2016.
5. Sánchez-Mora H., Chávez-Mercado C., Allison C., Hohorst J. K., "Analysis Contour Plots in RELAP/SCDAPSIM/MOD 3.4 and MOD 4.1", *2018 26th International Conference on Nuclear Engineering*, London, England, July 2018.
6. Furr M., An J., Foster J., Hicks M., "The Ruby Intermediate Language" , University of Maryland, Orlando, Florida, USA, Octubre, 2009.
7. Allison C., Hohorst J. K., "Role of RELAP/SCDAPSIM in Nuclear Safety", *Science and Technology of Nuclear Installations*, Vol. **2010**, pp. 1-17, Enero 2010.

Implementación de la aproximación SP_L en AZNHEX

Guillermo Muñoz Peña y Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional
Av. Instituto Politécnico Nacional
Col. San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero,
07738 CDMX, México
ing.gmp23@hotmail.com; evalle@ipn.mx

Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca sn,
La Marquesa, Ocoyoacac
52750, Edo. Mex., México
armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

A principios de la década de 1960, y como respuesta ante la necesidad de producir datos de mayor exactitud numérica en la resolución de la ecuación de difusión superando las limitaciones tecnológicas de la época, el Doctor en física Ely M. Gelbard propuso la aproximación SP_L, una simplificación derivada del Método de Armónicos Esféricos utilizado en el esquema de transporte de neutrones, pero más sencilla de implementar gracias a su semejanza con un sistema de ecuaciones de difusión. El presente trabajo tiene el objetivo de mostrar el procedimiento utilizado que permitió aplicar la propuesta del Dr. Gelbard en el código de difusión AZNHEX de la Plataforma AZTLAN, con el fin de incrementar la precisión numérica de los resultados que este programa puede generar. Para lograr esto, se recurrió al diseño de un preprocesador independiente al código fuente del programa principal, y mediante el cual es posible realizar el cálculo de ciertos parámetros neutrónicos cuyos valores son los únicos que se modificarán entre los distintos ordenes de la aproximación SP_L. La determinación de los nuevos valores de estos parámetros conduce a realizar modificaciones menores en el archivo de datos de entrada de un determinado problema. Si bien se puede considerar que el estado de desarrollo de este preprocesador continúa en una etapa muy joven, los resultados obtenidos, y que se reportan aquí, son consistentes con el propósito central de la aproximación SP_L, para el caso de uno de los problemas benchmark mostrados, y con los resultados derivados de la validación de un segundo problema mediante un código de transporte. Los dos problemas benchmark utilizados para verificar el funcionamiento del preprocesador desarrollado consideran un núcleo de composición heterogénea, siendo el primero de ellos un núcleo en tres dimensiones mientras que el segundo sólo contempla dos dimensiones, ambos en estado estacionario y para varios grupos de energía, con distintas condiciones de frontera en cada caso en particular.

1. INTRODUCCIÓN

El diseño, análisis y operación de un reactor nuclear precisa de conocer la manera en la que la población de neutrones se distribuirá en el interior del reactor durante la reacción de fisión en cadena. Los dos modelos utilizados en el área de neutrónica para lograr esto son el esquema de transporte de neutrones, más preciso en comparación, y la teoría de difusión, que ha cimentado el desarrollo de múltiples programas computacionales enfocados en la resolución de la ecuación de difusión de neutrones. Dentro de este conjunto de herramientas de cómputo encontramos al código AZNHEX [1] [2] [3] (acrónimo de las palabras clave ***AZ**TLAN*, ***N**odal* y ***Hex**agonal*, un programa mediante el cual es posible resolver la ecuación de difusión dependiente de la energía y del tiempo, o en estado estacionario, y para regiones de dos y tres dimensiones caracterizadas por elementos o celdas con una geometría transversal hexagonal. El código AZNHEX forma parte de la Plataforma AZTLAN [4], un proyecto liderado por el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares en colaboración con distintas casas de estudio y dirigido hacia la autonomía de cálculo en el diseño y análisis de reactores nucleares en México.

Con la finalidad de mejorar las capacidades del código AZNHEX en cuanto a la precisión numérica de sus resultados se refiere, se ha incorporado en dicho código al Método Simplificado de Armónicos Esféricos, también conocido como aproximación SP_L (del inglés ***S**implified* P_L *equations*).

2. LA APROXIMACIÓN SP_L

La aproximación SP_L surge como una simplificación derivada del tratamiento de la dependencia angular de la ecuación de transporte en una sola dimensión mediante el Método de Armónicos Esféricos (o aproximación P_L). De esta manera, al considerar una sola dimensión, la aplicación de la aproximación P_L se traduce únicamente en la implementación de polinomios de Legendre para la discretización de los términos dependientes de la dirección angular del neutrón. De esta manera, y considerando un caso en estado estacionario así como el tratamiento de la dependencia energética mediante la Teoría de multigrupos, la aproximación P_L unidimensional queda representada por:

$$\Sigma_{t_g}(z)\phi_l^g(z) + \frac{l+1}{2l+1}\frac{d\phi_{l+1}^g(z)}{dz} + \frac{l}{2l+1}\frac{d\phi_{l-1}^g(z)}{dz} = \sum_{g'=1}^{G}\left[\Sigma_{s_l}^{g'\to g}(z)\phi_l^{g'}(z) + S_l^{g'}(z)\right]$$

$$\text{donde:} \qquad l = 0, \ldots, L \tag{1}$$

A principios de la década de 1960, el Dr. Ely M. Gelbard [5] [6] propuso la aproximación SP_L como una alternativa más viable, en comparación con los complejos esquemas de transporte, para la generación de resultados mediante el esquema de difusión caracterizados por un nivel de precisión más elevado por encima del modelo estándar. La propuesta del Dr. Gelbard parte de la aproximación P_L unidimensional dada en la ecuación (1), y consiste únicamente en realizar el reemplazo de las derivadas ordinarias en dicha expresión por operadores de cálculo multivariable

[5] [7]. Así, en las ecuaciones donde L exhibe un valor impar, la derivada ordinaria es sustituida por un operador gradiente (∇) y el flujo escalar es reemplazado por una función vectorial, mientras que para las ecuaciones donde L muestra un valor par, la derivada ordinaria es sustituida por un operador divergencia ($\nabla\cdot$) y el flujo escalar permanece sin cambios. Al llevar a cabo esta propuesta, se genera el siguiente sistema de L+1 ecuaciones [8] [9] por grupo de energía, dado por las expresiones (2) y (3) para L par y para L impar, respectivamente:

$$\Sigma_{t_g}(\vec{r})\phi_l^g(\vec{r}) + \frac{l+1}{2l+1}\nabla\cdot\vec{\phi}_{l+1}^g(\vec{r}) + \frac{l}{2l+1}\nabla\cdot\vec{\phi}_{l-1}^g(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^{G}\left[\Sigma_{s_l}^{g'\to g}(\vec{r})\phi_l^{g'}(\vec{r}) + S_l^{g'}(\vec{r})\right] \tag{2}$$

$$\Sigma_{t_g}(\vec{r})\vec{\phi}_l^g(\vec{r}) + \frac{l+1}{2l+1}\nabla\phi_{l+1}^g(\vec{r}) + \frac{l}{2l+1}\nabla\phi_{l-1}^g(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^{G}\left[\Sigma_{s_l}^{g'\to g}(\vec{r})\vec{\phi}_l^{g'}(\vec{r}) + S_l^{g'}(\vec{r})\right] \tag{3}$$

Este sistema de ecuaciones representa a la aproximación SP_L para multigrupos y en estado estacionario, y se caracteriza por presentar un total de L+2 incógnitas, (L+1)/2 escalares y (L+1)/2 vectoriales. Con el objetivo de obtener una solución única a dicho sistema, la cantidad de ecuaciones se iguala al número de incógnitas al asumir que:

$$\frac{d\phi_{L+1}^g(z)}{dz} = 0 \qquad \text{o} \qquad \begin{cases}\nabla\phi_{L+1}^g(\vec{r}) = \vec{0}\\ \nabla\cdot\vec{\phi}_{L+1}^g(\vec{r}) = 0\end{cases} \tag{4}$$

La razón de suponer que este término sea igual a cero radica en el hecho de que su contribución dentro del sistema al aumentar el valor de L comienza a ser muy pequeña debido a las rápidas oscilaciones del polinomio de Legendre $P_{L+1}(\mu)$, al cambiar de signo L+1 veces, dentro del intervalo en el que se encuentra definido [10].

3. LA APROXIMACIÓN SP_L Y EL CÓDIGO AZNHEX

3.1. Breve Descripción del Código AZNHEX

El código AZNHEX [1] [2] [10] [11], como se mencionó anteriormente, permite la resolución de la ecuación de difusión de neutrones, en geometría transversal hexagonal, para la obtención de resultados como lo son: el valor del factor de multiplicación efectiva k_{eff}, el valor del flujo escalar de neutrones ϕ, y la potencia radial y axial generada. Para llevar esto a cabo, AZNHEX hace uso de la técnica de aproximación (*blending*) desarrollada por Gordon y Hall [11], mediante la cual es posible realizar un mapeo conforme de un hexágono en un cuadrado de referencia en el que, posteriormente, será implementado el método nodal Raviart-Thomas-Nédélec de índice cero (RTN-0) para la discretización de la dependencia espacial de la ecuación de difusión. Adicionalmente, AZNHEX es capaz de realizar cálculos dependientes de la energía y del tiempo

(o en estado estacionario), gracias a la aplicación de la Teoría de multigrupos y del Método θ para el tratamiento de las variables independientes energía y tiempo, respectivamente.

3.2. Incorporación de la Aproximación SP_L en el Código AZNHEX

Con el objetivo de lograr la exitosa incorporación de la aproximación SP_L en el código AZNHEX, se ha desarrollado un preprocesador totalmente independiente al código fuente del programa principal y el cual basa su funcionamiento en la resolución del sistema conformado por las ecuaciones (2) y (3) como si se tratara de una ecuación de difusión. Para conseguir esto, se ha partido de la llamada forma "canónica" de la aproximación SP_L, la cual se encuentra generalizada, para el caso isotrópico, por:

$$-\nabla\cdot\frac{\mu_n^{\,2}}{\Sigma_{t_g}}\nabla\Phi_n^g(\vec{r})+\Sigma_{t_g}\Phi_n^g(\vec{r})=\sum_{g'=1}^{G}\left[\Sigma_{s_0}^{g'\to g}(\vec{r})\phi_0^{g'}(\vec{r})+S_0^{g'}(\vec{r})\right]\quad \text{donde: } n=1,\dots,\frac{L+1}{2} \tag{5}$$

y en donde el flujo escalar $\phi_0^g(\vec{r})$ queda definido por la función Φ, la cual a su vez dependerá del orden L que el usuario desee implementar. De esta manera, $\phi_0^g(\vec{r})$ se encuentra dado por:

$$\phi_0^g(\vec{r})=\Sigma_{n=1}^{(L+1)/2}\omega_n\Phi_n^g(\vec{r}) \tag{6}$$

Llevando a cabo un desarrollo que parte de la ecuación general de la aproximación SP_L (la expresión (5)), puede lograrse que el sistema de ecuaciones formado por (2) y (3) sea semejante a una ecuación de difusión, dada para medios heterogéneos por:

$$-\nabla\cdot\widehat{D}_i(\vec{r})\nabla\Phi_i(\vec{r})+\widehat{\Sigma}_{R_i}\Phi_i(\vec{r})=\sum_{j\neq i}^{((L+1)G)/2}\widehat{\Sigma}_{si\to j}\Phi_j(\vec{r})+\hat{\chi}_i\sum_{j=1}^{((L+1)G)/2}\nu\widehat{\Sigma}_{f_j}\Phi_j(\vec{r})$$
$$\text{donde:}\quad i=1,\dots,\frac{(L+1)G}{2} \tag{7}$$

y para medios homogéneos por:

$$-\widehat{D}_i(\vec{r})\nabla^2\Phi_i(\vec{r})+\widehat{\Sigma}_{R_i}\Phi_i(\vec{r})=\sum_{j\neq i}^{((L+1)G)/2}\widehat{\Sigma}_{si\to j}\Phi_j(\vec{r})+\hat{\chi}_i\sum_{j=1}^{((L+1)G)/2}\nu\widehat{\Sigma}_{f_j}\Phi_j(\vec{r})$$

$$\text{donde:} \qquad i = 1, \ldots, \frac{(L+1)G}{2} \tag{8}$$

en donde el coeficiente de difusión y las distintas secciones eficaces se definen en función de los términos μ y ω (valores constantes específicos para cada orden de la aproximación SP_L, presentados en las ecuaciones (5) y (6)), de acuerdo con:

$$\begin{gathered}
\widehat{D}_{i(n,g)} = \frac{\mu_n^{\,2}}{\Sigma_{t_g}} \qquad \text{o} \qquad \widehat{D}_{i(n,g)} = 3\mu_n^{\,2} D_g \\
\widehat{\Sigma}_{R_{i(n,g)}} = \Sigma_{t_g} - \omega_n \Sigma_{s_0}^{g\to g} \\
\nu\widehat{\Sigma}_{f_{i(n,g)}} = \omega_n \nu_g \Sigma_{f_g} \\
\hat{\chi}_{i(n,g)} = \chi_g \\
\widehat{\Sigma}_{s_{j(m,g')\to i(n,g)}} = \omega_n \Sigma_{s_0}^{g'\to g} \\
\text{con:} \qquad n,m = 1, \ldots, \frac{L+1}{2} \quad \text{y} \quad g,g' = 1, \ldots, G
\end{gathered} \tag{9}$$

La incorporación de la aproximación SP_L en AZNHEX se ha centrado en los valores impar de L hasta $L = 7$. Así, el desarrollo que conduce a la forma canónica de las aproximaciones SP_1, SP_3, SP_5 y SP_7 involucra en un momento dado sistemas de ecuaciones cuya resolución revelará el valor de los términos μ y ω. Estos resultados se encuentran resumidos en la Tabla I.

Tabla I. Valores de las constantes μ y ω para diferentes ordenes de la aproximación SP_L

$n = 1, \ldots, (L+1)/2$	μ_n	ω_n
1	$1/\sqrt{3}$	1
L = 3		
1	0.339981043584856	0.652145154862546
2	0.861136311594053	0.347854845137454
L = 5		
1	0.238619186083197	0.467913934572691
2	0.661209386466265	0.360761573048139
3	0.932469514203152	0.171324492379170
L = 7		
1	0.18343464249565	0.36268378337836
2	0.525532409916329	0.31370664587789
3	0.796666477413627	0.222381034453374
4	0.960289856497536	0.101228536290376

La cantidad de estos términos constantes para cada caso determina el número de veces que el código AZNHEX debe resolver la ecuación (7) (o la ecuación (8)) por cada grupo de energía involucrado en el problema ya que, y en función de la cantidad de materiales considerados y de acuerdo con las relaciones dadas en (9), para la aproximación SP_1 existirá un conjunto de

secciones eficaces y un conjunto de coeficientes de difusión, para la aproximación SP_3 estarán presentes dos conjuntos de cada parámetro neutrónico y de esta manera hasta la aproximación SP_7, en donde existirán cuatro conjuntos de secciones eficaces y cuatro conjuntos de coeficientes de difusión. Este esquema es equivalente a considerar que el número inicial de grupos de energía se duplicará, triplicará o cuadruplicará en función del orden impar L, por lo que AZNHEX resolverá dicha ecuación de difusión hasta un número final de grupos de energía que involucra a los grupos "reales" en adición a un conjunto de grupos "artificiales". En el presente trabajo, este número final de grupos de energía ha sido designado como G_{SPL} y es determinado mediante:

$$G_{SPL} = \frac{(L+1)G}{2} \tag{10}$$

donde L representa al orden de la aproximación SP_L que desee implementarse, y G representa al número inicial de grupos de energía involucrados en el problema. De esta manera, la operación de este preprocesador independiente, nombrado como *spl_isotropic*, consiste primeramente en la lectura de los valores de los coeficientes de difusión y de las secciones eficaces iniciales del problema a resolver desde un archivo de texto plano. Dicho archivo además debe contener, previo a la información antes mencionada y en el siguiente orden: la cantidad de materiales involucrados en el problema, el número inicial de grupos de energía y el orden de la aproximación SP_L que desee utilizarse. Una vez hecho esto, el preprocesador actualizará el número de grupos de energía e inicializará las variables para proceder a calcular sus nuevos valores mediante las definiciones mostradas en (9) y utilizando los datos presentados en la Tabla I, incorporados en una pequeña base de datos dentro del mismo preprocesador. Una vez que ha finalizado el cálculo de estos parámetros neutrónicos, *spl_isotropic* imprimirá los nuevos valores de los coeficientes de difusión en un nuevo archivo de texto generado por el mismo programa. Desde este archivo, basta con una sencilla acción de "copiado y pegado" para reemplazar la información inicial en el input a resolver por los datos actualizados. Este funcionamiento se describe brevemente en el diagrama de flujo de la Figura 1. Para finalizar, resulta necesario realizar ciertas modificaciones menores, relacionadas con el cambio en el número de grupos de energía, en el input a resolver antes de la ejecución normal de AZNHEX.

4. VERIFICACIÓN Y VALIDACIÓN DEL PREPROCESADOR *spl_isotropic*

4.1. Verificación del Preprocesador *spl_isotropic*: Resolución del Modelo de un Reactor VVER-1000

El primer problema benchmark que se describe aquí ha sido utilizado con el único fin de verificar el adecuado desempeño del preprocesador *spl_isotropic*. Dicho problema benchmark consiste en un reactor VVER-1000 en tres dimensiones y en estado estacionario, donde sólo se ha modelado una cuarta parte del núcleo, y el cual se caracteriza por un total de 25 ensambles, 8 materiales diferentes, dos grupos de energía iniciales y condiciones de frontera extrapolada. La información completa sobre este problema puede ser encontrada en la referencia correspondiente [12]. La distribución radial y axial de los materiales que componen a este reactor se presenta en la Figura 2.

Los resultados obtenidos para este caso se enfocan primeramente en los valores del factor de multiplicación efectiva (k_{eff}), los cuales han sido generados utilizando distintos mallados radiales y axiales, y mediante una diferencia máxima entre iteraciones sucesivas de 1.0×10^{-6}. Estos resultados se presentan en la Tabla II.

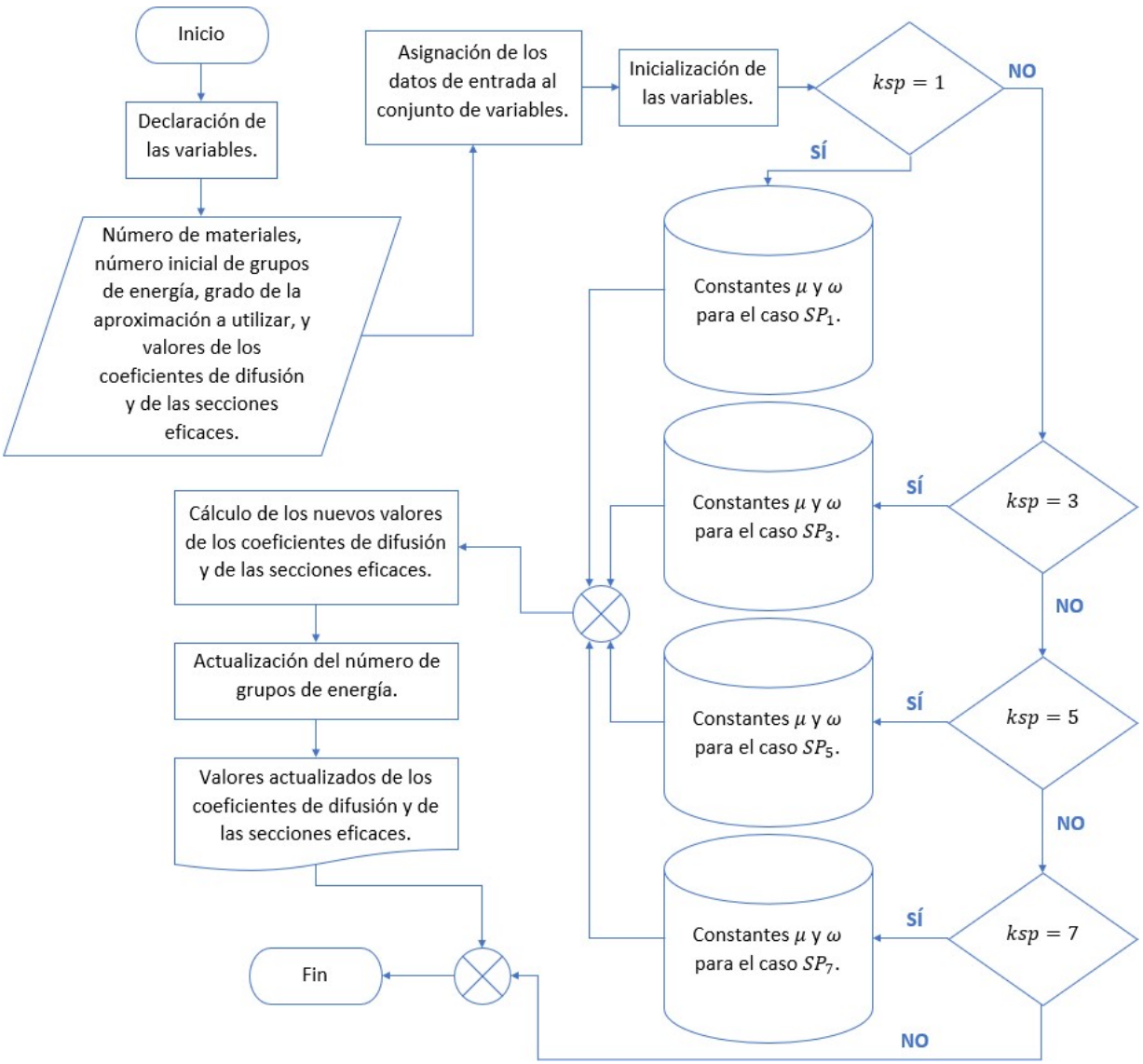


Figura 1. Diagrama de flujo del programa *spl_isotropic*

Múltiples estudios han confirmado que el nivel máximo de precisión de la aproximación SP_L se logra al ser $L = 5$ o $L = 7$ [13]. Adicionalmente, la implementación de diferentes niveles de discretización espacial persigue el objetivo de generar resultados más exactos. En consecuencia, se espera que la diferencia entre los valores de k_{eff} de aproximaciones sucesivas sea cada vez

menor al desplazarse de izquierda a derecha y de arriba hacia abajo en la lectura de los datos mostrados en la Tabla II. Se debe resaltar el hecho de que, utilizando a la diferencia mencionada como referencia, la ganancia más importante en términos de la mejora en la precisión numérica de los resultados generados, ocurre en el "salto" entre las aproximaciones SP_1 (el esquema de difusión, básicamente) y SP_3. Esto puede visualizarse con mayor claridad en la Figura 3, donde se muestra el comportamiento gráfico de algunos de los valores de k_{eff} seleccionados de la Tabla II.

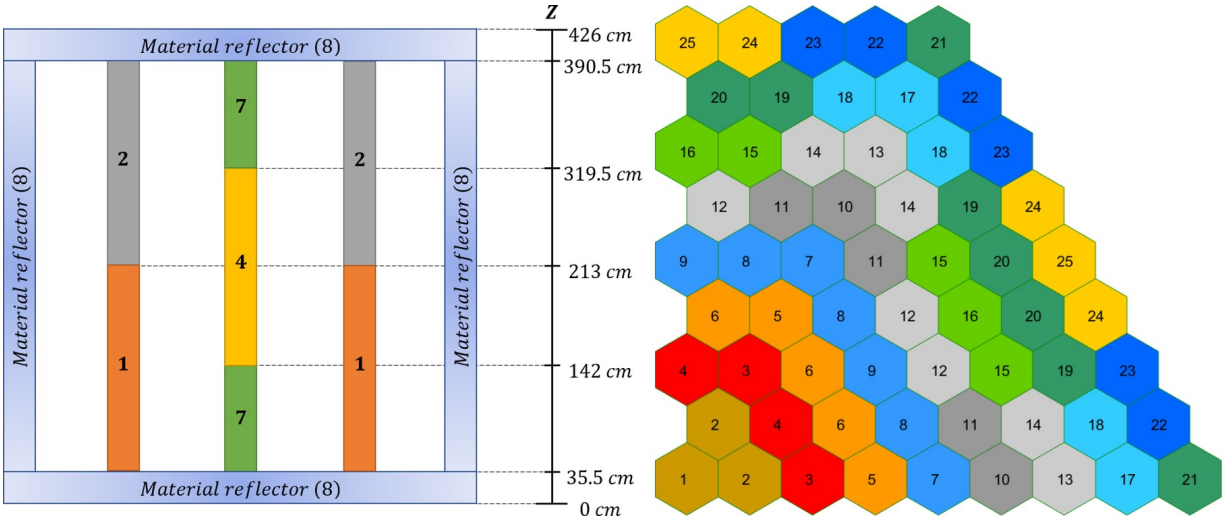


Figura 2. Distribución axial de los materiales que componen al reactor VVER-1000 (izquierda), y distribución radial de los ensambles del mismo reactor (derecha)

Tabla II. Valores de k_{eff} y diferencia, expresada en %, entre aproximaciones sucesivas resultantes del análisis del reactor VVER-1000 mediante el código AZNHEX utilizando la opción SP_L

Mallado radial	Mallado axial	SP_1	$\%\varepsilon_{13}$	SP_3	$\%\varepsilon_{35}$	SP_5	$\%\varepsilon_{57}$	SP_7
1 × 1	1	1.04929	0.3785	1.05326	0.1753	1.05511	0.1248	1.05379
	2	1.04916	0.3774	1.05312	0.1704	1.05492	0.1197	1.05365
	3	1.04913	0.3778	1.05309	0.1673	1.05485	0.1166	1.05362
	4	1.04912	0.3777	1.05308	0.1661	1.05483	0.1153	1.05361
2 × 2	1	1.04909	0.3687	1.05296	0.1460	1.05449	0.0930	1.05351
	2	1.04896	0.3678	1.05282	0.1410	1.05430	0.0876	1.05338
	3	1.04893	0.3679	1.05279	0.1382	1.05424	0.0847	1.05335
	4	1.04891	0.3680	1.05277	0.1370	1.05422	0.0834	1.05334
3 × 3	1	1.04904	0.3641	1.05286	0.1394	1.05433	0.0868	1.05341
	2	1.04891	0.3631	1.05272	0.1343	1.05413	0.0816	1.05327
	3	1.04887	0.3639	1.05269	0.1317	1.05408	0.0787	1.05325
	4	1.04887	0.3625	1.05267	0.1313	1.05405	0.0790	1.05322
4 × 4	1	1.04903	0.3618	1.05282	0.1371	1.05427	0.0850	1.05337

	2	1.04890	0.3608	1.05268	0.1318	1.05407	0.0795	1.05323
	3	1.04886	0.3604	1.05264	0.1300	1.05401	0.0779	1.05319
	4	1.04885	0.3628	1.05266	0.1244	1.05397	0.0782	1.05314

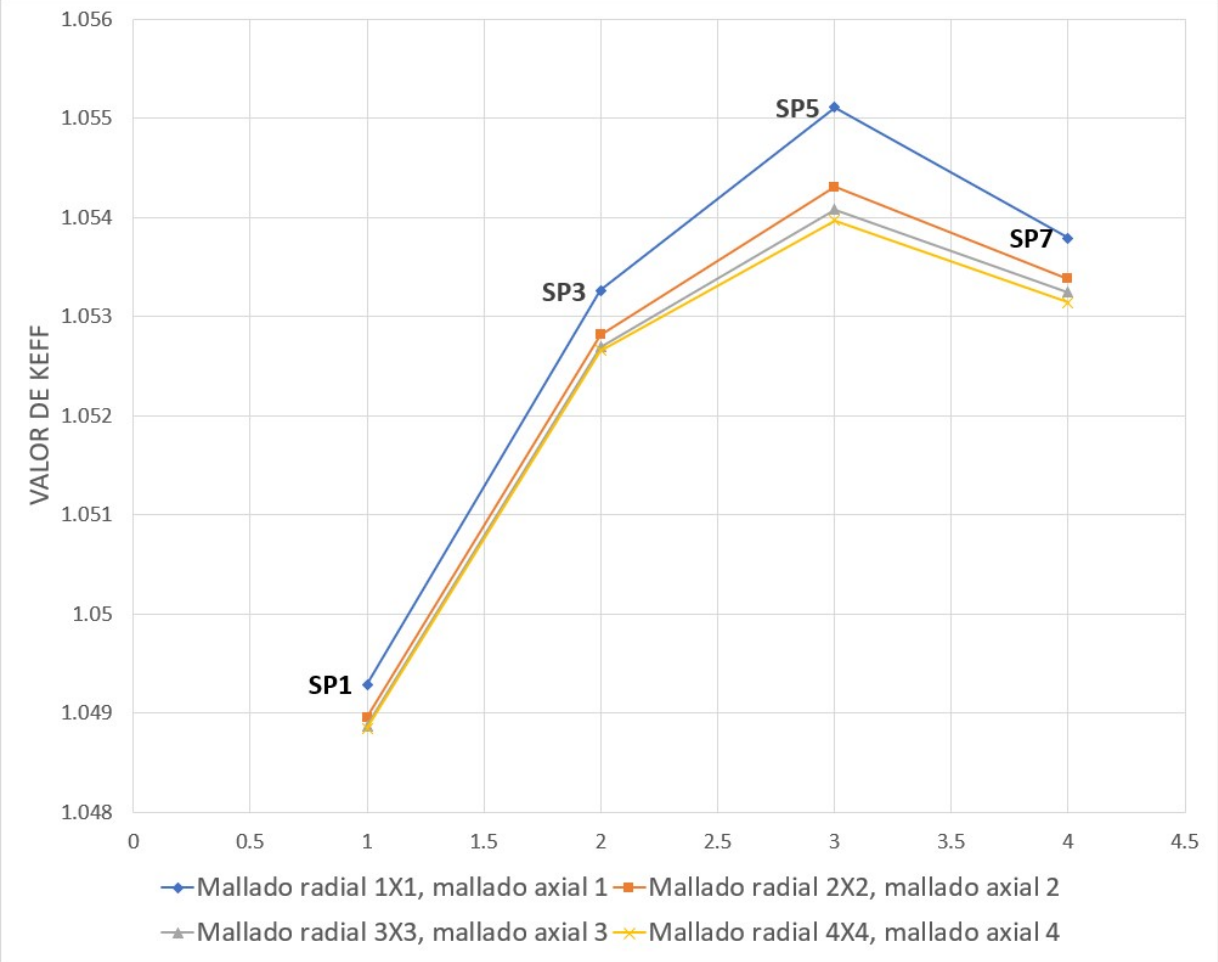


Figura 3. Comparación entre las variaciones de los valores de k_{eff} obtenidos del análisis del reactor VVER-1000 mediante la aproximación SP_L

Finalmente, los mapas que se muestran en la Figura 4 representan la diferencia, expresada también en %, entre las aproximaciones SP_1 y SP_3, SP_3 y SP_5, y SP_5 y SP_7, respectivamente, para los valores de potencia normalizada generada por ensamble del núcleo del reactor. En esta figura, la etiqueta **NoF** significa ***No Fuel***. El propósito de realizar dicha comparación es analizar el comportamiento de esta diferencia entre aproximaciones sucesivas, la cual, y de acuerdo con la información presentada previamente, debe disminuir gradualmente conforme el valor de L incrementa. Estos resultados han sido generados utilizando un mallado radial de 1×1 y un mallado axial de 1, con la misma diferencia máxima entre iteraciones sucesivas de 1.0×10^{-6}. De acuerdo con esta figura, nuevamente es posible apreciar que el mayor aumento en la precisión de los resultados generados, y que se refleja en una mayor diferencia entre los valores de potencia por ensamble, corresponde al salto entre las aproximaciones SP_1 y SP_3.

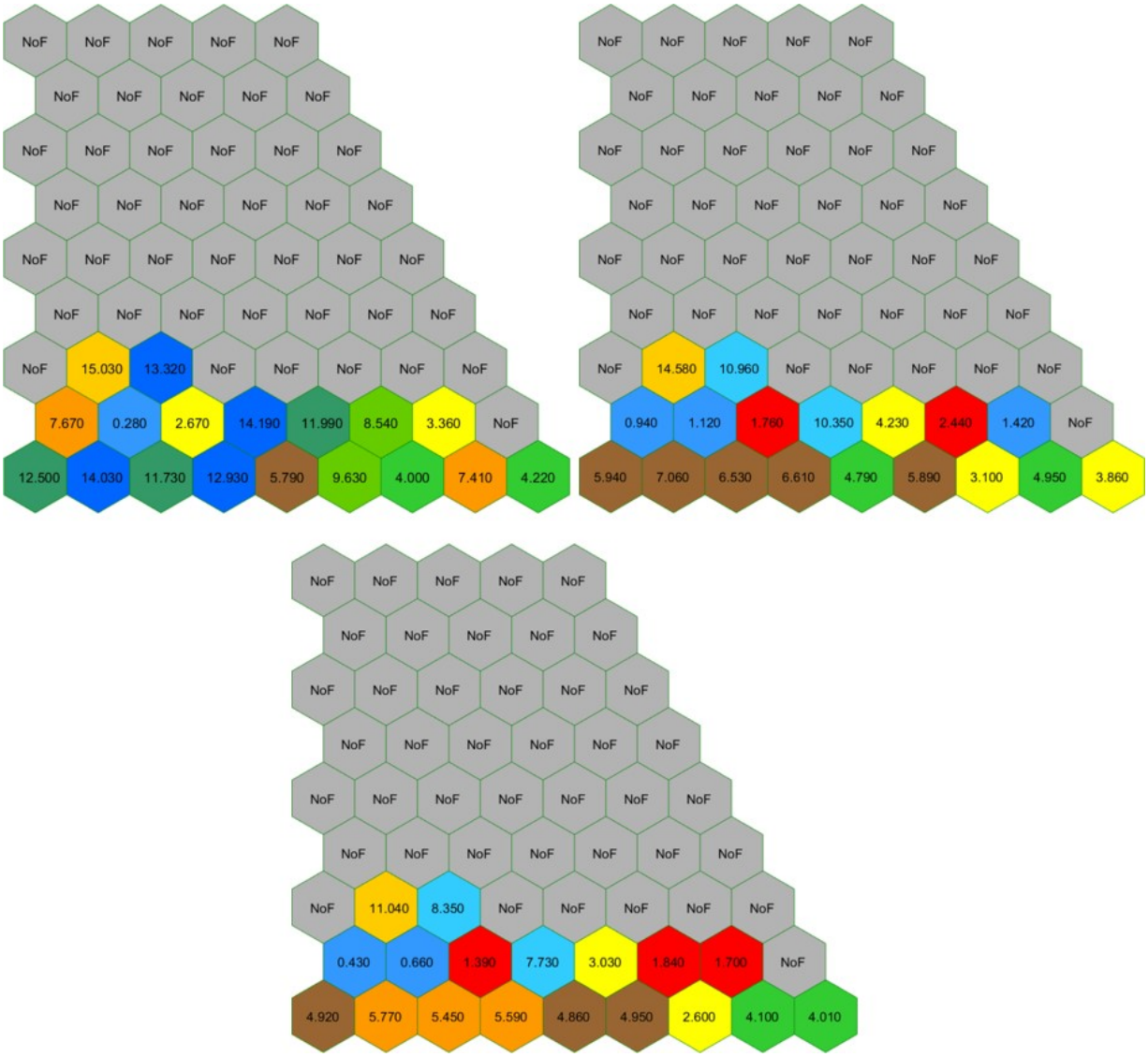


Figura 4. Diferencia, expresada en %, entre los valores de potencia radial normalizada, generada por ensamble, producidos mediante las aproximaciones SP_1 y SP_3 (superior izquierda), SP_3 y SP_5 (superior derecha), y SP_5 y SP_7 (inferior) para el reactor VVER-1000

4.2. Validación del Preprocesador *spl_isotropic*: Resolución del Modelo de un Reactor KNK

A diferencia del caso anteriormente expuesto, el siguiente problema benchmark ha sido utilizado no solo para verificar sino también para validar al preprocesador *spl_isotropic*. Dicho problema benchmark corresponde al llamado reactor KNK [14], un núcleo en dos dimensiones caracterizado por 4 grupos de energía, un total de 8 materiales diferentes y condiciones de frontera extrapolada. La referencia mencionada describe dos distintos escenarios para este

problema benchmark, siendo el primero de ellos con barras de control completamente insertadas, mientras que en el segundo escenario los elementos de control han sido extraídos del núcleo. El caso que se presenta aquí corresponde al primer escenario (KNK-CRI o KNK ***C****ontrol* ***R****ods* ***In***).

En la Figura 5 se presenta la distribución radial de los materiales que componen a este reactor. Así, los ensambles identificados con el número 1 corresponden a una aleación de acero y sodio, mientras que los números 2, 3 y 4 señalan a tres distintos tipos de reflectores. Finalmente, los ensambles identificados con los números 5 y 6 son aquellos que corresponden a dos diferentes tipos de *driver*, siendo el número 8 aquél que identifica a la *test zone* y el número 7 aquél que señala a los elementos de control. La información completa sobre este problema puede ser encontrada en la referencia correspondiente [14].

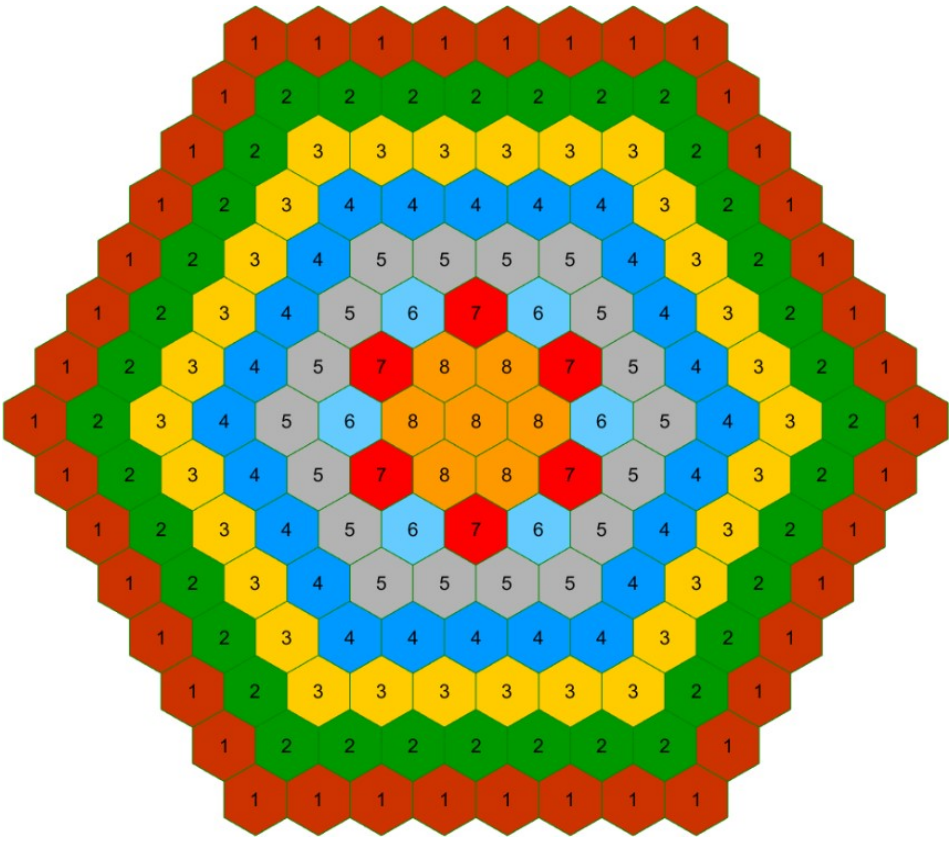


Figura 5. Distribución radial de los ensambles del reactor KNK. La numeración mostrada representa al tipo de material

De manera similar al caso anteriormente presentado, los resultados generados para este problema benchmark mediante la aplicación de la aproximación SP_L se enfocan primeramente en los valores de k_{eff}. Para este problema, sin embargo, y a diferencia del escenario anterior, las columnas entre dichos valores del factor de multiplicación muestran los resultados obtenidos mediante el método equivalente del código de transporte THG-SD (por sus siglas en inglés ***T****ransport in* ***H****exagonal* ***G****eometry using* ***S****trongly* ***D****iscontinuos nodal methods* [14]). Posteriormente, y con el fin de visualizar de una mejor manera la forma en la que estos valores de

k_{eff} evolucionan conforme el orden de ambos métodos incrementa (y la comparación misma entre ambas aproximaciones), se presenta la imagen que describe este comportamiento de manera gráfica. Así, la Tabla III muestra dichos valores de k_{eff}, generados mediante la misma diferencia máxima entre iteraciones sucesivas de 1.0×10^{-6} (por medio de AZNHEX-SP_L), mientras que los datos provistos por el código THG-SD han sido obtenidos utilizando el esquema nodal SD_3. Finalmente, la Figura 6 exhibe el comportamiento gráfico de estos datos.

Tabla III. Comparación entre los valores de k_{eff} resultantes del análisis del reactor KNK con barras de control insertadas (KNK-CRI), obtenidos mediante distintos ordenes de la opción SP_L incorporada en el código de difusión AZNHEX y la aproximación equivalente del código de transporte THG-SD

Mallado radial	SP_1	S_2, SD_3	SP_3	S_4, SD_3	SP_5	S_6, SD_3	SP_7	S_8, SD_3
1×1	0.97653	0.99249	1.00187	1.00006	1.00055	1.00164	1.00094	1.00016
2×2	0.97759	0.99847	1.00299	1.00050	1.00186	1.00717	1.00235	1.00736
4×4	0.97754	0.99965	1.00291	1.00741	1.00185	1.00806	1.00238	1.00821

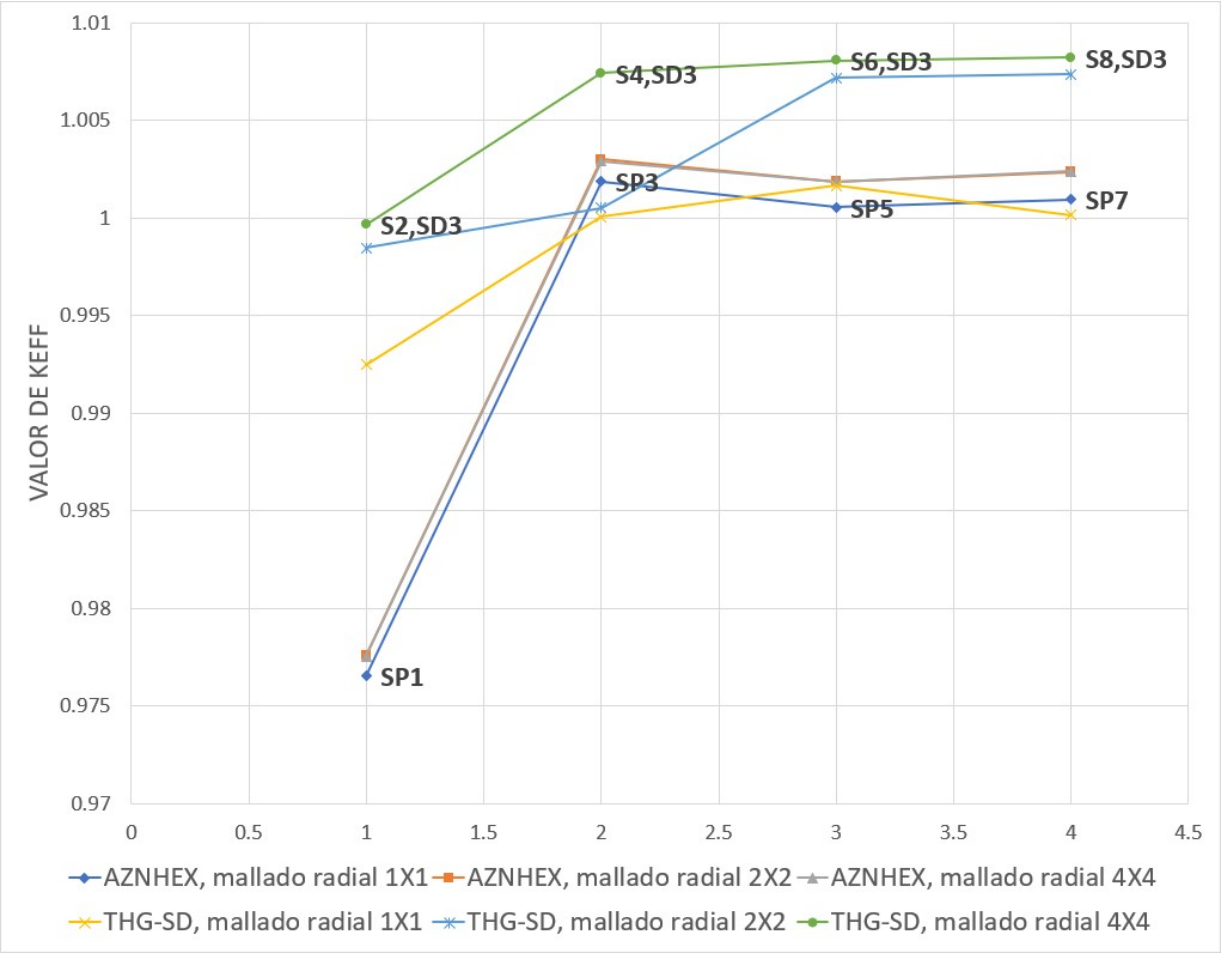


Figura 6. Comparación entre los valores de k_{eff} obtenidos del análisis del reactor KNK, con barras de control insertadas (KNK-CRI), mediante la aproximación SP_L incorporada en el código de difusión AZNHEX, y la aproximación equivalente del código de transporte THG-SD

En contraste con el Método de Armónicos Esféricos cuya precisión numérica incrementa conforme el valor de L aumenta (generando la respuesta analítica cuando $L \to \infty$), la aproximación SP_L no garantiza una mayor precisión en los resultados obtenidos al incrementar indefinidamente el valor del orden L. La validación teórica de la aproximación SP_L ha demostrado que este procedimiento es, en efecto, una aproximación asintótica al Método de Armónicos Esféricos [8] [15] [16]. Con el objetivo de resaltar este comportamiento asintótico, y para un mallado radial de 4×4, la Tabla IV presenta la diferencia, expresada en %, entre los valores de k_{eff} generados mediante los distintos órdenes de la aproximación SP_L tratados aquí y el valor de k_{eff} = 1.00821, generados mediante la aproximación S_8 del código THG-SD.

Tabla IV. Comparación entre los valores de k_{eff} resultantes del análisis del reactor KNK con barras de control insertadas (KNK-CRI), obtenidos mediante distintos ordenes de la opción SP_L incorporada en el código de difusión AZNHEX y la aproximación equivalente del código de transporte THG-SD

SP_L	keff AZNHEX	$\%\varepsilon(SP_L - S_8, SD_3)$
SP_1	0.97754	3.1375
SP_3	1.00291	0.5285
SP_5	1.00185	0.6348
SP_7	1.00238	0.5816

5. CONCLUSIONES

Si bien se puede considerar que el preprocesador *spl_isotropic* y su incorporación en el código AZNHEX se encuentran aún en una etapa temprana de desarrollo, los resultados obtenidos son satisfactorios y permiten concluir que se ha logrado la exitosa implementación de la aproximación SP_L en este código de difusión. El objetivo principal de la utilización del Método Simplificado de Armónicos Esféricos en la resolución de un determinado problema de difusión es proveer de un "punto intermedio" entre los resultados más precisos generados por el más demandante esquema de transporte, y los datos obtenidos del esquema de difusión menos demandante en comparación, aunque carentes de la exactitud numérica que caracteriza a los métodos de transporte. Los dos problemas benchmark presentados en este trabajo han permitido verificar el correcto desempeño del preprocesador *spl_isotropic*, mientras que uno de dichos problemas también ha sido de utilidad para validar este programa independiente el cual, gracias a su diseño, permite su fácil implementación en cualquier otro código de difusión. De cualquier manera, existe la posibilidad de expandir las capacidades del preprocesador *spl_isotropic* al involucrar las condiciones de frontera y de interfaz requeridas en específico por cada orden de la aproximación SP_L, así como también incluir la capacidad de realizar cálculos en medios anisotrópicos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores del presente trabajo agradecen el apoyo financiero del Proyecto Estratégico Nacional No. 212602 que forma parte del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética SENER-CONACYT. El primer autor agradece al CONACYT el apoyo económico ofrecido durante sus estudios de maestría, y agradece también el apoyo y dedicación de los directores del presente proyecto.

REFERENCIAS

[1] E. del Valle Gallegos, R. L. Solis, L. A. Ramírez, A. M. G. Torres, and F. P. Espel. "Verification of the multi-group code AZNHEX using the OECD/NEA UAM Sodium Fast Reactor Benchmark." *Annals of Nuclear Energy*, **114**, pp. 592–602 (2018).
[2] A. M. Gómez Torres, E. del Valle Gallegos, L. Arriaga Ramírez, R. López Solis, F. Puente Espel, E. Fridman, and S. Kliem. "Verification of the neutron diffusion code AZNHEX by means of the Serpent-DYN3D and Serpent-PARCS solution of the OECD/NEA SFR Benchmark." In *International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17)*, IAEA-CN245-397, pp. 1–10 (2017).
[3] J. Galicia-Aragón, J. Francois Lacouture, G. E. Bastida Ortiz, and E. del Valle Gallegos. "Verificación del código AZNHEX v.1.4 con MCNP6 para diferentes casos de referencia." In *XXVIII Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana - LAS/ANS Symposium*, pp. 1–15 (2017).
[4] A. M. Gómez Torres, F. Puente Espel, E. del Valle Gallegos, J. L. Francois Lacouture, C. Martin del Campo, and G. Espinosa Paredes. "Mexican platform for analysis and design of nuclear reactors." In *Proceedings of the International Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP*. Nice, France (2015).
[5] E. M. Gelbard. Technical Report WAPD-BT-20, Bettis Atomic Power Laboratory (1960).
[6] E. M. Gelbard. Technical Report WAPD-TM-294, Bettis Atomic Power Laboratory (1962).
[7] E. M. Gelbard. "Spherical harmonics methods: P_L and double-P_L approximations." In D. O. H. Greenspan, C. N. Kelber, editor, *Computing Methods in Reactor Physics*. Gordon and Breach Science Publishers, New York (1968).
[8] J. M. M. E. W. Larsen, J. E. Morel. "Asymptotic derivation of the simplified P_N equations." In *Proceedings of the Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications*, (M&C + SNA '93). Karlsruhe, Germany (1993).
[9] S. Durigen. *Neutron Transport in Hexagonal Reactor Cores Modeled by Trigonal-Geometry Diffusion and Simplified P_3 Nodal Methods*. Ph.D. thesis, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Department of Mechanical Engineering (2013).
[10] S. G. G. I. Bell. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company (1970).
[11] E. del Valle Gallegos. *Métodos nodales en transporte y difusión de partículas*. Ph.D. thesis, Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Departamento de Física (1998).
[12] J. E. Estrada. "Métodos nodales aplicados a la ecuación de difusión de neutrones dependiente del tiempo en geometría hexagonal -Z." (2015).
[13] R. G. McClarren. "Theoretical aspects of the simplified *Pn* equations." *Transport Theory and Statistical Physics*, **39**, pp. 73–109 (2011).
[14] C. A. M. Rodríguez. "Solución a la ecuación de transporte en geometría hexagonal usando la

aproximación S_N para varias condiciones de simetría." (2007).
[15] E. W. Larsen. "Asymptotic diffusion and simplified P_N approximations for diffusive and deep penetration problems. Part 1: Theory." Transport Theory and Statistical Physics, **39**, pp. 110–163 (2011).
[16] G. C. Pomraning. "Asymptotic and variational derivations of the simplified P_N equations." *Annals of Nuclear Energy*, **20**, pp. 623–637 (1993).

Módulo de Transporte Basado en Ordenadas Discretas para el código AZNHEX

Alejandro Campos Muñoz*, Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional - Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9 Unidad Profesional "Adolfo López Mateos"
Col. San Pedro Zacatenco, Alc. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C.P. 07738, México.
acamposm1204@gmail.com; evalle@ipn.mx

Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México - Toluca, La Marquesa, Estado de México, C.P. 52750, México.
armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

Con el innegable aumento en las emisiones de gases de efecto invernadero por parte del sector energético la generación de electricidad por medio de fuentes limpias es imperativo. Como parte del desarrollo de la tecnología nuclear los reactores cuyos ensambles tengan geometría con sección transversal de corte hexagonal, por ejemplo, los reactores SFR, han tomado gran importancia y para analizarlos es necesario el desarrollo de herramientas computacionales fiables. En este trabajo se desarrolló un módulo de transporte basado en el método de Ordenadas Discretas para el código AZNHEX de la Plataforma AZTLAN. El módulo de transporte en estado estacionario se verificó con uno de los problemas propuestos por Takeda e Ikeda, el reactor nuclear KNK. El problema consta de tres casos: 1) con barras de control totalmente extraídas, 2) barras de control insertadas a la mitad y 3) barras de control completamente insertadas. Los valores pedidos son el factor de multiplicación efectivo, valor de barras de control y flujos promedio por región. Los resultados obtenidos con la aproximación S8 fueron comparados con el código Monte Carlo MOCA, los valores de *keff* para el caso 1 difieren en 30 pcm, para el caso 2 difieren en 173 pcm y para el caso 3 difieren en 497 pcm; el valor de barras de control tiene una diferencia relativa de 1170 pcm. Los flujos promedio por región presentan una diferencia relativa no mayor al 10%. Con los resultados obtenidos se puede verificar de forma satisfactoria el módulo AZNHEXT y alienta a seguir con el desarrollo de esta herramienta con nuevos problemas para modelar y capacidades de cálculo.

1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la energía nuclear en el mundo está actualmente en un punto crítico debido al cambio climático, los reactores nucleares de generación de potencia son la ´única fuente de energía limpia capaz de suministrar la carga base de una población. Como parte del desarrollo de la tecnología de reactores nucleares se han retomado tecnologías que han sido exploradas en el pasado como la de reactores rápidos refrigerados por sodio (SFR) o nuevos conceptos como los reactores de sales fundidas (MSR). Con esto en mente el Foro Internacional de la Generación IV (GIF) es un

esfuerzo de cooperación internacional para llevar a cabo la investigación y el desarrollo necesario para establecer la factibilidad y capacidades de desempeño de la siguiente generación de sistemas nucleares de potencia. Las áreas de sustentabilidad, economía, seguridad y confiabilidad, no proliferación y protección radiológica son abordadas en los objetivos que se plantean para los sistemas nucleares de Generación IV.

Algunos de estos diseños tienen la característica de que están conformados por ensambles de sección transversal de corte hexagonal, como el reactor SFR, por lo que es necesario desarrollar y mejorar las herramientas dedicadas al análisis de este tipo de sistemas.

El problema central de la física de reactores nucleares es determinar la distribución de neutrones dentro del reactor. Esta distribución de neutrones afecta la tasa a la cual ocurren reacciones dentro del núcleo. Para calcular la distribución de neutrones debemos resolver la ecuación de transporte de neutrones. La solución de la ecuación de transporte de neutrones en multigrupos, Ordenadas Discretas y en estado estacionario para núcleos formados por ensambles de sección transversal de corte hexagonal ha sido resuelta de varias maneras, desde aplicar métodos de diferencias finitas hasta aplicar esquemas nodales tipo elemento finito. El manejo de la geometría de prisma hexagonal también se ha abordado de distintas maneras como dividir el hexágono en ti ángulos o en rombos por medio de una transformación transfinita de Gordon - Hall.

En este trabajo se desarrolló un módulo computacional de transporte basado en la aproximación de Ordenadas Discretas para código AZNHEX de la Plataforma AZTLAN [1,2]. El módulo se llama AZNHEXT por el código al cual se integra y la ``T´´ de transporte. Las capacidades del código son la simulación de núcleos con geometría hexagonal-Z en 2D y 3D en estado estacionario.

En las secciones posteriores se abordan los métodos de solución utilizados en el código, se describe el problema benchmark seleccionando para verificar los cálculos, se muestran y discuten los resultados numéricos y finalmente se presentan las conclusiones.

2. MÉTODOS DE SOLUCIÓN UTILIZADOS EN AZNHEXT

Como ha sido mencionado, el módulo computacional AZNHEXT es un código de transporte 3D en estado estacionario.

El núcleo del reactor está compuesto por un conjunto de ensambles de corte transversal hexagonal. Para analizar este tipo de reactores, la estrategia de solución usual es crear una malla con celdas cuya forma son prismas hexagonales de altura $\Delta z = z_{k+1} - z_k$ y lado R. En este trabajo se da un tratamiento adicional a estas celdas para poder resolver la ecuación de transporte utilizando los métodos numéricos desarrollados para geometrías cartesianas, este procedimiento será explicado en secciones posteriores.

2.1. Método de Ordenadas Discretas en Geometría Cartesiana

Partiendo de la ecuación de transporte de neutrones en geometría cartesiana con las características antes mencionadas (Ec. (1)) [3], se discretizará la variable angular aplicando el método de Ordenadas Discretas, también llamado aproximación S_N.

$$\begin{aligned}
&\mu\frac{\partial}{\partial x}\psi_g(x,y,z,\theta,\varphi)+\eta\frac{\partial}{\partial y}\psi_g(x,y,z,\theta,\varphi)+\xi\frac{\partial}{\partial z}\psi_g(x,y,z,\theta,\varphi)\\
&+\Sigma_{tg}(x,y,z)\psi_g(x,y,z,\theta,\varphi)=\frac{1}{4\pi}\sum_{g'=1}^{G}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\Sigma_{sg'\to g}(x,y,z)\psi_{g'}(x,y,z,\theta',\varphi')d\varphi' d\theta'\\
&+\frac{1}{4\pi k}\chi_{pg}(x,y,z)\sum_{g'=1}^{G}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\nu\Sigma_{fg'}(x,y,z)\psi_{g'}(x,y,z,\theta',\varphi')d\varphi' d\theta';\quad g=1,\ldots,G
\end{aligned}\tag{1}$$

El método de Ordenadas Discretas consiste en representar, con un conjunto de direcciones angulares el dominio de la variable angular en una malla de puntos discretos, y luego aproximar la integral sobre el ángulo con la suma de los productos entre las funciones de peso evaluadas en las diferentes direcciones angulares y la función evaluada en cada punto de la malla. La expresión matemática del método de Ordenadas Discretas está dada por la Ec. (2),

$$\frac{1}{4\pi}\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi}\psi(x,y,z,\theta,\varphi,E)d\theta d\varphi\approx\sum_{\ell=1}^{M}\omega_\ell\psi(x,y,z,\theta_\ell,\varphi_\ell,E)\tag{2}$$

donde, $\ell=1,\ldots,M$ es el número de direcciones angulares θ_ℓ, φ_ℓ y ω_ℓ representa sus respectivos pesos.

Aplicando la aproximación SN a la ecuación de transporte en multigrupos y considerando un medio isotrópico obtenemos la Ec. (3), esta ecuación es conocida como la ecuación de transporte en multigrupos en Ordenadas Discretas.

$$\begin{aligned}
&\mu_\ell\frac{\partial}{\partial x}\psi_g(x,y,z,\mu_\ell,\eta_\ell,\xi_\ell)+\eta_\ell\frac{\partial}{\partial y}\psi_g(x,y,z,\mu_\ell,\eta_\ell,\xi_\ell)+\xi_\ell\frac{\partial}{\partial z}\psi_g(x,y,z,\mu_\ell,\eta_\ell,\xi_\ell)\\
&+\Sigma_{tg}(x,y,z)\psi_g(x,y,z,\mu_\ell,\eta_\ell,\xi_\ell)=\sum_{g'=1}^{G}\sum_{\ell'=1}^{M}\omega_{\ell'}\Sigma_{sg'\to g}(x,y,z)\psi_{g'}(x,y,z,\mu_{\ell'},\eta_{\ell'},\xi_{\ell'})\\
&+\frac{1}{k}\chi_{pg}(x,y,z)\sum_{g'=1}^{G}\sum_{\ell'=1}^{M}\omega_{\ell'}\nu\Sigma_{fg'}(x,y,z)\psi_{g'}(x,y,z,\mu_{\ell'},\eta_{\ell'},\xi_{\ell'});\\
&g=1,\ldots,G;\ \ell=1,\ldots,M
\end{aligned}\tag{3}$$

2.2. Consideraciones para la Aproximación S_N en Geometría Hexagonal-Z

Un prisma hexagonal puede ser dividido de diferentes formas, una de ellas es dividirlo en tres prismas romboidales. En la Figura 1 los prismas romboidales se denotan por A, B y C. Para poder aplicar los métodos numéricos desarrollados en geometrías cartesianas en una geometría

hexagonal-Z debe realizarse una transformación, que lleva un prisma romboidal a una celda rectangular unitaria, conocida como transformación transfinita de Gordon-Hall [4,5].

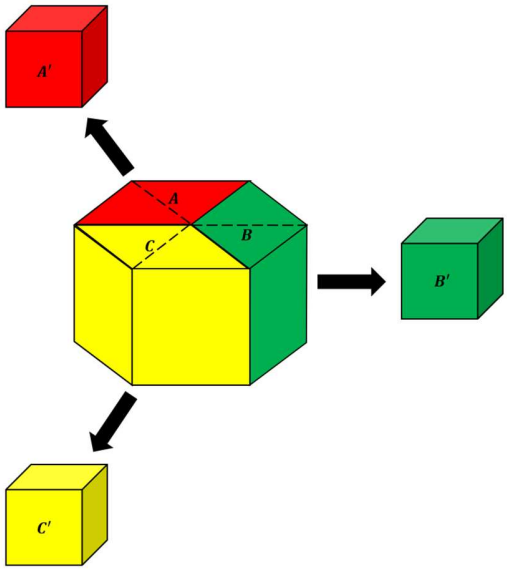


Figura 1. División de una celda hexagonal y transformación en celdas unitarias

Para simplificar e ilustrar de forma más sencilla el método, partamos de la ecuación de transporte monoenergética en Ordenadas Discretas (Ec. (4)),

$$\mu_k \frac{\partial \psi_k}{\partial x} + \nu_k \frac{\partial \psi_k}{\partial y} + \gamma_k \frac{\partial \psi_k}{\partial z} + \Sigma_t \psi_k = \Sigma_s \sum_{\ell=1}^{M} \omega_\ell \psi_\ell + S_k (\equiv Q_k);\ (x, y, z) \in V,\ 1 \leq k \leq M \quad (4)$$

donde, ψ_k representa el flujo angular del *k-ésimo* rayo de la aproximación S_N, con coeficientes angulares μ_k, ν_k y γ_k, y los coeficientes ω_ℓ son los pesos asociados a las direcciones angulares (μ_k, ν_k y γ_k).

Tomando como referencia el prisma romboidal A de la Figura 1 en un sistema coordenado Cartesiano, la transformación de Gordon-Hall que mapea el prisma romboidal a una celda rectangular unitaria A' (ver Figura 1) en el sistema $(\xi, \eta, \omega) \in \bar{V} = [-1, +1] \times [-1, +1] \times [-1, +1]$ está dada por la Ec. (5),

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta, \omega) &= \frac{\sqrt{3}}{4} R(\xi - 1)\,, \\ y(\xi, \eta, \omega) &= \frac{R}{2}\left[\eta + \frac{1}{2}(\xi + 1)\right]\,, \\ z(\xi, \eta, \omega) &= \frac{\Delta z \cdot \omega + (z_{k+1} + z_k)}{2} \end{aligned} \quad (5)$$

donde, R es la longitud de un lado del hexágono.

Aplicando la Ec. (5) a la Ec. (4), se obtiene la Ec. (6) [6],

$$\hat{\mu}_k \frac{\partial \psi_k}{\partial \xi} + \hat{\nu}_k \frac{\partial \psi_k}{\partial \eta} + \hat{\gamma}_k \frac{\partial \psi_k}{\partial \omega} + \hat{\Sigma}_t \psi_k = \hat{Q}_k;\ (\xi, \eta, \omega) \in \bar{V},\ 1 \leq k \leq M \tag{6}$$

donde,

$$\begin{gathered} \hat{\mu}_k = \mu_k, \quad \hat{\nu}_k = \frac{\sqrt{3}\nu_k - \mu_k}{2}, \quad \hat{\gamma}_k = \frac{\sqrt{3}R}{2 \cdot \Delta z}\gamma_k\ , \\ \hat{\Sigma}_t = \frac{\sqrt{3}R}{4}\Sigma_t, \quad \text{and} \quad \hat{Q}_k = \frac{\sqrt{3}R}{4}Q_k. \end{gathered} \tag{7}$$

2.3. Discretización Espacial Aplicando el Método Nodal *RTN-Discontinuo* de orden cero

Para resolver numéricamente la ecuación de transporte aplicando en método nodal *Raviart-Thomas-Nédélec-Discontinuo (RTN-Discontinuo)* de orden cero es necesario discretizar el domino de solución. La discretización usada es una malla definida por las interfaces de las celdas unitarias obtenidas con la transformación de Gordon-Hall aplicada a cada uno de los prismas romboidales que conforman el dominio del núcleo del reactor.

Tomando la ecuación de transporte en el espacio reducido $\bar{V} = [-1, +1] \times [-1, +1] \times [-1, +1]$ Ec. (8) [3].

$$\frac{2\mu}{\Delta x}\frac{\partial \psi}{\partial \xi} + \frac{2\nu}{\Delta y}\frac{\partial \psi}{\partial \eta} + \frac{2\gamma}{\Delta z}\frac{\partial \psi}{\partial \omega} + \Sigma_t \psi = S \tag{8}$$

La función $\psi(\xi, \eta, \gamma)$ puede aproximarse en términos de las funciones base del método nodal, obteniendo la Ec. (9) [7],

$$\psi \sim \psi_h = \psi_R^{00} u_R^{00} + \psi_F^{00} u_F^{00} + \psi_T^{00} u_T^{00} + \psi_C^{000} u_C^{000} \tag{9}$$

Donde, las funciones base u_C^{000} y $u_i^{00}; i = R, F, T$ están dadas en la Ec. (10),

$$\begin{aligned} u_R^{00} &= P_{100} \\ u_F^{00} &= P_{010} \\ u_T^{00} &= P_{001} \\ u_C^{000} &= P_{000} - P_{100} - P_{010} - P_{001} \end{aligned} \tag{10}$$

Donde, $P_{ijk} = P_i(\xi)P_j(\eta)P_k(\omega);\ P_i(\xi)$ es el polinomio de Legendre de grado *i* para $\xi \in [-1, +1]$.

Tenemos que el momento de Legendre *lmn* asociado a una función ψ_h se calcula con la Ec. (11),

$$\psi^{lmn} = \frac{(2l+1)(2m+1)(2n+1)}{8} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} \int_{-1}^{+1} P_{lmn} \psi_h d\xi d\eta d\omega. \tag{11}$$

Calculando los momentos (000), (100), (010) y (001) asociados a la Ec. (8) se llega al sistema de ecuaciones (12), cuyas incógnitas son los flujos angulares $\psi_R^{00}, \psi_F^{00}, \psi_T^{00}$ y ψ_C^{000}, las otras variables del flujo angular son conocidas por condiciones de frontera o valores de otros nodos [8].

$$\begin{bmatrix} \frac{3\mu}{\Delta x} + \frac{\nu}{\Delta y} + \frac{\gamma}{\Delta z} + \Sigma_t & 0 & 0 & -\left(\frac{6\mu}{\Delta x} + \frac{\nu}{\Delta y} + \frac{\gamma}{\Delta z}\right) \\ 0 & \frac{\mu}{\Delta x} + \frac{3\nu}{\Delta y} + \frac{\gamma}{\Delta z} + \Sigma_t & 0 & -\left(\frac{\mu}{\Delta x} + \frac{6\nu}{\Delta y} + \frac{\gamma}{\Delta z}\right) \\ 0 & 0 & \frac{\mu}{\Delta x} + \frac{\nu}{\Delta y} + \frac{3\gamma}{\Delta z} + \Sigma_t & -\left(\frac{\mu}{\Delta x} + \frac{\nu}{\Delta y} + \frac{6\gamma}{\Delta z}\right) \\ \frac{\mu}{\Delta x} & \frac{\nu}{\Delta y} & \frac{\gamma}{\Delta z} & \Sigma_t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_R^{00} \\ \psi_F^{00} \\ \psi_T^{00} \\ \psi_C^{000} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3\mu}{\Delta x}\psi_L^{00} + \frac{\nu}{\Delta y}\psi_N^{10} + \frac{\gamma}{\Delta z}\psi_B^{10} + S_C^{100} \\ \frac{\mu}{\Delta x}\psi_L^{10} - \frac{3\nu}{\Delta y}\psi_N^{00} + \frac{\gamma}{\Delta z}\psi_B^{01} + S_C^{010} \\ \frac{\mu}{\Delta x}\psi_L^{01} + \frac{\nu}{\Delta y}\psi_N^{01} - \frac{3\gamma}{\Delta z}\psi_B^{00} + S_C^{001} \\ \frac{\mu}{\Delta x}\psi_L^{00} + \frac{\nu}{\Delta y}\psi_N^{00} + \frac{\gamma}{\Delta z}\psi_B^{00} + S_C^{000} \end{bmatrix} \tag{12}$$

El sistema de ecuaciones (12) corresponde a la solución del estado estacionario de la ecuación de transporte, es este sistema el que resuelve el módulo AZNHEXT, para cada dirección angular, grupo de energía y celda nodal.

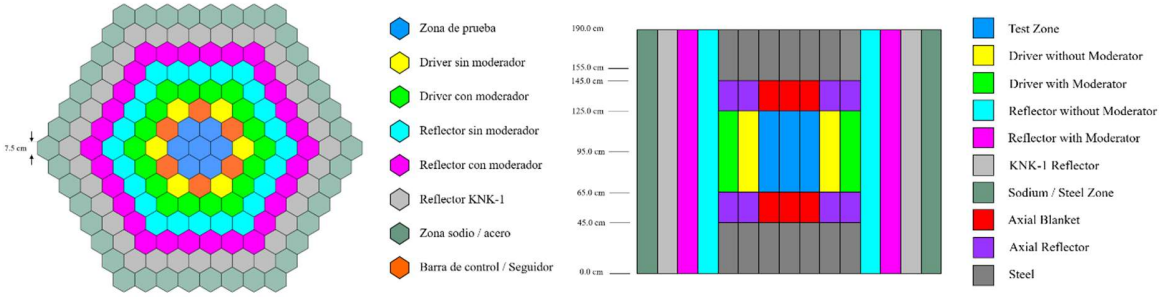
3. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA BENCHMARK KNK

Para verificar los resultados numéricos obtenidos con el módulo AZNHEXT se escogió un problema tridimensional descrito por Takeda e Ikeda [9]. El modelo tridimensional KNK es un modelo ligeramente simplificado del reactor nuclear KNK-II, un reactor tipo SFR compacto (58 *MWt*) antiguamente situado en KfK, Alemania.

La configuración geométrica y de materiales tanto radial como axial se muestra en la Figura 2 (a) y (b), respectivamente. La configuración radial del núcleo consiste en una zona central pequeña de siete subensambles, rodeados por dos anillos de elementos driver y tres anillos de elementos reflectores de diferente composición. Un anillo externo representa una mezcla de sodio-acero, y seis barras de control (CR) están colocadas en el anillo adyacente a la zona de prueba.

Es un problema de cuatro grupos de energía, las secciones eficaces son proporcionadas en el documento [9]. Se aplica condición de frontera de vacío en las fronteras externas del reactor.

La longitud activa del núcleo es 60 cm, con un cobertor axial de 20 cm y un reflector axial de 45 cm, la longitud del lado del hexágono del subensamble es de 7.5 cm.



(a) Radial (b) Axial

Figura 2. Configuración geométrica radial y axial de subensambles y de materiales respectivamente del modelo KNK

Tres casos para resolver han sido definidos en este problema: con las barras de control completamente extraídas (caso 1), con las barras de control insertadas hasta la mitad de la longitud activa (caso 2) y con las barras de control insertadas completamente en la longitud activa (caso 3), ver Figura 3. Para los tres casos se pide calcular el factor de multiplicación efectivo (*keff*), el valor de barras de control (*CRW*) y el flujo promedio por región.

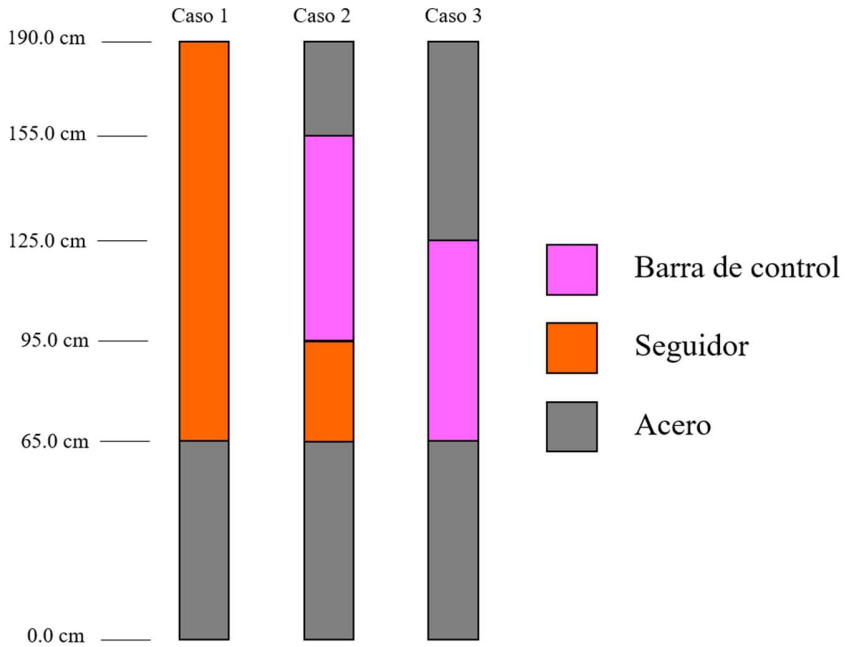


Figura 2. Posiciones de las barras de control de los tres casos del modelo KNK

4. RESULTADOS

Los resultados numéricos obtenidos con el módulo AZNHEXT fueron verificados y comparados contra diferentes códigos que utilizan distintos métodos de solución. Los códigos contra los que se comparó son [9]:

• MOCA: código Monte Carlo.
• PARCS 3.1: código de difusión con aproximación SP_3
• HEX-Z1: código de transporte con Ordenadas Discretas.
• HEXNOD: código nodal de transporte.

La Tabla I muestra los resultados del factor de multiplicación efectivo y el valor de barras de control para los tres casos. Las simulaciones con AZNHEXT se realizaron con tres aproximaciones S_2, S_4 y S_8. Entre paréntesis, debajo de los valores de AZNHEXT, se muestra la diferencia relativa con respecto al código MOCA.

Tabla I. Resultados de *keff* y *CRW*

	caso 1	caso 2	caso 3	CRW**
MOCA (método Monte Carlo)	1.09515 ± 0.000395	0.98340 ± 0.000394	0.88001 ± 0.000375	2.232E-01 ± 0.0059E-01
PARCS 3.1 (Difusión método SP_3)	1.07435	0.95893	0.85193	2.43E-01
HEX-Z1 (método S_N)				
S_4	1.08438	0.98214	0.88132	2.125E-01
S_8	1.08436	0.98145	0.88179	2.119E-01
HEXNOD NT (método nodal)	1.08890	0.97830	0.87484	2.2470E-01
AZNHEXT (método nodal S_N)				
S_2	1.08873 (586 pcm)*	0.97151 (1209 pcm)	0.86508 (1696 pcm)	2.3746E-01 (6388 pcm)
S_4	1.09504 (10 pcm)	0.98065 (279 pcm)	0.87437 (640 pcm)	2.3047E-01 (3257 pcm)
S_8	1.09548 (30 pcm)	0.98169 (173 pcm)	0.87563 (497 pcm)	2.2919E-01 (1170 pcm)

$$* \; diferencia\ relativa = \frac{|MOCA - AZNHEXT|}{MOCA}$$

$$** \; CRW = \frac{k_{eff}(caso\,1) - k_{eff}(caso\,3)}{k_{eff}(caso\,1) \cdot k_{eff}(caso\,3)}$$

Analizando los valores de *keff* obtenidos para el caso 1 con AZNHEXT S_2 el valor está cerca del margen de aceptación de 500 pcm. Al pasar a una aproximación S_4 la diferencia se reduce a tan sólo 10 pcm y con una aproximación S_8 la diferencia es de 30 pcm. Luego, el caso 2 con AZNHEXT S_2 el valor difiere por más 1000 pcm, sin embargo, al aumentar la aproximación a S_4 y S_8 el error relativo disminuye considerablemente siendo la mejor diferencia de 173 pcm. Los valores del caso

3 tienen un comportamiento similar al caso 2, con AZNHEXT S_2 la diferencia es muy grande, de 1696 pcm, la aproximación S_4 reduce el error 1056 pcm y con la aproximación S_8 la diferencia es de 497 pcm.

Los valores de CRW con las tres aproximaciones no parecen ser tan buenos pues incluso con AZNHEXT S_8 la diferencia es de 1170 pcm, pero cabe señalar que los resultados mejoran reduciendo más o menos la diferencia a la mitad con cada aproximación. También es pertinente mencionar que los valores obtenidos se encuentran entre PARCS 3.1 y MOCA, lo cual indica un buen comportamiento del código.

Tabla II. Flujo escalar promedio por región caso 1: CR totalmente

	Zona de prueba	Cobertor axial	Driver con moderador	CRP
MOCA (método Monte Carlo)				
g_1	1.3499E-04	3.5243E-05	6.3396E-05	5.2497E-05
g_2	1.0856E-04	4.9804E-05	4.9993E-05	5.0666E-05
g_3	3.0770E-05	2.6203E-05	2.8215E-05	2.2637E-05
g_4	3.8749E-06	1.2749E-05	1.4486E-05	1.0366E-05
AZNHEXT S_8 (método nodal S_N)				
g_1	1.3554E-04 (0.40%)*	3.5133E-05 (0.31%)	6.5184E-05 (2.82%)	4.7433E-05 (9.64%)
g_2	1.0904E-04 (0.44%)	4.9953E-05 (0.29%)	5.0089E-05 (0.19%)	4.7645E-05 (5.96%)
g_3	3.0895E-05 (0.40%)	2.6210E-05 (0.02%)	2.8195E-05 (0.07%)	2.2074E-05 (2.48%)
g_4	3.8016E-06 (1.89%)	1.2007E-05 (5.82%)	1.4396E-05 (0.62%)	1.1101E-05 (7.09%)

$$* \, diferencia\ relativa = \frac{|MOCA - AZNHEXT|}{MOCA} \times 100$$

Las Tablas II - IV muestran los resultados de los flujos promedio en cada grupo de energía por región para los tres casos simulados. Las regiones consideradas son:

• Zona de prueba.
• Cobertor axial.
• Driver con moderador.
• Barras de control (CR) y/o posición de barras de control (CRP).

Al igual que en los valores del factor de multiplicación efectivo y del valor de barras de control, los flujos calculados con AZNHEXT S_8 fueron comparados contra su respectivo valor calculado con el código MOCA, la diferencia relativa se muestra entre paréntesis debajo de cada valor.

Tabla III. Flujo escalar promedio por región caso 2: CR insertadas a la mitad

	Zona de prueba	Cobertor axial	Driver con moderador	CRP	CR
MOCA (método Monte Carlo)					
g_1	1.4695E-04	3.7122E-05	7.0291E-05	1.1866E-04	4.4354E-05
g_2	1.1251E-04	4.8758E-05	5.1347E-05	1.0031E-04	3.5773E-05
g_3	2.6560E-05	2.2353E-05	2.7720E-05	3.6997E-05	7.7894E-06
g_4	2.4518E-06	8.6671E-06	1.3952E-05	1.1076E-05	4.8143E-07
AZNHEXT S_8 (método nodal S_N)					
g_1	1.5000E-04 (2.07%)*	3.6906E-05 (0.58%)	7.0295E-05 (0.005%)	1.2041E-04 (1.47%)	3.3204E-05 (25.13%)
g_2	1.1293E-04 (0.37%)	4.8940E-05 (0.37%)	5.1273E-05 (0.14%)	1.0136E-04 (1.05%)	2.7842E-05 (22.17%)
g_3	2.6260E-05 (1.13%)	2.2498E-05 (0.64%)	2.7623E-05 (0.35%)	3.7113E-05 (0.31%)	6.2594E-06 (19.64%)
g_4	2.3720E-06 (3.25%)	8.7719E-06 (1.20%)	1.3863E-05 (0.63%)	1.0665E-05 (3.70%)	5.3533E-07 (11.19%)

$$* \, diferencia\ relativa = \frac{|MOCA - AZNHEXT|}{MOCA} \times 100$$

Al hacer la comparación de los flujos promedio por región del caso 1 se observa que la diferencia entre los valores es menor al 10%. Para el caso 2 las diferencias son menores al 4%, excepto para la región de barras de control, ahí la diferencia alcanza un valor del 25%. En el caso 3 las diferencias son menores al 2% salvo dos valores. En general se puede apreciar que en los distintos casos la zona de prueba tiene la menor diferencia relativa y la región de barras de control o de seguidor tiene la mayor diferencia relativa.

5. CONCLUSIONES

Se logró desarrollar un módulo de transporte en estado estacionario basado en el método de Ordenadas Discretas para núcleos cuyos ensambles tengan geometría hexagonal-Z.

El módulo computacional AZNHEXT fue verificado con el problema benchmark del modelo tridimensional KNK. Los resultados obtenidos fueron comparados contra el código MOCA. Analizando los valores obtenidos para el *keff* se puede observar claramente cómo el caso 3, barras de control completamente insertadas, es el que presenta el mayor desafío, pues al tener material absorbedor en el sistema la aproximación S_2 no simula de forma adecuada el problema. Al ir aumentando la aproximación a S_4 y S_8 los resultados mejoran considerablemente en los tres casos; en el caso 1 con AZNHEXT S_8 prácticamente se reproduce el valor de referencia, en el caso 2 con AZNHEXT S_8 la diferencia relativa es de 173 pcm lo cual es muy buen resultado considerando que ya se tiene barra de control presente, en el caso 3 con AZNHEXT S_8 se logra acercar al valor de referencia hasta 497 pcm que cae dentro del margen de aceptación de 500 pcm y es una buena diferencia considerando las situaciones antes mencionadas.

Tabla IV. Flujo escalar promedio por región caso 1: CR totalmente insertadas

	Zona de prueba	Cobertor axial	Driver con moderador	CR
MOCA (método Monte Carlo)				
g_1	1.4983E-04	4.0660E-05	7.4993E-05	9.5471E-05
g_2	1.1677E-04	5.1828E-05	5.1904E-05	6.9316E-05
g_3	2.1823E-05	2.3632E-05	2.6958E-05	1.3437E-05
g_4	1.1663E-06	9.8501E-06	1.3391E-05	9.5265E-07
AZNHEXT S_8 (método nodal S_N)				
g_1	1.6735E-04 (11.69%)*	4.0534E-05 (0.30%)	7.5171E-05 (0.23%)	9.7334E-05 (1.95%)
g_2	1.1742E-04 (0.56%)	5.2562E-05 (1.41%)	5.1949E-05 (0.08%)	7.0662E-05 (1.94%)
g_3	2.1411E-05 (1.88%)	2.3697E-05 (0.27%)	2.6844E-05 (0.42%)	1.3693E-05 (1.90%)
g_4	1.0586E-06 (9.23%)	9.7848E-06 (0.66%)	2.6844E-05 (0.53%)	9.4550E-07 (0.75%)

$$*diferencia\ relativa = \frac{|MOCA - AZNHEXT|}{MOCA} \times 100$$

Al comparar el CRW con AZNHEXT se aprecia que el error relativo es bastante alto, debido a que depende del caso 3, si el caso 3 tiene un error asociado grande, éste se propaga al cálculo de CRW. A pesar de esto es clara la mejoría del cálculo de CRW conforme la aproximación S_N aumenta. Además de que los valores obtenidos se encuentran entre la difusión y el Monte Carlo.

Ahora, respecto a los flujos promedios por región se puede tener una mejor perspectiva de que el módulo AZNHEXT funciona de manera correcta ya que no es un valor global como el factor de multiplicación efectivo. Las diferencias relativas varían dependiendo de la región y el grupo de energía, pero se puede observar que la mayoría están por debajo del 5% lo cual concuerda con lo reportado por otros autores en los resultados del benchmark. Las regiones CRP y CR presentan las mayores diferencias pues al haber cambios de secciones eficaces abruptos es más complicado modelar de forma adecuada el flujo de neutrones.

En conclusión, se puede decir que el trabajo muestra resultados alentadores y el desarrollo de este tipo de herramientas está bien encaminado. También da paso a nuevas verificaciones con otros problemas o un mayor desarrollo hacia la parte de transitorios.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACyT-SENER para la elaboración de este trabajo. Así mismo el autor Alejandro Campos Muñoz agradece al Instituto Politécnico Nacional y al CONACyT por la beca recibida para sus estudios de maestría.

REFERENCIAS

1. "AZTLAN Platform." URL www.aztlanplatform.mx.
2. J. Esquivel. Métodos Nodales Aplicados a la Ecuación de Difusión de Neutrones Dependiente del Tiempo en Geometría Hexagonal-Z. Master's Thesis, Instituto Politécnico Nacional, ESFM, Mexico City, Mexico (2015).
3. J. J. Duderstadt and L. J. Hamilton. Nuclear Reactor Analysis. John Wiley and Sons, Inc., New York (1976). ISBN 0-471-22363-8.
4. E. del Valle and E. H. Mund. "RTk/SN Solutions of the Two-Dimensional Multigroup Transport Equations in Hexagonal Geometry." Nuclear Science and Engineering, **148**, pp. 172–185 (2004). DOI 10.13182/NSE04-A2449.
5. W. J. Gordon and C. A. Hall. "Transfinite Element Methods: Blending-Function Interpolation Over Arbitrary Curved Element Domains." Numerische Mathematik, **21**(2), pp. 109–129 (1973). DOI 10.1007/BF01436298.
6. C. Múgica. Solución de la Ecuación de Transporte en Geometría Hexagonal usando la Aproximaci´on SN para Varias Condiciones de Simetría. Master's Thesis, Instituto Politécnico Nacional, ESFM, Mexico City, Mexico (2016).
7. J. Duran. Implementación de la Cinética en el Código de Transporte Tridimensional AZTRAN. Master's Thesis, Instituto Politécnico Nacional, ESFM, Mexico City, Mexico (2016).
8. Campos. Development of a 3D Nuetron Transport Solver for AZNHEX Code. Master's Thesis, Instituto Polit´ecnico Nacional, ESFM, Mexico City, Mexico (2020).
9. T. Takeda and H. Ikeda. "Neutron Transport Benchmarks." Nuclear Science and Technology, **28:7**, pp. 656–669 (1991).

Loading Pattern Determination for 50% MOX and 50% UO_2 iPOWER reactor for Initial Cycle

Florencia de los Angeles Rentería del Toro *
College of Nuclear Science and Technology, Harbin Engineering University
Nantong Street 145, 150001 Harbin, China
florenciaren@hrbeu.edu.cn

Armando Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
La Marquesa, Ocoyoacac Estado de México, 52750, México
armando.gomez@inin.gob.mx

Abstract

For an existing Nuclear Power Plant (NPP), there are limited number of specific operating requirements for each reactor cycle. These requirements depend on the reactor, fuel type, technical specifications, operating limits, and power optimization studies.
During reactor operation, core characteristics concerning safety and economy are determined mainly by fuel loading pattern in the core.
Loading Pattern (LP) is a combination of several fuel assemblies, with different multiplying properties, enrichments and burnup. The LP is important to maximize the energy extracted from the core while maintaining the power distribution as flat as possible.
The fundamental goal of this study is to determine a LP for the initial cycle using a mixture of Mixed Oxide (MOX) and Uranium Dioxide (UO_2) fuels in iPOWER (Innovative Passive Optimized Worldwide Economical Reactor) which is an advanced Pressurized Water Reactor (PWR) under development in the Republic of Korea.
The application of plutonium as Mixed Oxide (MOX) fuel in Light Water Reactors (LWRs) is an alternative option for effective use of plutonium separated by reprocessing in the nuclear fuel cycle.
Nuclear characteristics and safety of nuclear reactor were determined using CASMO-4 and SIMULATE-3 package codes for initial cycle.
This determination will be the basis for proposing a new Fuel Management Strategy (FMS) that will utilize fuel efficiently and increase the production of energy.

1. INTRODUCTION

The Innovative Passive Optimized Worldwide Economical Reactor (iPOWER) is an advanced pressurized water reactor (PWR) with 1,250 MWe capacity which currently is under development. The main characteristic of iPOWER is the implementation of passive safety features such as the passive emergency cooling system (PECCS) and passive containment cooling system (PCCS) that allows an accident to be mitigated without operator's action or any electric sources [1].

The iPOWER core consists of 193 Fuel Assemblies (FAs) of the Westinghouse type 17 x 17 lattice fuel. These assemblies consist of 264 fuel rods with 1.25984 cm fuel rod pitch and 426.7 cm active length. Core thermal power is rated at 3,572 MWt with hot full power moderator average temperature of 308.3°C and core inlet moderator temperature of 287.8°C at 15.5 MPa of system pressure.

The objective of this study is to investigate the development of an Initial Core Loading Pattern (ICLP) in iPOWER that uses 50% of FA with Mixed Oxide (MOX) Fuel and the rest of the FAs Uranium Dioxide (UO_2) Fuel since the European Utility Requirements (EUR) document states that the next generation European Passive Plant (EPP) reactor core design shall be optimized for Uranium Dioxide (UO_2) fuel assemblies, with provisions made to allow for up to 50% MOX FAs [2]. During the ICLP design, it is important to consider the neutronics and thermal characteristics, such as power distribution, reactivity coefficients and Shutdown Margin (SDM). The energy extracted from the core should be maximized while power distribution is maintained as flat as possible. The characteristics are important for ensuring performance and safety of nuclear reactor using nuclear design codes system. CASMO-4 and SIMULATE-3 [3-4] design codes were used to conduct the simulations at fuel assembly design and safety evaluation.

2. DESCRIPTION OF THE MODELLED SYSTEM

In this section, the fuel assemblies configurations that were used for MOX and UO_2 and the fuel location in the reactor for iPOWER core are briefly described.

2.1. REACTOR

The core is designed for an operating cycle of 18 months with discharge burnup of 17,707 MWD/tHM (Tones of heavy metal). The iPOWER core is loaded with 193 FA. Fig. 1 contains the quarter loading pattern reference for the initial cycle; 97 UO_2 FAs with 2.818 wt% of U-235 average enrichment and 96 MOX FAs with 3.644 wt% of average total fissile content (3.537 wt% Pu, 0.382 wt% U-235) were used in the core.

In this model, Gadolinia (Gd_2O_3) is used as the burnable absorber (BA) material to suppress excess of reactivity and control power distribution.

	8	9	10	11	12	13	14	15
8	UA0	UA0	MA3	UA0	UB3	MA3	UC3	MB0
9	UA0	MA3	UA0	UB3	UA0	UB3	MB4	MB0
10	MA3	UA0	UB3	MA3	UB3	MA3	UC3	MC0
11	UA0	UB3	MA3	UC3	UA0	UC3	MB4	MC0
12	UB3	UA0	UB3	UA0	MA3	UC3	MC0	
13	MA3	UB3	MA3	UC3	UC3	MB4	MC0	
14	UC3	MB4	UC3	MB4	MC0	MC0		
15	MB0	MB0	MC0	MC0				

Figure 1. Quarter core loading pattern reference for MOX and UO_2 fuel assemblies.

2.2. FUEL ASSEMBLIES

In total, 7 types of FAs were generated; Table I and II display the information of the enrichment and distribution of the UO_2 and MOX fuel assemblies respectively. Each FA is 17 x 17 lattice fuel with 264 fuel rods.

Table I. FA design for UO_2 fuel

UO_2 Fuel									
FA		Fuel Rods				Blanket	BA Rods		
Type	No	wt%		No.		wt%	wt% (U-235)	wt% (Gd_2O_3)	No.
		High	Low	High	Low				
UA0	33	2.00		264		-	-	-	-
UB3	32	3.30	2.80	184	64	2.20	2.20	10.0	16
UC3	32	3.80	3.30	184	64	2.20	2.20	10.0	16
Total	97								

Table II. FA design for MOX fuel

MOX Fuel									
FA		Fuel Rods				Blanket	BA Rods		
Type	No	wt%		No.		wt%	wt% (U-235)	wt% (Gd_2O_3)	No.
		High	Low	High	Low				
MA3	32	2.20	1.70	200	40	-	2.20	4.00	24
MB0	12	4.40	3.40	200	64	2.20	-	-	-
MB4	20	4.40	3.40	200	32	2.20	2.20	4.00	32
MC0	32	5.40	4.40	200	64		-	-	-
Total	96								

3. METHODOLOGY

The simulations have been carried out using CASMO-4/SIMULATE-3. Several sets of comparisons were made varying the numbers of feed fuel assemblies, and optimization of the fuel management strategy was performed to reach the following design criteria: 18 months cycle length (17,707 MWD/tHM), Critical Boron Concentration (CBC) less than 1000 ppm and Maximum Pin Peaking Factor (FΔH) less than 1.55. Figure 2 describes the flow process that was developed to obtained the loading pattern that satisfies the design criteria.

During simulations, different parameters were calculated in order to know if the design criteria of the core meet the safety specifications and maintain the level of criticality during operation, such as: Fuel Temperature Coefficient (FTC), Moderator Temperature Coefficient (MTC), and Shutdown Margins (SDM). Figure 3 contains the evalution process oh this stage.

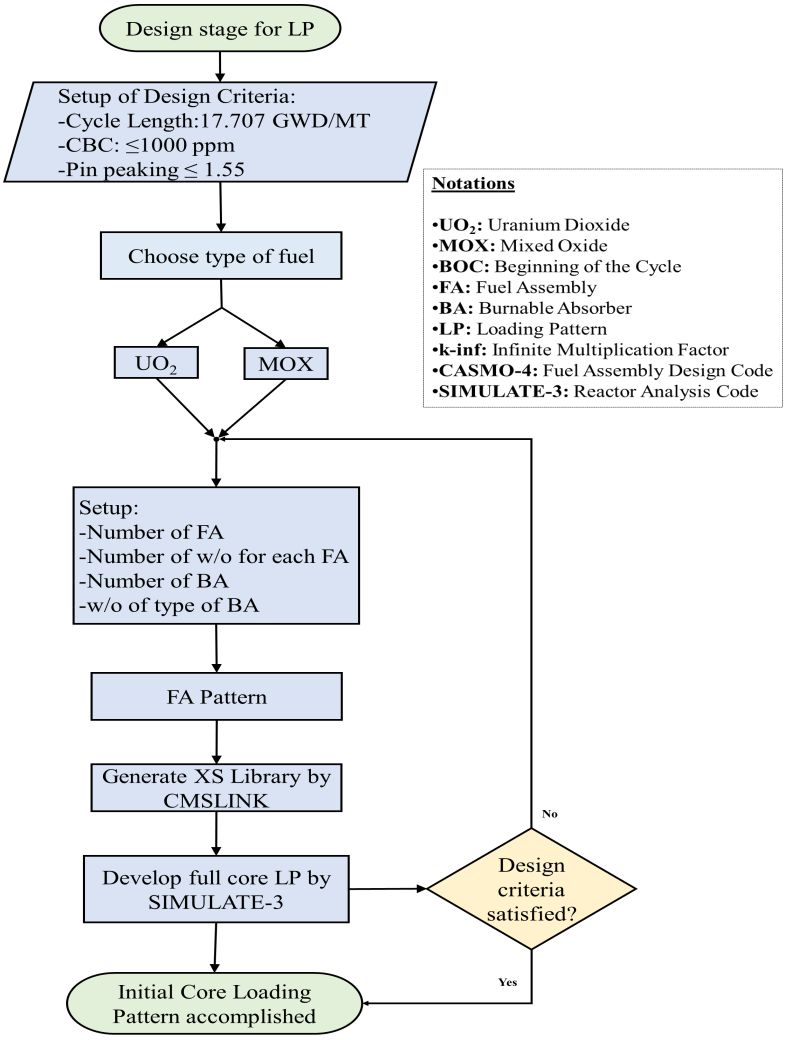


Figure 2. Loading Pattern process for Initial cycle.

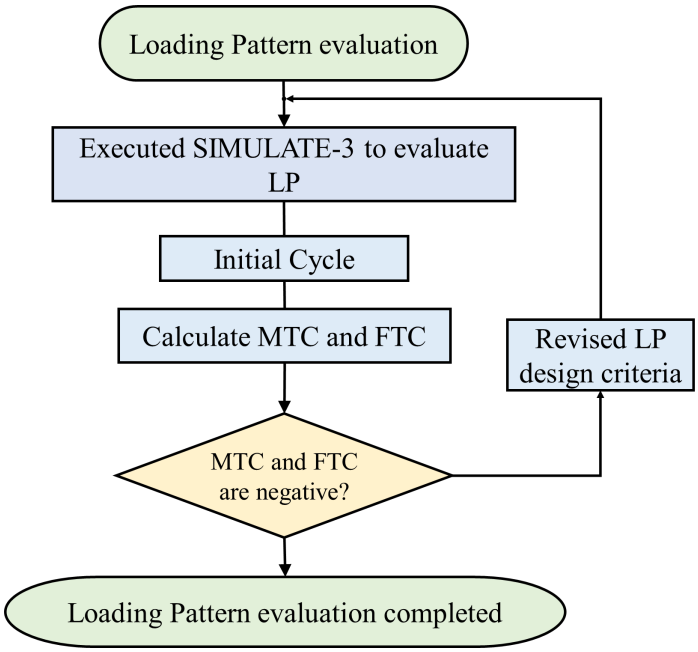


Figure 3. Evaluation process of level of criticality

4. RESULTS

The next evaluations follow the methodology and approach developed by APR-1400 reactor in the Design Control Document (DCD) [5].

4.1. POWER DISTRIBUTION

The Power Distribution could be measured by certain factors, one of them is FΔH (Pin Peaking Power) which provides the integral rod power of a fuel rod relative to the average integral rod power. The hottest rod in the core is plotted in Fig. 4, and accounts for the hot channel factors that should be monitoring during power operation. It could be noticed that the power distribution is maintained as flat as possible, and the maximum pin peaking factor is 1.442 still below the 1.55 limit value [6]. Keeping the power distribution below the limits, helps to maintain the economical utilization of the fuel and allows operation at high power without reaching Departure from Nucleate Boiling (DNB) in the core and thus affecting heat transfer. DNB limit values are still under design stage of iPOWER therefore, the results here presented could provide a valuable input on fuel performance under operation [7].

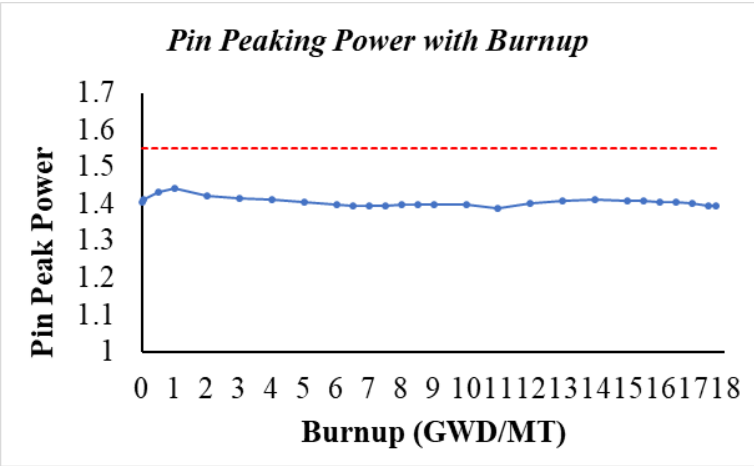


Figure 4. Maximum rod relative power to core average rod power as a function of burnup.

MOX fuel has larger fission and absorption cross section than U-235 and generally more neutron absorbing at low energies because of the larger radiative capture and fission cross section of Pu-240 and Pu-242. High absorption cross section behavior has been the reason of neutron spectrum hardening in MOX in comparison of UO_2. On the other hand, the reduction of soluble-boron, control rod and burnable poison worth are affected by the spectrum hardening effect in maintaining the reactor core criticality [8]. In Fig. 5 appears the critical boron concentration during the cycle length keeping the concentration below the 1,000 ppm as required.

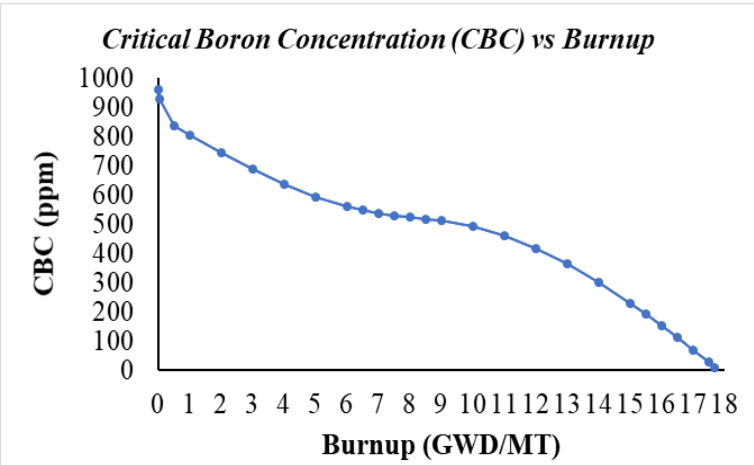


Figure 5. Boron Concentration as a function of burnup.

4.2. REACTIVITY PARAMETERS

In this section, the reactivity coefficients analysis that was determined for iPOWER is presented. According to the 10 Code of Federal Regulation (CFR) [9] that describes the Energy Regulation, it mentions that "the reactor core and associated coolant systems shall be designed so that in the power operating range the net effect of the prompt inherent nuclear feedback characteristics tends to compensate for a rapid increase in reactivity".

4.2.1. Moderator Temperature Coefficient

Figure 6 contains the MTC calculation results at different boron concentrations in certain periods of the cycle operation. The Beginning of the Cycle (BOC), Middle of the Cycle (MOC) and End of the Cycle (EOC) were analyzed at 0, 9, and 17.7 GWD/tHM, respectively. For MTC, as moderator temperature increases, the moderator density decreases, and reactivity varies. In moderator, boron density plays an important role in controlling the reactivity and power distribution. The boric acid concentration is decreased and it is used to compensate for the decrease in reactivity due to burnup of the fuel. However, boron concentration may also decrease as moderator temperature increases, due to boron dilution in water (coolant) [10].

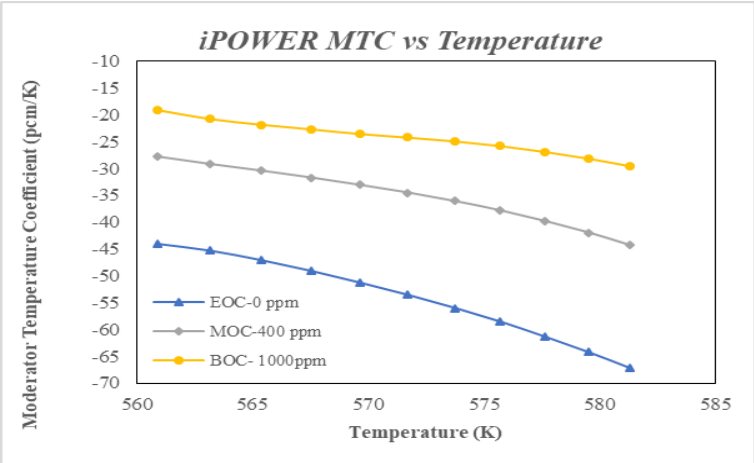


Figure 6. Moderator Temperature Coefficient in iPOWER.

4.2.2. Fuel Temperature Coefficient

As it was mentioned in section 4.2.1, the same conditions at BOC, MOC, and EOC were applied to calculate the FTC coefficients. Figure 7 shows the dependence of FTC for different values of fuel average temperature. It could be found that maximum fuel temperature decreases over the time that reactor is operating. As it is described by Westinghouse [11], there are several competing factors affecting fuel temperature over burnup. One of the reasons that could cause fuel temperature increment is the release of fission product gases into the gap that is originally filled with helium.

As long as helium has relatively high thermal conductivity among other gases, introducing gaseous fission products decrease thermal conductivity of gap and results in increasing average fuel temperature. However, fuel swelling is one of the most dominant factors over burnup. As a result of swelling, the thickness of the gap between fuel pellet and cladding is reducing, causing contact between fuel and cladding at some point. Consequently, it increases the thermal conductivity of the gap and therefore reduces fuel temperature. The other observation from the figure shows that the absolute value of FTC decreases over burnup. This could be explained by production of Pu-240 over time operation [12]. This isotope has higher negative impact on FTC compared to U-238 due to higher and larger resonance in an epithermal energy range, which is naturally broadening in hot fuel.

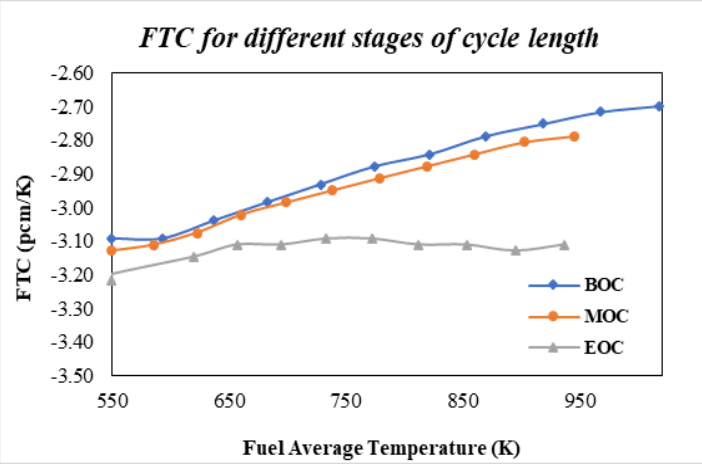


Figure 7. FTC for different values of fuel temperature at BOC, MOC, and EOC.

4.2.3. Power Coefficient

The relationship between Power Coefficient (PC) and Core Power is shown in Figure 8. As it can be seen in the graph, the values of PC are negative over the entire range of power from Hot Full Power (HFP) to Hot Zero Power (HZP).

The difference between EOC and BOC can be explained by the change of nuclide composition in fuel at the EOC. In particular, the dominant fissile isotopes in the EOC are Pu-239 and Pu-241 that have fission resonances in epithermal energy range according to Zainuddin et al [13]. As a result, power is decreased and fuel temperature causes negative feedback.

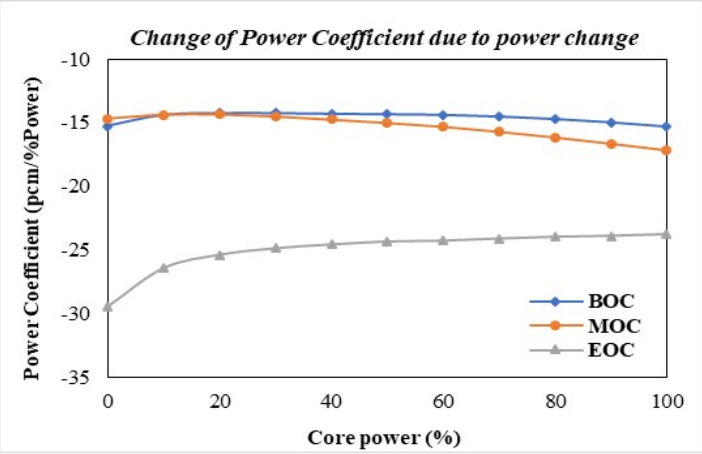


Figure 8. Power Coefficient over Core Power.

4.2.4. Control Rod Configuration and Shutdown Margin

The design proposal for the control rod configuration of iPOWER is presented in Figure 9. The pattern uses Boron Carbide B_4C as the absorber material in 77 Control Element Assemblies (CEA). Each CEA uses 24 fingers configuration, this geometry is represented in Figure 10. Around 74% of CEA have been placed in the FAs containing UO_2 fuel, and only 26% in the FAs with MOX fuel.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1					0	0	SB	0	SB	0	0				
2			0	SA	0	SA	0	SB	0	SA	0	SA	0		
3		0	C4	0	C1	0	C2	0	C2	0	C1	0	C4	0	
4		SA	0	SB	0	C3	0	C5	0	C3	0	SB	0	SA	
5	0	0	C1	0	C1	0	0	0	0	0	C1	0	C1	0	0
6	0	SA	0	C3	0	C3	0	C1	0	C3	0	C3	0	SA	0
7	SB	0	C2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	C2	0	SB
8	0	SB	0	C5	0	C1	0	C5	0	C1	0	C5	0	SB	0
9	SB	0	C2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	C2	0	SB
10	0	SA	0	C3	0	C3	0	C1	0	C3	0	C3	0	SA	0
11	0	0	C1	0	C1	0	0	0	0		C1	0	C1	0	0
12		SA	0	SB	0	C3	0	C5	0	C3	0	SB	0	SA	
13		0	C4	0	C1	0	C2	0	C2	0	C1	0	C4	0	
14			0	SA	0	SA	0	SB	0	SA	0	SA	0		
15					0	0	SB	0	SB	0	0				

Figure 9. Location of control rod groups.

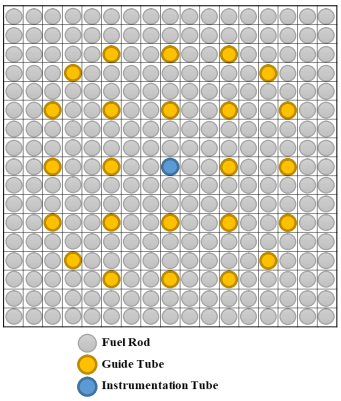


Figure 10. Control Element Assembly Configuration 17x17 type.

Control Rod Worth (CRW) calculations were carried out. Moreover, HFP to HZP computations were applied to initial loading pattern. Finally, SDM was determined after achieved the CEA configuration and CRW. The arrangement of the control rod groups is presented in Table III.

Table III. Arrangement of control rod groups

Bank Function	Bank Name	Control Rod number
Control bank	C5	5
	C4	4
	C3	12
	C2	8
	C1	16
Shutdown bank	SB	16
	SA	16
Total		77

Table IV contains the SDM value that was calculated for Initial Cycle. From the safety requirements and analysis for the licensing process of a commercial nuclear reactor; the SDM calculation assures that the reactor will be capable of shutdown during an accident scenario and to maintain the subcriticality in the core. It was found that the Shutdown Thermal Margin satisfied the design criteria of SDM value should be ≥ 5500 pcm from APR1400 design [4].

Table IV. Shutdown Margin Calculation

Requirements	*BOC (pcm)*	*MOC (pcm)*	*EOC (pcm)*
Control Rod Worth			
All Rods In Worth with Most Reactive Rod Stuck Out (a)	9886	10758	11178
Uncertainty (4.65 %) (b)	460	500	520
Most Reactive Stuck Rod Worth	2781	2139	3454
Total Worth (a) – (b) = (c)	9426	10258	10658
Control Rod Requirements			
Total Power Defect (d)	1518	1652	2790
Rod Insertion Allowance (RIA) (e)*	83	130	367
Total Requirements (d) + (e) = (f)	1601	1782	3157
Calculated SDM (c) – (f)	**7852**	**8476**	**7501**
Requirement SDM	> 5500	> 5500	> 5500

* Inclusion of RIA reduced the value of possible SDM

5. CONCLUSION

In this paper it was investigated the possibility of initial core loading pattern for iPOWER reactor, which currently is still under design stage. This is a proposed design for a suitable core that could be loaded 50% of the FA with MOX fuel and the rest of the FA with UO_2 fuel. The parameters such as cycle length, peaking factor, CBC, reactivity coefficients, CEAs configuration, and SDM calculation were investigated.

In conclusion, the iPOWER reactor core design with a mixture of fuel is capable to maintain the design specifications and safety requirements for the initial cycle.

However, further work should be conducted to continue this design study for the equilibrium cycle stage, in order to prove that the core will be capable to operate for more cycles during these conditions.

Additionally, as a result of reduction in core β_{eff} due to the use of MOX fuel, it is necessary to analyze all the regulatory set of transients in order to verify that under such new neutronics configuration, the fuel load is able to behave inside the thermal limits during transient.

ACKNOWLEDGEMENT

We would like to express our great appreciation and gratitude given by our Director of the Fuel Assembly Design Laboratory and the rest of the members for their assistance and support given during the planning and development of this paper. This work was supported by the 2018 Research fund of the KEPCO International Nuclear Graduate School (KINGS).

REFERENCES

[1] S. W. Lee, S. Heo, H. U. Hah, H.G. Kim, The concept of the innovative power reactor, Korean Nuclear Society, 2017.

[2] Salam Mahrus., Hah Chang Joo, Comparative study on nuclear characteristics of APR1400 between 100% MOX core and UO_2 core, Annals of Nuclear Energy, 2018.

[3] CASMO-4: A fuel assembly burnup program User's Manual, SSP-09/443-U, Studsvik Scandpower, 2009.

[4] SIMULATE-3, Advanced Three-Dimensional Two-Group, Reactor Analysis Code User's Manual, SSP-09/447 - U, Studsvik Scandpower, 2009.

[5] Korean Hydro and Nuclear Power, "APR1400 Design Control Document, Chapter 4-Reactor", 2014.

[6] F. D'Auria, Thermal Hydraulics in Water-Cooled Nuclear Reactors. Cambridge: Elsevier, 2017, p. 110.

[7] Björk et al, Study of Thorium-Plutonium Fuel for Possible Operating Cycle Extension in PWRs, Hindawi, 2013.

[8] Mohga Hassan, A Comparative Study of Safety and Kinetic Parameters of UO_2 and MOX fuel. Arab Journal of Nuclear Science and Applications, 2016.

[9] Code of Federal Regulations, Appendix A to Part 50-General Design Criteria for Nuclear Power Plants, Criteria 11.

[10] Yoshikai Oka, Katsuo Suzuki, Nuclear Reactor Kinetics and Plan Control. Springer Editorial, 2013, p.28-30.

[11] Westinghouse Technology Systems Manual, Section 2.1, Reactor Physics Review.

[12] S. Fehér et al, MOX fuel effects on the isotope inventory in LWRs, Nuclear Engineering and Design, 2012.

[13] Zainuddin et al, The factors affecting MTC of thorium–plutonium-fuelled PWRs, Annals of Nuclear Energy, 2016.

Modelo para Reducir Costos de Sistemas en un Diseño Informado en Riesgo

Orestes Castillo-Hernández y Pamela F. Nelson
Universidad Nacional Autónoma de México
Ciudad universitaria, Coyoacán, Ciudad de México, México.
ocastilloh1991@gmail.com, pnelson_007@yahoo.com

Manuel Perdomo Ojeda
Universidad de la Habana
Avenida Salvador Allende n.º 1110, Plaza de la Revolución, ciudad de La Habana, Cuba.
mperdomo1960@gmail.com

Resumen

Existe un creciente reconocimiento de que la incorporación de un diseño centrado en la seguridad y la producción puede respaldar eficazmente la reducción de los costos de construcción y operación de los reactores nucleares. Esto apoya los esfuerzos dirigidos a hacer que la tecnología sea más competitiva y rentable, en comparación con otras formas de producción de energía eléctrica. Este artículo desarrolla un método para establecer objetivos de indisponibilidad para los sistemas de reactores nucleares con el fin de obtener un diseño lo más económico posible. El método se basa en modificar las probabilidades de eventos básicos dentro de las estructuras del árbol de fallas que modelan la indisponibilidad de los sistemas y componentes que se incorporarán al diseño de la planta, partiendo de que se conoce el objetivo de riesgo y de producción de la planta. Es un método iterativo en el que el diseño debe estar en una etapa en la que se puedan aplicar métodos cuantitativos de análisis de confiabilidad a nivel de sistema y componente. Este método forma la base para el trabajo futuro en el que las alternativas de diseño que afectan la indisponibilidad se pueden medir y comparar en relación con su objetivo de indisponibilidad. La optimización de las alternativas de diseño produciría diseños más rentables, que tengan en cuenta tanto los costos de construcción como los futuros costos de operación.

1. INTRODUCCIÓN

La competencia de fuentes de producción de electricidad ha provocado la necesidad de reducir los costos de los proyectos de construcción de nuevas centrales nucleares [1,2]. Según estudios realizados por el Instituto de Investigaciones de Energía Eléctrica (EPRI) el costo de las nuevas centrales nucleares debe reducirse al menos entre un 35% a un 40 %, en relación con los costos de los reactores avanzados de agua ligera, diseñados a principio de la década de 1990, esto solo para poder competir con los costos de producción de electricidad por medio de centrales de ciclo combinado, que utilizan gas natural como combustible [3, 4]. Es decir, que los reactores de cuarta

generación no se incorporarán a la producción definitiva de energía a menos que se les reduzcan los costos de diseño, licencia y construcción, mientras se mantengan altos estándares de seguridad.

Ante esta situación, sería prominente realizar la pregunta ¿cómo han impactado los diseños de las actuales centrales nucleares en los costos de operación, mantenimiento y construcción de éstas?

Al comienzo de la industria, en la década de 1960, la información sobre el riesgo siempre fue un factor importante en el diseño de centrales nucleares, se llevó a cabo mediante análisis de seguridad cualitativos y muy conservadores, (fundamentalmente accidentes base de diseño). Las características de ciertos materiales, la fiabilidad de los equipos y el rendimiento de las plantas ante accidentes no eran totalmente conocidos. Para resolver estas y otras incertidumbres se agregó un gran margen de seguridad durante el diseño de estructuras, sistemas y componentes (SSCs) [3]. Estos antiguos diseños y normativas se pueden reevaluar y actualizar a la luz de las nuevas tecnologías, nuevos materiales, nuevas regulaciones, bibliotecas de datos experimentales, etc.

2. DISEÑO INFORMADO EN RIESGO

El diseño-informado en riesgo debe ser un modelo evolutivo, dividido en cinco etapas: diseño pre-conceptual, conceptual, preliminar, final y planta en operación, las dos primeras etapas se basan en combinaciones de análisis heurístico, determinista y semicuantitativo, y las tres últimas se basan fundamentalmente en análisis probabilístico de seguridad (APS).

Los datos de entrada, necesarios para realizar un APS completo, requieren los resultados de un programa de diseño y desarrollo de reactores relativamente maduros. Si bien, tener los resultados de un APS al comienzo del proceso para desarrollar y diseñar un nuevo concepto de reactor sería ideal, la realidad es que la información detallada y probablemente los recursos necesarios para realizar un APS completo, no están disponibles al principio del desarrollo del diseño. Por ejemplo, es posible que no se disponga de documentos de diseño detallados, tales cómo tipo de componentes, instrumentación, planos de tuberías, etc y no sería posible realizar recorridos por una instalación física.

Por tanto, en las primeras etapas del diseño, se espera que el alcance del APS sea más amplio y se centre en los objetivos propuestos (ej. objetivos de seguridad y producción). Esto se debe a la sincronización del proceso de diseño y a la falta de datos operativos. Además, algunos requisitos para desarrollar un APS que son apropiados para una planta en operación o una planta ya construida, pueden no ser alcanzables o apropiados para un APS de una planta en etapa de diseño inicial [7].

En etapas tempranas del diseño son factibles métodos deterministas, ej. el método de análisis "¿qué pasa si?" es adecuado en situaciones en las que la información de diseño aún es bastante limitada. En la fase pre-conceptual de un proceso de diseño, "¿qué pasa si?" se puede utilizar para establecer un vínculo técnico temprano entre el diseño de ingeniería y seguridad, y para proporcionar información cualitativa inicial sobre posibles problemas de seguridad.

A medida que el diseño avanza a la etapa conceptual, se dispone de información suficiente para respaldar la aplicación del método de análisis de riesgo de proceso "HAZOP". Con más detalles de diseño adicionales, el uso del método de análisis de modos de falla y efecto (FMEA) se vuelve factible. Cuanta más información de diseño esté disponible, más detallados y precisos serán los resultados del análisis de peligros. Los resultados del análisis de peligros pueden usarse para identificar eventos iniciadores y proporcionar datos e información importante para su uso en posteriores análisis de riesgos cuantitativos.

En la siguiente sección se describe un método para determinar objetivos de indisponibilidad para sistemas cuando la planta se encuentra en etapa de diseño preliminar.

3. OBJETIVOS DE RIESGO E INDISPONIBILIDAD

Cuando el desarrollo del diseño alcanza una etapa preliminar se pueden aplicar métodos cuantitativos. En este punto, puede ser útil proponer objetivos de indisponibilidad para aquellos sistemas importantes para la seguridad y la producción, con el fin de determinar la configuración más económica a partir de diferentes alternativas de diseño, que cumplan los objetivos de indisponibilidad de producción o seguridad y teniendo en cuenta tanto la inversión inicial como los costos de operación. Algunos de los posibles cambios en el diseño son sustitución de componentes con mayor o menor disponibilidad, según sea la necesidad, cambios en el tiempo entre mantenimientos o frecuencia de monitorear la falla. Ejemplo de posibles cambios se muestran en la tabla I.

Tabla I: Ejemplo de fuentes de indisponibilidad y cambios en el diseño

Fuentes de indisponibilidad	Posibles cambios en el diseño
Bomba falla al arranque	Cambiar la bomba por una con mayor (o menor) confiabilidad
Indisponibilidad por mantenimiento	Extender o reducir el tiempo entre mantenimientos
Válvula neumática falla a mantener la posición	Cambiar por otro tipo de válvula (ej. manual)

Pero incluso con un grado de avance en el diseño en el cual se puedan aplicar métodos cuantitativos, es complicado proponer objetivos de indisponibilidad para los sistemas, porque la indisponibilidad de cada sistema no es una simple fracción del riesgo total de la planta ni del resultado de un modelo de árbol de eventos (AE). Además, pueden existir dependencia entre sistemas (ej. dependencia de componentes compartidos, dependencia funcionales, etc) que aumentan la complejidad en los cálculos de indisponibilidad.

3.1. Objetivos para el Riesgo de la Planta y Objetivos para el Riesgo Resultado de los Árboles de Eventos

En este artículo, el método propuesto se basa en que el diseño se encuentra en una etapa en la que los datos y la información son suficiente para respaldar el desarrollo de un APS. El enfoque es

conservar la fracción que representa el riesgo a nivel de sistema, en forma de indisponibilidad total del sistema, según se calcula en el análisis del árbol de fallas (AF) y transferir esto de manera apropiada a los AEs para la cuantificación del riesgo total de la planta. Es decir, es necesario conservar la fracción que representa el riesgo resultado de los AEs del riesgo total de la planta, tanto en el diseño preliminar como en el diseño final, ver ecuación 1. Los ejemplos que se dan en este artículo se concentran en la parte de análisis de seguridad, es decir, se utiliza de forma generalizado el riesgo que puede ser semejante a la frecuencia de daño al núcleo para los reactores existentes, que pueden llegar al daño del núcleo.

Un objetivo de riesgo aproximado inicial para la planta puede basarse en comparaciones con los riesgos de las plantas existentes, el juicio de expertos y también tendría un peso importante las políticas propias del país donde se construirá la central.

El riesgo total de la planta es igual a la adición lógica del riesgo resultado de los AEs, relacionados con cada EI específico del diseño, es decir, es una compuerta OR entre todos los AEs. Matemáticamente sería:

$$AE_1 + AE_2 + AE_3 + (...) + AE_n = RP \qquad (1)$$

Donde:
RP es el riesgo de la planta en el diseño preliminar;
AE_i es el riesgo del árbol de eventos i en el diseño preliminar;
+ : adición lógica booleana.

El objetivo es que sea la misma fracción ej. AE_1 / RP tanto en el APS preliminar desarrollado como en el APS final. De aquí se puede obtener el valor del riesgo para cada AE del diseño final. Es decir:

$$AEF_i = \frac{AE_i * RPF}{RP} \qquad (2)$$

Donde:
RP: es el riesgo de la planta en el diseño preliminar;
AE_i : es el riesgo del árbol de eventos i en el diseño preliminar;
RPF: es el objetivo de riesgo para la planta;
AEF_i: es el objetivo de riesgo para el árbol de eventos i.

Este modelo solo es válido cuando el riesgo derivado de cada AE es muy pequeño, como sucede en las centrales nucleares. Esto se debe a que los eventos se consideran estadísticamente como mutuamente excluyentes, es decir, no es necesario restar los eventos combinados.

3.2. Método para Establecer Objetivos de Indisponibilidad para los Sistemas

El método propuesto requiere que si el riesgo (es decir, la contribución a la falla) resultante de un AE no cumple con su objetivo de riesgo es necesario que las contribuciones asociadas a la indisponibilidad de los sistemas se vuelvan a reevaluar su diseño para su ajuste. Para lograr esto, se compara y se equilibra el riesgo calculado para un diseño específico con su objetivo de riesgo. Si es menor que el objetivo de riesgo propuesto para este AE, se debe colocar un evento casa falso (evento básico con probabilidad cero) en el AF de cada sistema, a través de una compuerta OR. Luego la probabilidad de cada evento casa debe incrementarse, con un cierto paso, (el paso se puede ponderar para cada evento casa), hasta que el riesgo resultante del AE deje de ser menor que el objetivo propuesto, ver Figura 1. . Se debe enfatizar que esto no significa que la indisponibilidad de los sistemas deba incrementarse sin ningún motivo, sino que debe haber un cambio de diseño que resulte en una nueva estimación de la indisponibilidad del sistema, con la posibilidad de incluir componentes con mayores niveles de indisponibilidad y así poder disminuir los costos asociados a estos sistemas.

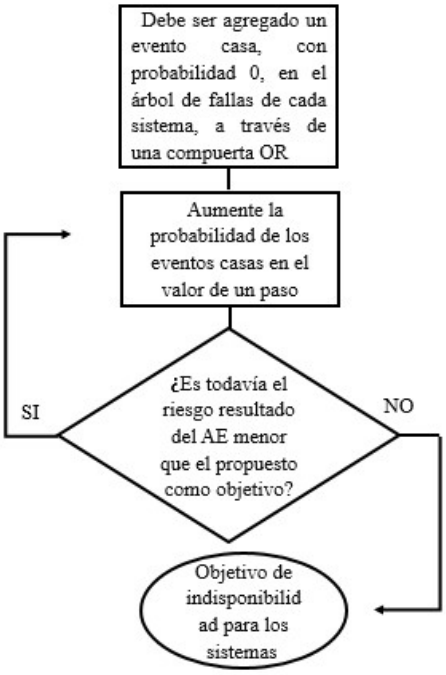


Figura. 1: Diagrama de flujo para el modelo cuando el riesgo resultado del AE es menor que el propuesto como objetivo

Por el contrario, si el riesgo resultado de un AE, en el que se modelan los sistemas a encontrar su objetivo de indisponibilidad, es mayor que el objetivo de riesgo propuesto para este AE, se debe colocar un evento casa verdadero (evento básico con probabilidad uno) a través de una compuerta AND en el AF de cada sistemas. . Luego, la probabilidad de cada evento casa debe reducirse, con

un cierto paso, hasta que el riesgo resultante del AE deje de ser mayor que el objetivo propuesto, ver Figura 2. En el momento en el que el riesgo resultado del AE se asemeje al propuesto como objetivo, los sistemas contarían con su propio objetivo de indisponibilidad, por el cual se basa su diseño. En este caso, puede ser necesario reducir los niveles de indisponibilidad aumentando la frecuencia del mantenimiento preventivo, disminuyendo el tiempo entre inspecciones, etc., lo que también podría resultar en mayores gastos.

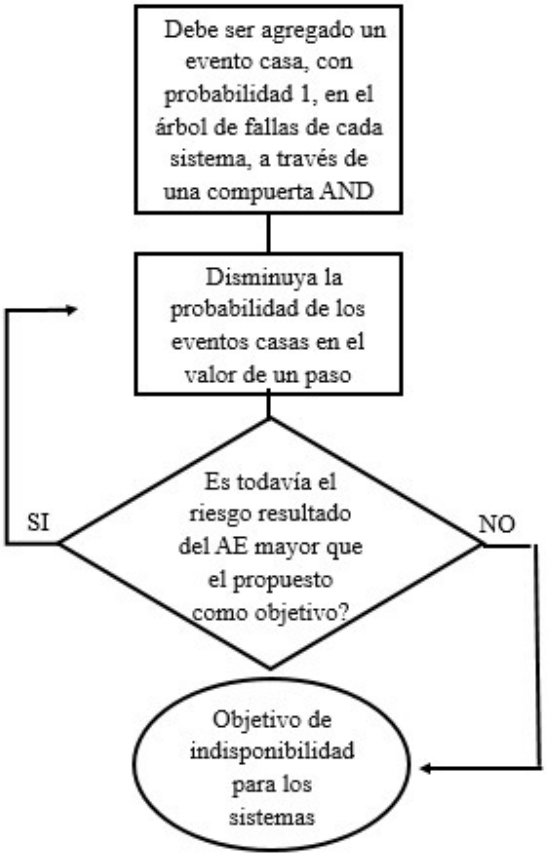


Figura. 2: Diagrama de flujo para el modelo cuando el riesgo resultado del AE es mayor que el propuesto como objetivo

La razón de utilizar eventos casas en los AFs es para garantizar que modificando estos EBs llegue a ser el riesgo resultado del AE semejante al propuesto como objetivo, pues si se modifican las probabilidades de los EBs que caracterizan las fallas de componentes en los AFs del diseño preliminar, pueden existir casos en el que nunca llegue a ser el riesgo resultado del AE semejante al propuesto como objetivo, entrando así en un ciclo infinito, en el que no se tendrán resultados.

Debido a la complejidad del cálculo iterativo fue necesario desarrollar un software que pueda modelar la ecuación de falla del AE y AFs, y aumentar o disminuir, según el caso, la probabilidad de los eventos casas añadidos en los AFs.

El mayor problema con la metodología para el cálculo de objetivos de indisponibilidad es cuando un determinado sistema participa en varios AEs y el cálculo del objetivo de indisponibilidad para este sistema da como resultado valores diferentes para diferentes ET. Esto puede ocurrir para aquellos sistemas considerados sistemas de apoyo como los sistemas de energía eléctrica. Para solucionar este problema, debemos partir de que la metodología de diseño nunca va a ser exacta, es decir, dependerá en gran medida del juicio de expertos y, por tanto, una solución factible es que el equipo de diseñadores elija una de los posibles objetivos de indisponibilidad para el sistema de forma conservadora y priorizando los eventos con mayores consecuencias.

3.3. Ejemplo de Cálculo de Objetivos de Indisponibilidad para Sistemas

Para realizar un ejemplo simple de cálculo de objetivo de indisponibilidad, se asume un AE en la que tres sistemas cumplen las funciones necesarias para mitigar el evento iniciador (IE), con una frecuencia de 2.0 E-3 / año, ver Fig. 3.
Para simplificar, los tres sistemas similares contienen cada uno tres componentes en serie. El sistema 1 contiene los componentes A, B, C, el sistema 2 contiene los componentes D, E, F y el sistema 3 contiene los componentes G, H e I. Además, se agregaron tres eventos casa a los árboles de fallas, cada uno en una compuerta OR con el resto del árbol, como se muestra en la Fig. 4, para el sistema 1, los AF para los dos sistemas restantes tienen la misma estructura.

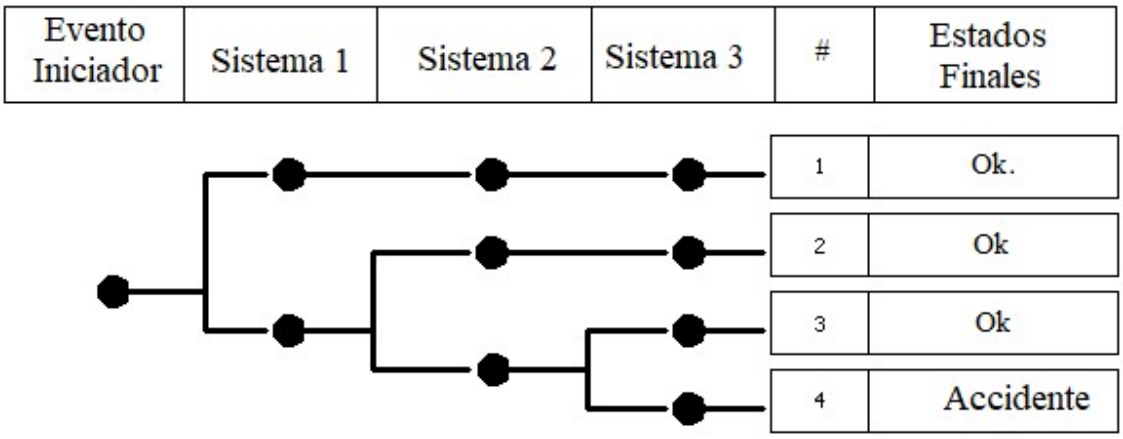


Figura 3: ***Configuración del AE que contiene a los tres sistemas de mitigación y el EI***

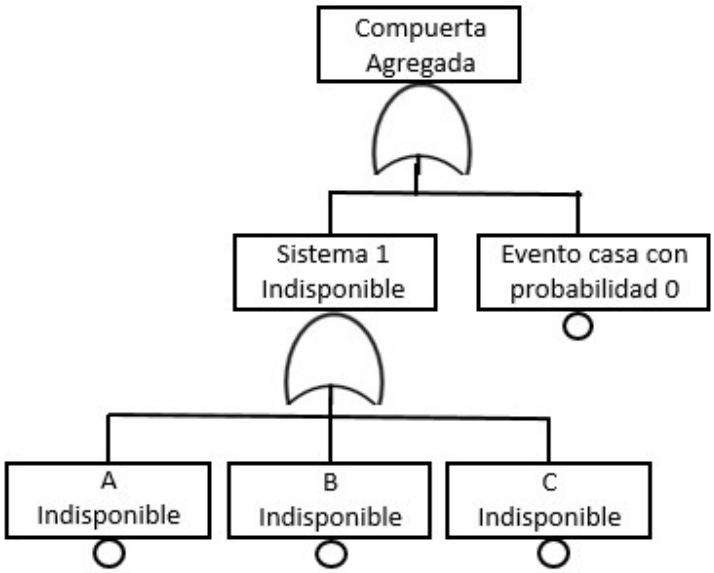


Figura 4: AF del Sistema 1, modificado con una compuerta OR

La Tabla II muestra las probabilidades de todos los BE de los sistemas y la probabilidad de los eventos de la casa antes de que comiencen a modificarse.

En este caso, los eventos casa se agregaron al AF con probabilidad cero a través de una compuerta OR porque el valor de riesgo resultante de la cuantificación del AE es menor que el objetivo de riesgo para él. Por lo tanto, la probabilidad de cada evento casa aumenta en cada iteración, ver Fig.1.

Tabla II: Probabilidad de los eventos básicos

Nombre del componente	Probabilidad de falla
A	1E-3
B	3E-5
C	3E-7
Evento casa 1	0
D	1E-3
E	3E-5
F	3E-7
Evento casa 2	0
G	1E-3
H	3E-5
I	3E-7
Evento casa 3	0

La Tabla III muestra cómo varía la probabilidad de falla del sistema, el riesgo resultante del AE y el valor de la probabilidad de cada evento casa, en cada iteración, donde el objetivo para el AE es 2.62E-12 / año, como ejemplo.

Tabla III: Probabilidad de falla del sistema, el riesgo resultado del AE y la probabilidad de los eventos casas para 4 iteraciones

Probabilidad del evento casa 1	Probabilidad de los eventos casa 2 y 3	Probabilidad de falla del sistema 1	Probabilidad de falla del sistema 2	Probabilidad de falla del sistema 3	Riesgo resultado del AE (1/h)
0	0	1.03E-03	1.03E-03	1.03E-03	2.19E-12
1.00E-05	2.00E-05	1.04E-03	1.05E-03	1.05E-03	2.30E-12
2.00E-05	4.00E-05	1.05E-03	1.07E-03	1.07E-03	2.41E-12
3.00E-05	6.00E-05	1.06E-03	1.09E-03	1.09E-03	2.52E-12
4.00E-05	8.00E-05	1.07E-03	1.11E-03	1.11E-03	2.64E-12

Se eligieron los pasos, para este ejemplo, 1.0E-5 para el evento casa del sistema 1 y 2.0E-5 para los sistemas 2 y 3. Se eligen valores diferentes cuando los componentes de un sistema se pueden modificar más fácilmente que otro. Esto se debe a la disponibilidad de equipos en el mercado o propiamente por las funciones de los componentes ya presentes en el diseño que no pueden ser modificados.

En la Tabla III se puede observar que el último valor resultante del AE es 2.64E-12 / año, levemente mayor que el riesgo propuesto como objetivo, esto se debe a que los pasos elegidos para iterar son relativamente grandes, a medida que se reducen aumenta el número de iteraciones, la complejidad del cálculo y la precisión del resultado.

Al concluir las iteraciones cuando el riesgo resultante del AE no sea menor al propuesto como objetivo, los sistemas obtendrían su propio objetivo de indisponibilidad. Por lo tanto, la indisponibilidad objetivo para los tres sistemas sería 1.07E-3 para el sistema 1 y 1.11E-3 para los sistemas 2 y 3.

Cuando el riesgo del AE es mayor que el objetivo, se agrega un evento casa con probabilidad uno a través de una puerta AND con el resto del AF y, en lugar de que la probabilidad del sistema aumente con cada iteración, disminuiría, ver Fig 5.

La Tabla IV muestra cómo varía la probabilidad de falla del sistema, el riesgo resultante del AE y el valor de la probabilidad de cada evento casa para cada iteración, si el objetivo del AE es 2.15E-12 / año.

El paso elegido al azar, en este caso, fue para los tres eventos casas 3E-3. Se eligen valores iguales cuando los sistemas pueden modificarse en igual medida en el diseño.

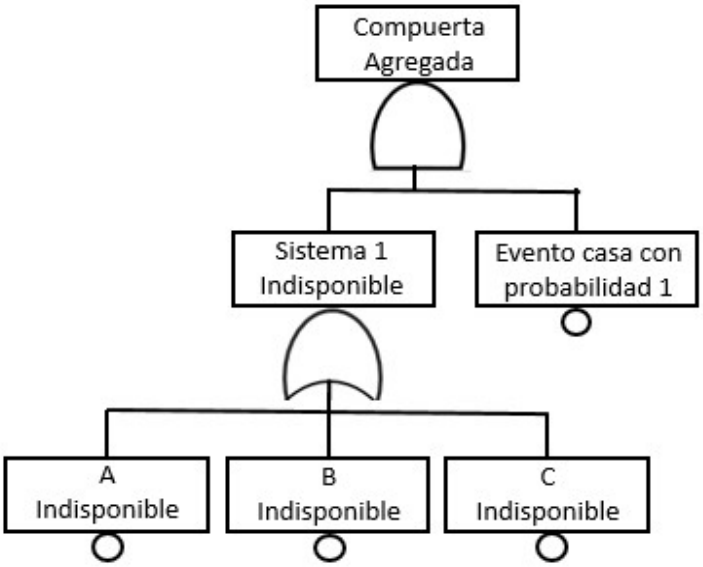


Figura 5: AF del Sistema 1, modificado por una compuerta AND

Tabla IV: Probabilidad de falla de los sistemas, el riesgo resultado del AE y la probabilidad de los eventos casas para 4 iteraciones

Probabilidad de los eventos casas 1,2 y 3	Probabilidad de los sistemas 1,2 y 3	Riesgo resultado del AE (/año)
1	1.030E-3	2.187E-12
9.97E-1	1.027E-3	2.168E-12
9.94E-1	1.024E-3	2.148E-12
9.91E-1	1.021E-3	2.129E-12
9.88E-1	1.018E-3	2.110E-12

Al final de las iteraciones cuando el riesgo resultante del AE no es mayor que el objetivo propuesto, los sistemas obtendrían su propio objetivo. Por lo tanto, el objetivo de indisponibilidad para los tres sistemas sería 1.018E-3.

El proceso iterativo podría resultar en ciertos cambios de diseño que impactan en una fuente específica de indisponibilidad y estos ejemplos ilustran el concepto. En una situación real, el proceso de diseño y el proceso de evaluación de indisponibilidad podría repetirse varias veces, ya que todas las indisponibilidades de otros sistemas analizados afectarían el equilibrio de los objetivos de origen, lo que resultaría en posibles cambios de diseño que afectarían a múltiples sistemas que se propondrán para cumplir con la cifra de origen.

4. ANÁLISIS DE INCERTIDUMBRE

En el análisis de la incertidumbre, tiene poco sentido poner demasiado énfasis en el error o la diferencia entre el riesgo resultante del AE debido a las iteraciones y su objetivo. Esto se debe a que en raras ocasiones el objetivo de un sistema y su diseño final coincidirá exactamente, debido a que la disponibilidad de componentes similares en el mercado es discreta, ver Tabla V. Sin embargo, debe ser lo suficientemente pequeño para no afectar a las posibles modificaciones en el diseño, por lo tanto, un criterio válido es que la diferencia entre el riesgo resultante del AE debido a las iteraciones y su objetivo sea menor que el menor cambio posible en el riesgo resultante del AE debido a un cambio de diseño.

Tabla V: Diferencias entre el riesgo del AE en el diseño final y su objetivo de 9.8E-10 /años, para posibles opciones del componente existentes en el mercado

Posibles opciones del componente en el mercado	Riesgo resultado del AE dado que se utiliza el componente (/años)	Diferencia entre el riesgo del AE en el diseño final y su objetivo (/años)
Opción 1 del componente	9.7E-10	1E-11
Opción 2 del componente	9.6E-10	2E-11

A medida que se reevalúa y perfecciona el diseño de cada sistema específico, puede haber diferencias entre la indisponibilidad del sistema y su objetivo propuesto. Es importante restablecer la indisponibilidad del sistema y recalcular los objetivos para el resto de los sistemas que participan en el AE. Esto disminuye las diferencias finales entre el objetivo propuesto para el AE y su riesgo resultado en el diseño final. Además propicia mayores márgenes para cambios en el diseño de los restantes sistemas. Las fuentes importantes de incertidumbre en este enfoque están asociadas con el mantenimiento, las pruebas y las inspecciones. Estos procesos operativos contribuirán a la indisponibilidad en todos los sistemas y componentes asociados y pueden variar de una etapa de diseño a otra.

Por otro lado, el estudio de las incertidumbres en el diseño final es similar a los que se realizan en los APS tradicionales. Estas incertidumbres provienen de los datos de fallas recopilados e ingresados en los eventos básicos a través de parámetros como la tasa de fallas. Estas incertidumbres se extienden, interviniendo en los resultados tanto en el cálculo de eventos topes, secuencias de eventos, como en el riesgo de la planta como tal. Los software para modelar APS realizan el análisis de incertidumbre utilizando diferentes métodos, como la simulación utilizando el Código Monte Carlo o el hipercubo latino [6,7]

5. TOMA DE DECISIONES

La toma de decisiones sobre qué objetivo de indisponibilidad elegir, en caso de que el cálculo dé como resultado diferentes objetivos por participar el sistema en varios AEs, no debería influir en gran medida en la proximidad entre el riesgo de la planta en el diseño final y su objetivo de riesgo. Debido al proceso iterativo, se finaliza el diseño de un sistema y se fija su AF,a medida

que se fijan los AFs de los sistemas diseñados se recalculan los objetivos de indisponibilidad para los sistemas restantes que participan en el AE y la diferencia entre el riesgo y su objetivo correspondiente se corrige a medida que avanza el diseño. Además, dado que el modelo se basa en una etapa de diseño bastante avanzada, en la que ya se ha realizado un APS en la planta, las diferencias entre los objetivos para un sistema calculado por un AE no pueden ser muy diferentes de los calculados por otro AE y apoyaría diseños más estandarizados.

Los costos también pueden ser afectados. Con respecto a los costos de diseño del sistema, un determinado componente se puede sustituir en un sistema, mientras que con otro objetivo de indisponibilidad podría no ser reemplazado (por ejemplo, un componente por otro más caro y confiable). Para ello, es de vital importancia que la toma de decisiones sea concebida por un equipo profesional, en el que participen especialistas en operación, especialistas en componentes, economistas, diseñadores y analistas de riesgos, para que juntos puedan encontrar el diseño más óptimo que se adapte a los objetivos de seguridad y producción de la planta.

De la misma manera, la toma de decisiones también puede influir en el análisis de incertidumbre ya que componentes con diferentes características e incertidumbres pueden evaluarse y posiblemente sustituirse para respaldar los objetivos de indisponibilidad del diseño, mientras que con otro objetivo de indisponibilidad el diseño de un componente puede no ser evaluado (por ejemplo, es posible que no se sustituya un componente). Sin embargo, si la diferencia entre un objetivo y otro para un sistema es pequeña, la diferencia en los cambios en el diseño del sistema en relación con la indisponibilidad también será pequeña y por tanto no influirá casi en la incertidumbre del riesgo de la planta.

6. COSTOS DE COMPONENTES

Para la optimización de costos de sistemas se tienen en cuenta tanto los costos iniciales de construcción como los de operación (costos de mantenimientos, pruebas, etc.) a lo largo de la vida de la planta. El costo inicial ($C_{inicial}$) incluye todos los costos asociados al componente antes de comenzar a operar la central y que pueden hacer diferencias económicas con otro componente semejante que exista en el mercado. Es la suma del costo del componente (C_{comp}), el costo del transporte (C_{trans}) desde donde se produce hasta donde se quiere construir la central y el costo de instalación (C_{inst}), ver ecuación 3.

$$C_{inicial}=C_{comp}+C_{trans}+C_{inst} \tag{3}$$

El costo de operación (C_{op}), ver ecuación 4, es la suma del costo por mantenimiento (C_{mant}), costo de pruebas ($C_{pruebas}$) y gastos de energía (C_{ef}) si el componente participa en la producción, si el componente pertenece a un sistema de seguridad, las pérdidas económicas por eficiencia pierden sentido pues se utiliza el componente en raras ocasiones y en cortos períodos de tiempo.

De forma general, hay que incluir todos los costos que pueden hacer diferencias económicas en la utilización de un componente u otra opción que exista en el mercado.

$$C_{op}=C_{mant}+C_{pruebas}+C_{ef} \tag{4}$$

$$C_{mant}=FM*VP*Mant \tag{5}$$

$$C_{pruebas}= FP*VP*Pr \tag{6}$$

$$C_{ef}=G*TO*VP \tag{7}$$

Donde:
C_{mant}: costo asociado al mantenimiento del componente durante la vida de la planta, igual a la frecuencia del mantenimiento (FM) por la vida de la planta (VP) por el costo medio de cada mantenimiento (Mant), ver ecuación 5.

$C_{pruebas}$: costo asociado a las pruebas del componente durante la vida de la planta, igual a la frecuencia de las pruebas (FP) por la vida de la planta (VP) por el costo medio de cada prueba (Pr), ver ecuación 6. En caso de que el componente sea monitoreado continuamente se puede agregar el gasto de energía de la instrumentación durante la vida de la planta, semejante a la ecuación 7 y en $C_{inicial}$ sumar el costo de la instrumentación.

C_{ef}: es el gasto de energía asociado al componente durante la vida de la planta, se utiliza en componentes asociados a la producción donde la eficiencia de estos juega un papel importante en los costos de operación. Igual al costo de la energía que gasta el componente por unidad de tiempo (G) por el tiempo medio de operación del componente en el año (TO) por la vida de la planta (VP), ver ecuación 7.

7. CARACTERÍSTICAS DE LA OPTIMIZACIÓN

A continuación se describen las características de la optimización de los costos asociados a componentes en sistemas.

Función objetivo:

-minimizar el costo total asociado al valor de los componentes en el sistema (teniendo en cuenta costos de inversión inicial y costos de operación).

Restricciones:

1-la indisponibilidad del sistema tiene que ser menor o mayor, en dependencia de lo que se requiera, al objetivo de indisponibilidad propuesto.

2-si se tiene el componente1, con sus respectivos eventos básicos asociados (evento básico 1, evento básico 2), y cada evento básico tiene asociado dos probabilidades de fallas de dos opciones de componentes que existen en el mercado, evento básico 1:(probabilidad de falla 1, probabilidad de falla2) y evento básico 2:(probabilidad de falla 3, probabilidad de falla4), no tiene sentido calcular en la ecuación de falla (los conjuntos mínimos de corte) del sistema combinaciones que relacionen, por ejemplo, al evento básico 1 con la probabilidad de falla 1 y al evento básico 2 con la probabilidad de falla 4, porque significaría que se colocan las dos opciones existentes en el mercado para el componente al mismo tiempo. Por tanto, es necesario eliminar todas las combinaciones de este tipo en la ecuación de falla del sistema.

3-el valor de la probabilidad de cada evento básico y el objetivo de indisponibilidad tiene que estar entre 0 y 1.

8. CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelo mediante el cual es posible proponer objetivos de indisponibilidad para los sistemas, en base a un determinado objetivo de riesgo propuesto para la planta, con la intención de informar el riesgo del diseño en fases clave en el desarrollo del diseño de la instalación. El modelo es un proceso iterativo caracterizado por la modificación de probabilidades de eventos básicos dentro de los árboles de fallas, lo que lleva al establecimiento de los objetivos de indisponibilidad. Se identificó la necesidad de software para resolver esto y se desarrolló un programa. Si bien el programa es preliminar, es capaz de realizar los cálculos iterativos requeridos, dado un árbol de eventos que contiene varios sistemas de mitigación. Además, se mostraron las bases teóricas para desarrollar un modelo de optimización de costos para los sistemas dado que se tiene el objetivo de indisponibilidad.

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a la UNAM, particularmente al Posgrado de Ingeniería por permitir y aprobar esta investigación y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico otorgado.

REFERENCIAS

1. Página del Bulletin of the Atomic Scientists, https://thebulletin.org/2019/06/why-nuclearpower-plants-cost-so-much-and-what-can-bedone-about-it (2019)
2. Página de Synapse, Energy Economic, https://www.synapse-energy.com/sites/default/files/SynapsePaper.2008-07.0.Nuclear-Plant-Construction-Costs.A0022_0.pdf (2008)
3. Página de la IAEA, https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/33/024/33024739.pdf?r=1&r=1 (2002)
4. Página de Nuclear World Association. https://www.world-nuclear.org/information-library/country-profiles/countries-t-z/usa-nuclear-power.aspx (2020).
5. Página de ASME, https://www.asme.org/codes-standards/find-codes-standards/ra-s-1-4-probabilistic-risk-assessment-standard-advanced-non-lwr-nuclear-power-plants-standard-trial-use (2013)
6. Cox, D. C., & Baybutt, P. “Methods for Uncertainty Analysis : A Comparative Survey” Wiley Online Library (1981)
7. Página de la NRC https://www.nrc.gov/docs/ML1119/ML11195A299.pdf (2011)

Impacto de la Pérdida del Sistema RCIC a Distintos Tiempos durante la Pérdida de Potencia Externa en un BWR

Eduardo Martínez Caballero, Rodolfo Amador García, Rogelio Castillo Durán, Jorge Viais Juárez y Javier Ortiz Villafuerte
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera Federal México a Toluca La Marquesa s/n,
Ocoyoacac Estado de México C.P. 52750
eduardo.martinez@inin.gob.mx; rodolfo.amador@inin.gob.mx; rogelio.castillo@inin.gob.mx; jorge.viais@inin.gob.mx; javier.ortiz@inin.gob.mx

Resumen

Como parte de las actividades encaminadas al análisis de las consecuencias de los accidentes graves de una central nucleoeléctrica con reactor de agua en ebullición, el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, a través del Grupo de Análisis Termohidráulico y de Seguridad de Reactores Nucleares del Departamento de Sistemas Nucleares ha realizado el proceso de simular eventos de la pérdida de potencia externa e interna sin los sistemas de emergencia de la misma y con pérdida del sistema de enfriamiento del núcleo con el reactor aislado a 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5 y 4.0 horas después de iniciado el evento, realizado con el código de cómputo Modular Accident Analysis Program versión 5.05. Se realizo la simulación del estado estacionario para verificar que satisface la estabilidad de los parámetros del modelo a valores nominales de operación, posteriormente se presentan resultados preliminares de la progresión del accidente dentro de la Vasija de Presión de Reactor y en el Contendor Primario (Pozo Seco y Pozo Húmedo), una vez dada la pérdida de refrigeración, y en forma gráfica, además de tiempos importantes para toma de decisiones, como los tiempos de falla de la Vasija de Presión de Reactor, tiempos cuando se alcanzan umbrales de concentración de hidrógeno, etc.

1. INTRODUCCIÓN

El código de cómputo MAAP5 (de sus siglas en inglés Modular Accident Analysis Program, versión 5) ha sido desarrollado por el Instituto Estadounidense Electric Power Research Institute (EPRI) para proporcionar una herramienta de análisis para las consecuencias de una amplia gama de transitorios y accidentes severos en los diseños actuales de los reactores de agua ligera, además de la alberca de combustible gastado, y se puede utilizar para hacer lo siguiente [1]:

- Predecir el momento de eventos claves como son: el descubrimiento del núcleo, el daño al núcleo, la reubicación del núcleo al pleno inferior y la falla de la vasija.
- Evaluar la influencia de los sistemas de mitigación, incluyendo el impacto al momento de su operación.

- Evaluar los efectos de las acciones del operador.
- Predice la magnitud y el tiempo de la liberación de productos de fisión.
- Incertidumbres en la fenomenología de los accidentes severos.
- Escenarios de accidentes en la alberca de combustible gastado (SFP).
- Calcula dosis de irradiación dentro y fuera de la planta utilizando MAAP5-DOSE.

Actualmente el ININ ha desarrollado los archivos de parámetros y de entrada del código de cómputo MAAP5, los cuales son representativos de un modelo integral de una Central Nucleoeléctrica con un Reactor de Agua en Ebullición. La información contenida en los archivos antes mencionados está distribuida de la siguiente forma:

a) Parámetros de control
   - Parámetros de control de entrada
   - Modelos
   - Parámetros químicos del iodo
   - Concreto
   - Entre otros.
b) Parámetros del núcleo del reactor
   - Productos de fisión
   - Calentamiento
c) Parámetros del sistema primario y sistemas de seguridad
   - Condiciones iniciales
   - Sistema primario
   - Las funciones de ingeniería de salvaguarda
   - Entre otros.
d) Parámetros de la contención y auxiliares
   - Información de los compartimentos
   - Topología
   - Tipo de materiales
   - Distribución de los sumideros de calor
   - Modelo de falla de la contención.
   - Entre otros.
e) Parámetros específicos de planta
f) Parámetros de eventos
g) Alberca de combustible gastado

La finalidad de tener los archivos de parámetros y entrada es para poder llevar a cabo los análisis correspondientes a una serie de accidentes severos. Por tal motivo, se realizó las simulaciones de la pérdida de potencia externa e interna sin la intervención de los sistemas de emergencia que pueden operar con alta o baja presión en la vasija del reactor, además se postuló la pérdida a distintos tiempos del sistema auxiliar RCIC para el Reactor de Agua en Ebullición simulado, cabe mencionar que el objetivo de estás simulaciones ha sido detectar información deficiente de los sistemas de planta, errores en los archivos de parámetros y de entrada correspondientes al modelo integral de planta, así como posibles deficiencias de los modelos de simulación del código.

2. DESCRIPCIÓN INTEGRAL DEL MODELO DE PLANTA DEL CÓDIGO MAAP5

En la Figura 1 se puede observar la distribución de la nodalización de los compartimentos del código de cómputo MAAP5 para una planta nuclear con un reactor de agua en ebullición y un contenedor MARK II, empleados en presente trabajo, dichos compartimentos son:

- El sistema primario considera el reactor nuclear hasta la primera válvula de aislamiento, el reactor contempla: cabezal superior, separadores/secadores, standpipes, cabezal de la envolvente, núcleo, cabezal inferior, downcomers, CRD y bombas jet o lazo de recirculación (Figura 2 y 3).
- La cavidad del pedestal es el espacio que está debajo de la vasija del reactor.
- El pozo seco es la sección cónica de la contención primaria.
- El pozo húmedo es la sección inferior de la contención primaria e incluye la alberca de supresión.
- Los downcomers conectan al pozo seco y pozo húmedo.
- Medio ambiente.

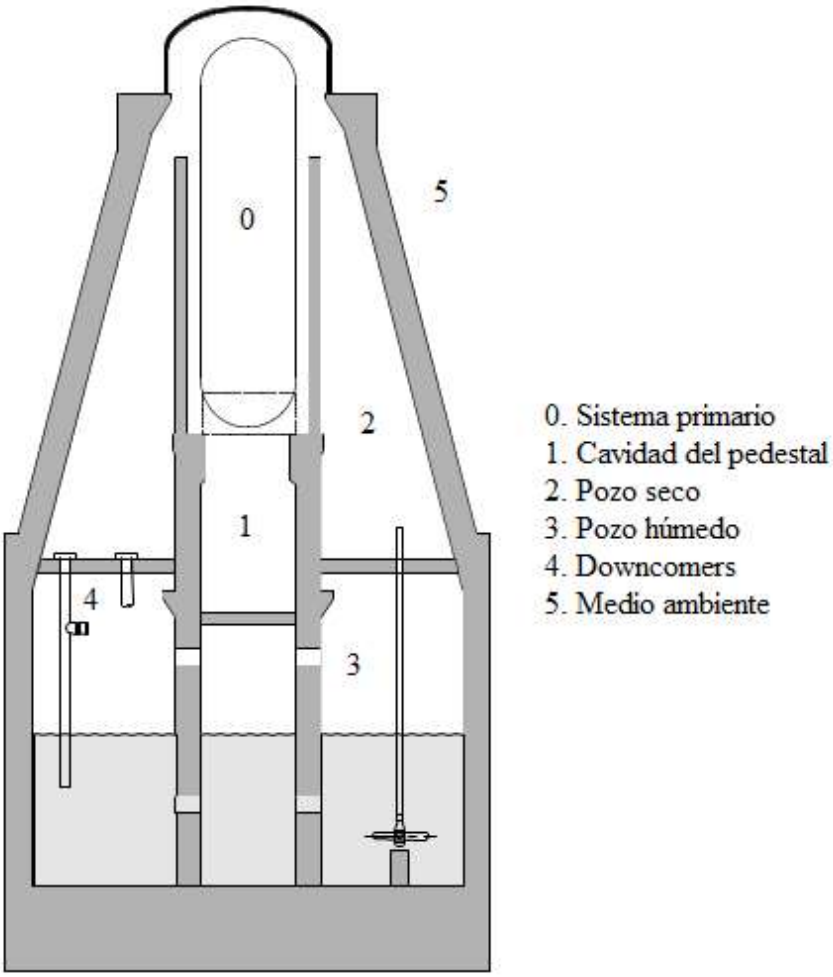


Figura 1. Modelado de los compartimientos de la contención MARK II con un reactor de agua en ebullición.

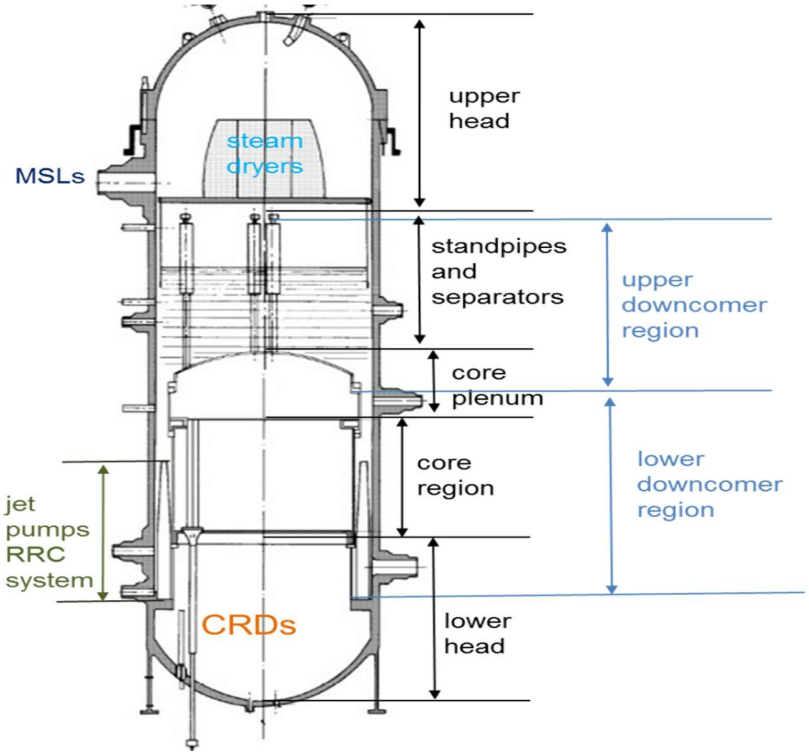


Figura 2. Nodalización dentro de la RPV

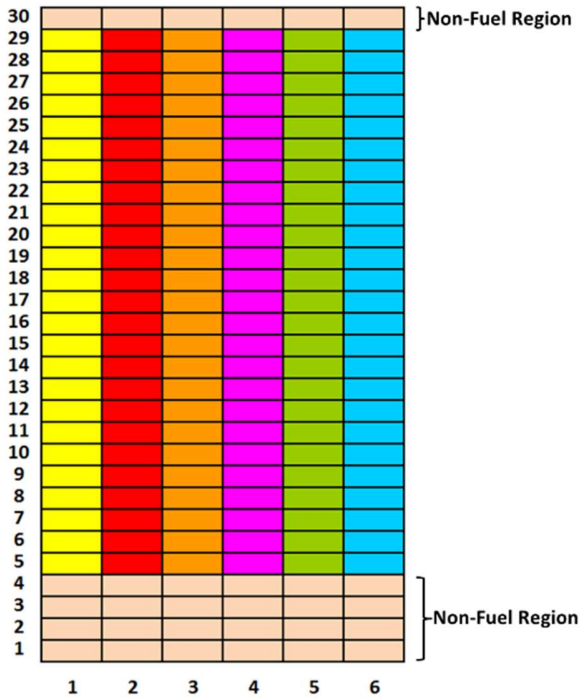


Figura 3. Nodalización de la región del núcleo

El diagrama de flujo del sistema primario de MAAP5 está representado por la nodalización que se muestra en la Figura 4 [2].

Figura 4. Diagrama de flujo del sistema primario.

Dependiendo de la configuración y de la progresión de un accidente, puede existir intercambio de masa y energía entre ellos, como tal como se ilustra en la Figura 5. Dichas estructuras, sistemas y componentes (ESC) tienen las siguientes conexiones:

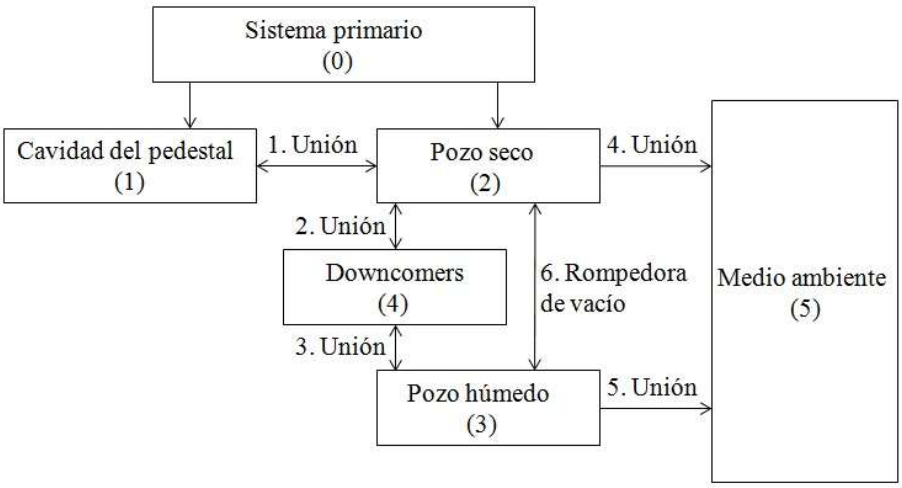


Figura 5. Conexiones de ESC en un contenedor MARK II.

3. SISTEMA DE ENFRIAMIENTO DEL NÚCLEO CON EL REACTOR AISLADO

En el presente trabajo, se han analizado una serie de simulaciones del evento SBO sin actuación de los sistemas de emergencia y con la pérdida del sistema de enfriamiento del núcleo con el reactor aislado (RCIC) a distintos tiempos de iniciado el accidente, por tal motivo en esta sección describiremos el sistema RCIC.

El RCIC tiene como objetivo el enfriamiento del núcleo independientemente de la actuación de cualquier sistema de emergencia de enfriamiento del núcleo (ECCS), en caso de que el reactor quede aislado del condensador principal, y/o exista una pérdida del agua de alimentación a la vasija. Este sistema inyecta agua del tanque de almacenamiento de condensado (TAC) a la vasija a través de un circuito principal y mediante una turbobomba que es impulsada por vapor proveniente de una de las líneas de vapor principal. El vapor de escape de la turbina es enviado a la alberca de supresión. La succión alterna del RCIC es de la alberca de supresión y se realiza cuando hay bajo nivel en el TAC o alto nivel en la alberca de supresión. La iniciación del sistema puede ser automática o manual [3].

El sistema RCIC puede prevenir el sobrecalentamiento del combustible del reactor durante las siguientes condiciones:

- La vasija sea aislada y se haya perdido el flujo de enfriamiento del sistema de agua de alimentación.
- Ocurra un disparo de planta bajo condiciones de pérdida del sistema de agua de alimentación normal, el RCIC iniciará antes que el reactor sea despresurizado hasta un nivel donde el sistema de enfriamiento disparado pueda ser puesto nuevamente en operación.

En el caso que el reactor sea aislado y el sistema de agua de alimentación no esté disponible, las SRV´s de las líneas de vapor principal (MSL's) mantendrán automáticamente la presión de la vasija dentro de límites deseables. El nivel de agua caerá debido a la continua generación de vapor por decaimiento de calor, tan pronto alcance un predeterminado nivel el sistema RCIC iniciará automáticamente.

Las señales de disparo de la turbina del RCIC son:

- Sobrevelocidad
- Alta presión en el escape de la turbina
- Baja presión en la succión de la bomba de vacío
- Señal de aislamiento del sistema
- Manual

Las señales de aislamiento del sistema RCIC son:

- Alta presión entre los diafragmas del escape de la turbina
- Baja presión del Reactor
- Alto flujo en la línea de vapor del RCIC
- Alta temperatura en el Cuarto de Equipo del RCIC
- Alta temperatura diferencial en el Cuarto de Equipo del RCIC

- Alta temperatura en el túnel de vapor al RCIC
- Alta temperatura diferencial en el túnel de vapor al RCIC
- Temporizador de flujo de vapor al RCIC
- Alto flujo en líneas del RCIC
- Iniciación manual

4. ESTADO ESTACIONARIO

La importancia de la simulación de un estado estacionario radica en estabilizar los parámetros del modelo a valores muy cercanos a los valores nominales de operación. La obtención del estado estacionario durante un tiempo determinado garantiza que el comportamiento de todos los parámetros del sistema no sea afectado por alguna perturbación numérica.

La norma ANSI/ANS-3.5-1998 *Simuladores de Plantas Nucleares Empleados para el Entrenamiento de Operadores* establece criterios de precisión sobre los valores de parámetros importantes que deben cumplir los modelos desarrollados para emplearse con códigos de "Mejor Estimación". Dicha norma establece que, para el caso de la potencia térmica promedio, el flujo a través del núcleo y la presión en el reactor, el error relativo no debe ser mayor al 1 % del valor nominal durante la ejecución del modelo durante 3600 segundos. Para la temperatura de agua de alimentación, flujo de vapor, flujo en cada lazo de recirculación, flujo de agua de alimentación, flujo en las bombas chorro y nivel de agua en el reactor, el valor del error relativo no debe ser mayor al 2 %" [4].

4.1. Comportamiento de Diferentes Parámetros Durante el Estado Estacionario

Derivado de los criterios mencionados en la sección anterior, fue realizada la simulación con el código MAAP5.05 durante 10,000 segundos para mostrar y verificar que el comportamiento del estado estacionario satisface las condiciones demandadas por la norma ANSI/ANS-3.5. La Tabla I muestra algunos parámetros obtenidos del estado estacionario con sus respectivos errores relativos, los cuales son menores al error del 1% y 2%.

Tabla I. Comparativo de valores obtenidos para el estado estacionario con MAAP5.

Parámetro		Error relativo (%)
Gasto másico de vapor principal	[kg/s]	0.118
Entalpía de Vapor	[Btu/lbm]	0.023
Gasto másico de agua de alimentación	[kg/s]	0.707
Potencia térmica en el núcleo	[MWt]	0.000
Gasto a la entrada al núcleo	[kg/s]	0.030
Presión en el domo de la vasija	[psia]	0.121
Gasto Másico en el CRD	[kg/s]	0.459
Nivel de refrigerante en la vasija	[m]	0.110

En las Figuras 6, 7, 8, 9, 10 y 11 se presentan los gráficos del gasto másico de vapor, gasto másico de agua de alimentación, potencia térmica en el núcleo, gasto a la entrada al núcleo, presión en el domo de la vasija y nivel de refrigerante en la vasija, respectivamente, obtenidos de la simulación del estado estacionario.

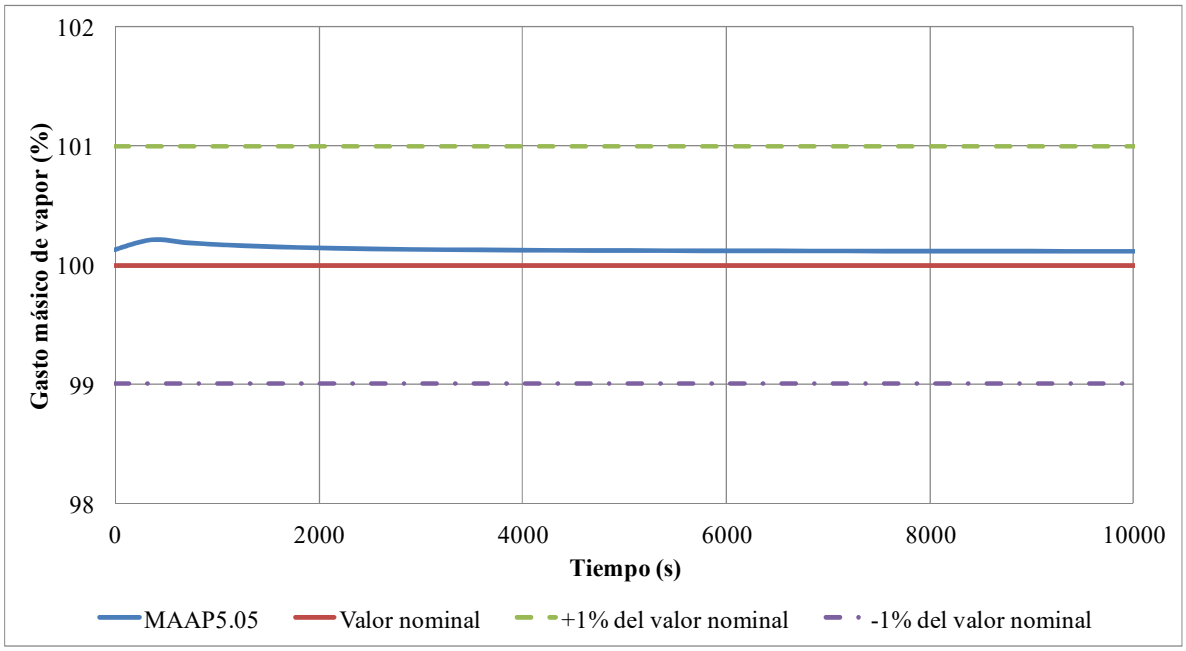


Figura 6. Gasto másico de vapor.

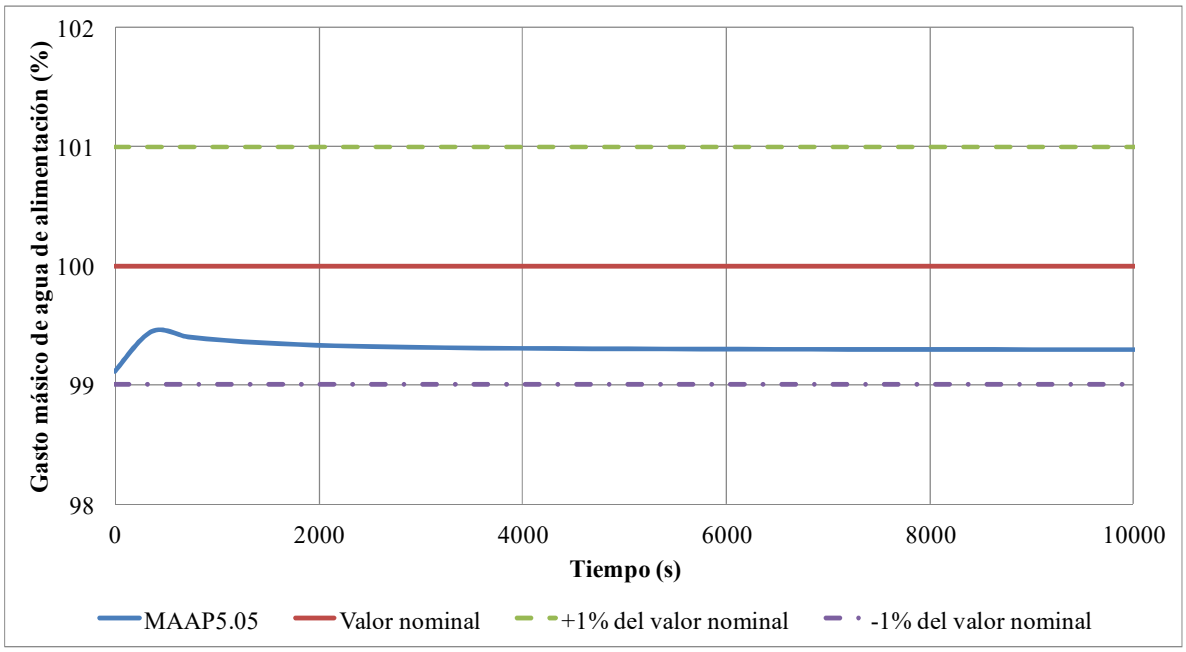


Figura 7. Gasto másico de agua de alimentación.

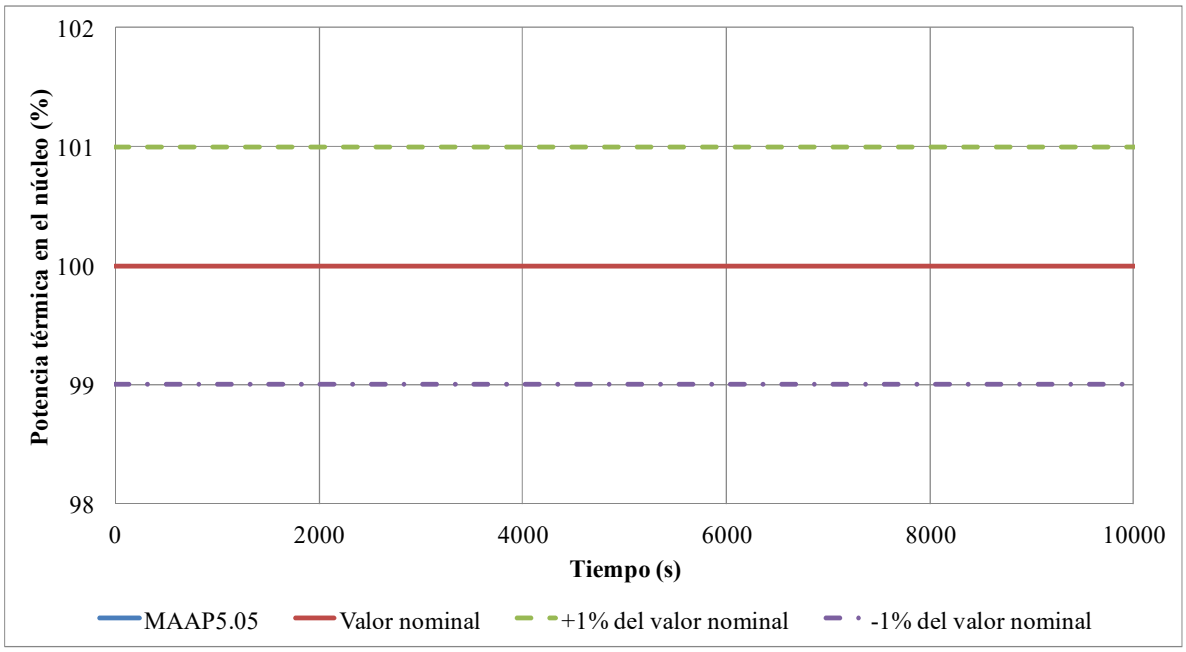


Figura 8. Potencia térmica en el núcleo.

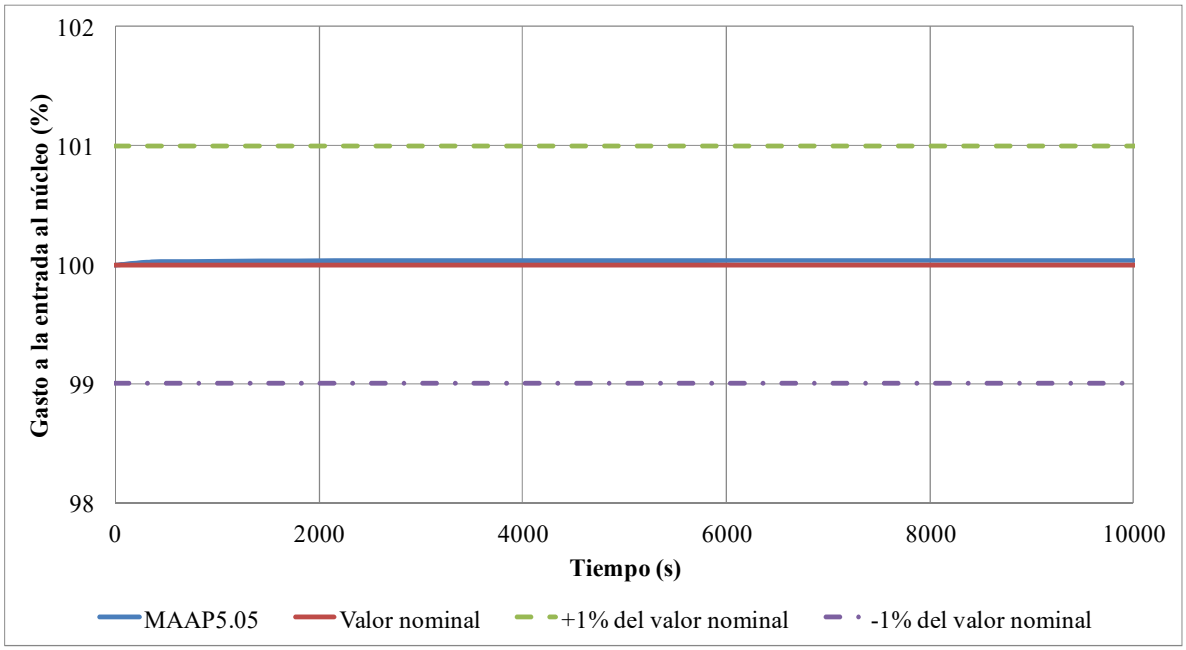


Figura 9. Gasto a la entrada al núcleo.

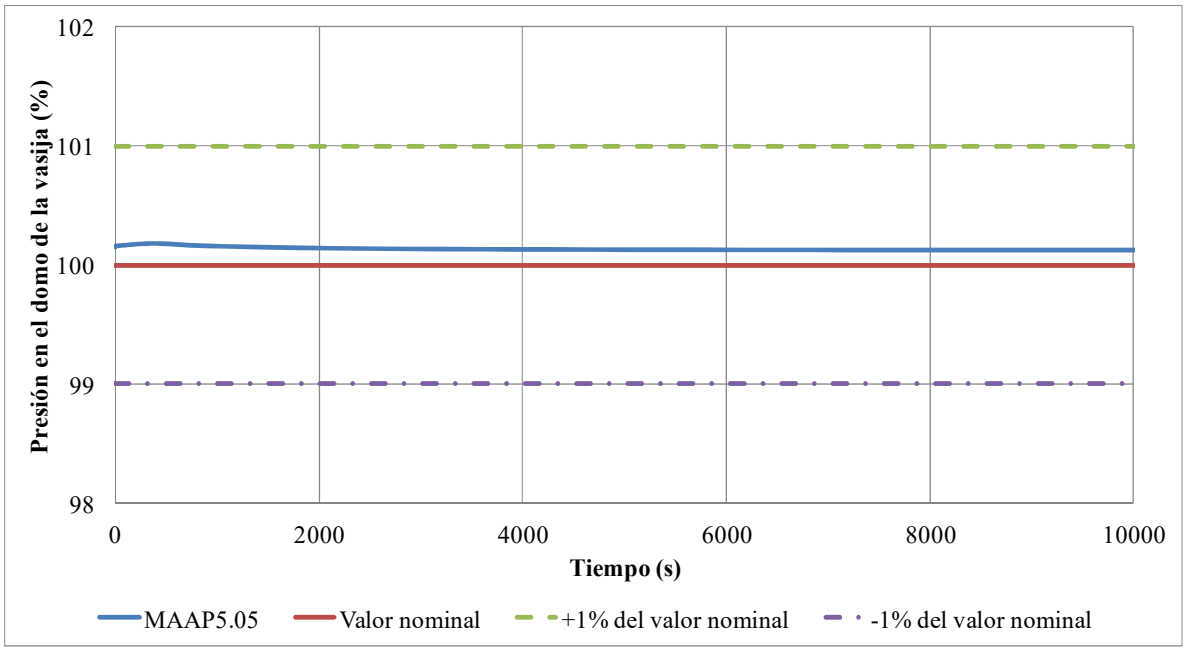


Figura 10. Presión en el domo de la vasija.

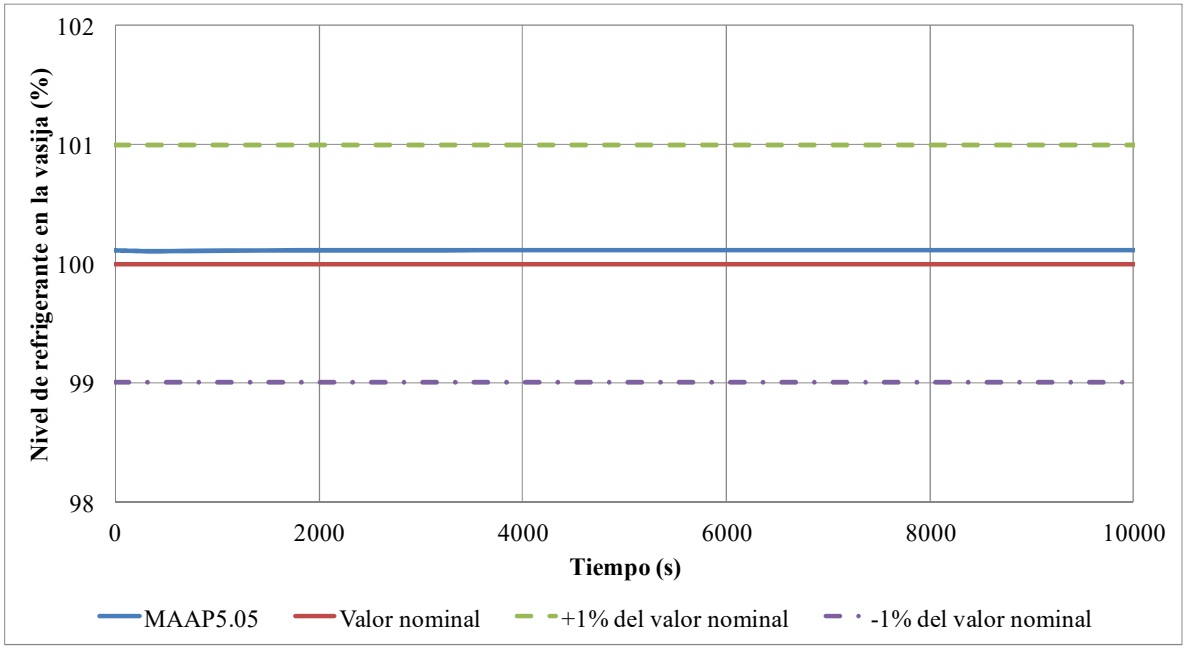


Figura 11. Nivel de refrigerante en la vasija.

5. DESCRIPCIÓN DE LOS ESCENARIOS

Todos los escenarios parten del estado estacionario a condiciones nominales, posteriormente se da el evento iniciador que es la pérdida de corriente externa y con ello el escenario de la pérdida de corriente de energía eléctrica externa e interna (LOOP) seguido con un disparo de turbina principal, pérdida de los sistemas de enfriamiento de emergencia: Sistema de Rociado del Núcleo

a Alta Presión (HPCS), Sistema de Rociado del Núcleo a Baja Presión (LPCS), Sistema de Inyección al Núcleo a Baja Presión (RHR-LPC), sistema de enfriamiento de la contención, sistema de inyección de agua de alimentación, generadores diesel, RWCU y sistema de recirculación.

Debido al rechazo de carga se da el disparo de la turbina principal, además cierran las Válvulas de Aislamiento de las Líneas de Vapor (MSIV´s) y la Válvulas de Bypass (BPV's) debido a la pérdida de potencia externa, seguido por un SCRAM a consecuencia del cierre de válvulas de paro o de control, y posteriormente al incrementarse la presión en la vasija del reactor por el cierre de las válvulas de paro, control o MSIV, se inicia la apertura de las válvulas de seguridad y alivio (SRV) un su modo alivio hasta la falla de la vasija.

La pérdida de corriente externa e interna en combinación con la falla de todos los generadores diesel se le llama pérdida total de corriente alterna (SBO del inglés Station Blackout) [5] y en todos los casos simulados (SBO-A, SBO-B, SBO-C, SBO-D, SBO-E, SBO-F, SBO-G y SBO-H) el único sistema en operación es el RCIC y en la Tabla II se pueden observar los tiempos de actuación del RCIC.

Tabla II. Tiempo de operación del RCIC para cada caso simulado.

SBO-A	SBO-B	SBO-C	SBO-D	SBO-E	SBO-F	SBO-G	SBO-H
0.5 h	1.0 h	1.5 h	2.0 h	2.5 h	3.0 h	3.5 h	4.0 h

6. RESULTADOS

La Tabla III muestra los resultados de los tiempos de falla de la vasija del reactor y del venteo de la contención primaria para los diferentes casos, en los que existe una disponibilidad parcial del sistema RCIC. Es claro que al no tener manera de enfriar al núcleo adecuadamente durante la progresión del evento lleva a fallos tempranos de la vasija del reactor, pero también se muestra que tener disponibilidad de sistemas RCIC desde un principio no garantizará la integridad del reactor o la contención primaria a largo plazo.

Tabla III. Tiempos de falla de la Vasija del Reactor y venteo del Contendor Primario

Caso	Tiempo de fallo de la vasija (s)	Tiempo de venteo del Contendor Primario (s)
SBO-A	19717.627	26451.698
SBO-B	21620.343	22275.409
SBO-C	27788.332	27881.084
SBO-D	26798.327	26840.500
SBO-E	30256.781	30271.800
SBO-F	34296.756	34312.800
SBO-G	36572.576	36599.700
SBO-H	36261.223	36287.500

Las Tablas IV y V, se muestran los tiempos en los que se fueron dando los distintos estados de planta para los casos mencionados, además se puede ver la asignación de color que se utilizó para distinguir cada estado de planta.

Tabla IV. Estados de planta de los casos SBO-A, SBO-B, SBO-C y SBO-D.

Estado de planta		SBO-A	SBO-B	SBO-C	SBO-D
		Tiempo (s)	Tiempo (s)	Tiempo (s)	Tiempo (s)
1	Seguro	10.072	10.072	10.072	10.072
2	Abajo del nivel 3	2667.235	4198.291	6992.543	9360.921
3	Núcleo dañado	7457.227	9007.836	12911.230	14020.299
4	Debris en fondo de vasija	7507.832	9056.776	12950.634	14053.156
5	Fallo de la placa soporte del núcleo	14981.343	14679.693	18291.263	20703.274
6	Peligro que ocurra fallo de vasija	15076.281	14933.946	21164.663	20808.669
7	Fallo de vasija	19717.627	21620.343	27788.332	26798.327
8	Concentración de H2 > 5% dw	8979.775	10519.591	14829.974	15945.472
9	Concentración de H2 > 10% dw	10391.240	10752.293	16815.966	18529.513
10	Concentración de H2 > 15% dw	14895.483	14511.951	18285.232	20703.516
11	Concentración de H2 > 20% dw	26753.429	15094.574	20981.150	21391.821
12	Concentración de H2 > 5% ww	8173.577	9597.934	13189.875	14184.812
13	Concentración de H2 > 10% ww	8355.156	9767.906	13556.136	14329.735
14	Concentración de H2 > 15% ww	8536.734	9937.878	13899.128	15202.511
15	Concentración de H2 > 20% ww	8677.695	10104.736	14098.604	15373.581
16	Peligro de falla del contenedor	19721.610	21623.946	27792.465	26802.824
17	Explosión de vapor	19724.144	21626.319	27795.583	26805.977
18	Presión del pozo seco > 0.32 MPa	26451.700	22275.400	27881.100	26840.500

Tabla V. Estados de planta de los casos SBO-E, SBO-F, SBO-G y SBO-H.

Estado de planta		SBO-E	SBO-F	SBO-G	SBO-H
		Tiempo (s)	Tiempo (s)	Tiempo (s)	Tiempo (s)
1	Seguro	10.072	10.072	10.072	10.072
2	Abajo del nivel 3	10989.483	12980.365	15184.752	15184.814
3	Núcleo dañado	17215.998	18047.441	21901.340	21901.091
4	Debris en fondo de vasija	17245.308	18076.588	21929.790	21928.373
5	Fallo de la placa soporte del núcleo	23259.359	24754.681	39869.427	28454.626
6	Peligro que ocurra fallo de vasija	23495.527	25206.206	29411.846	28884.807
7	Fallo de vasija	30256.781	34296.756	36572.576	36261.223
8	Concentración de H2 > 5% dw	18841.026	19265.494	23813.475	23553.578

9	Concentración de H2 > 10% dw	19013.731	20390.255	24698.210	26449.499
10	Concentración de H2 > 15% dw	21357.626	24661.797	28913.990	28663.470
11	Concentración de H2 > 20% dw	23216.500	25474.799	29476.333	30971.742
12	Concentración de H2 > 5% ww	17609.440	18653.624	22257.806	22254.012
13	Concentración de H2 > 10% ww	17900.494	18819.181	22958.005	22768.683
14	Concentración de H2 > 15% ww	18463.065	18931.268	23094.805	22882.658
15	Concentración de H2 > 20% ww	18623.231	19043.355	23163.567	22996.632
16	Peligro de falla del contenedor	30260.076	34299.722	36576.887	36264.976
17	Explosión de vapor	30259.890	34299.570	36580.015	36267.847
18	Presión del pozo seco > 0.32 MPa	30271.800	34312.800	36599.700	36287.500

Las Tablas VI, VII y VIII la evolución de los estados de planta, inicial (IS) y final (FS), durante las primeras 11 horas de las 72.5 horas simuladas de cada caso con intervalos de 0.5 horas, dentro de la vasija del reactor y en la contención primaria (pozo seco y pozo húmedo), respectivamente.

Tabla VI. Estados de planta inicial y final dentro de la vasija del reactor.

Tiempo (h)		SBO-A		SBO-B		SBO-C		SBO-D		SBO-E		SBO-F		SBO-G		SBO-H	
		IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS
0.0	0.5																
0.5	1.0																
1.0	1.5																
1.5	2.0																
2.0	2.5																
2.5	3.0																
3.0	3.5																
3.5	4.0																
4.0	4.5																
4.5	5.0																
5.0	5.5																
5.5	6.0																
6.0	6.5																
6.5	7.0																
7.0	7.5																
7.5	8.0																
8.0	8.5																
8.5	9.0																
9.0	9.5																

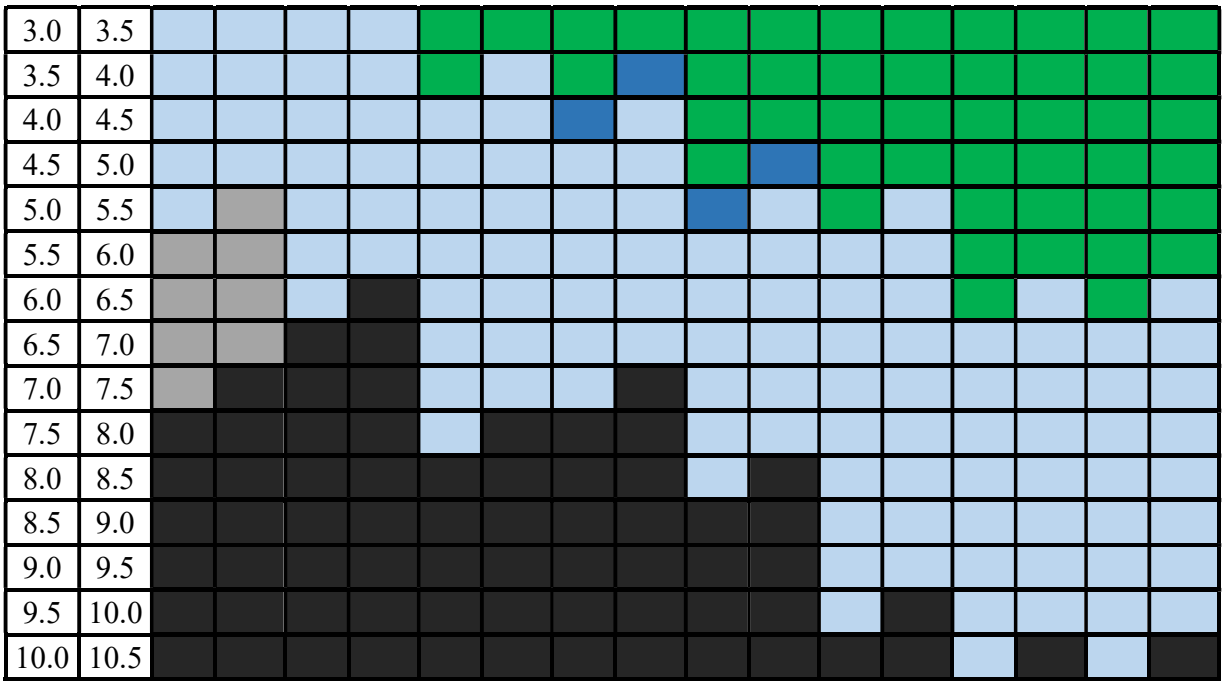
9.5	10.0																
10.0	10.5																

Tabla VII. Estados de planta inicial y final dentro del pozo seco.

Tiempo (h)		SBO-A		SBO-B		SBO-C		SBO-D		SBO-E		SBO-F		SBO-G		SBO-H	
		IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS
0.0	0.5																
0.5	1.0																
1.0	1.5																
1.5	2.0																
2.0	2.5																
2.5	3.0																
3.0	3.5																
3.5	4.0																
4.0	4.5																
4.5	5.0																
5.0	5.5																
5.5	6.0																
6.0	6.5																
6.5	7.0																
7.0	7.5																
7.5	8.0																
8.0	8.5																
8.5	9.0																
9.0	9.5																
9.5	10.0																
10.0	10.5																

Tabla VIII. Estados de planta inicial y final dentro del pozo húmedo.

Tiempo (h)		SBO-A		SBO-B		SBO-C		SBO-D		SBO-E		SBO-F		SBO-G		SBO-H	
		IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS	IS	FS
0.0	0.5																
0.5	1.0																
1.0	1.5																
1.5	2.0																
2.0	2.5																
2.5	3.0																



En la Figuras 12 se muestran los resultados de las masas obtenidas del núcleo fundido y debris acumulado en el fondo de la vasija del reactor, y podemos ver que al momento en que se da la falla de la vasija las masas se van a cero para cada caso, lo anterior es debido al desplome del material acomunado hacia el pedestal.

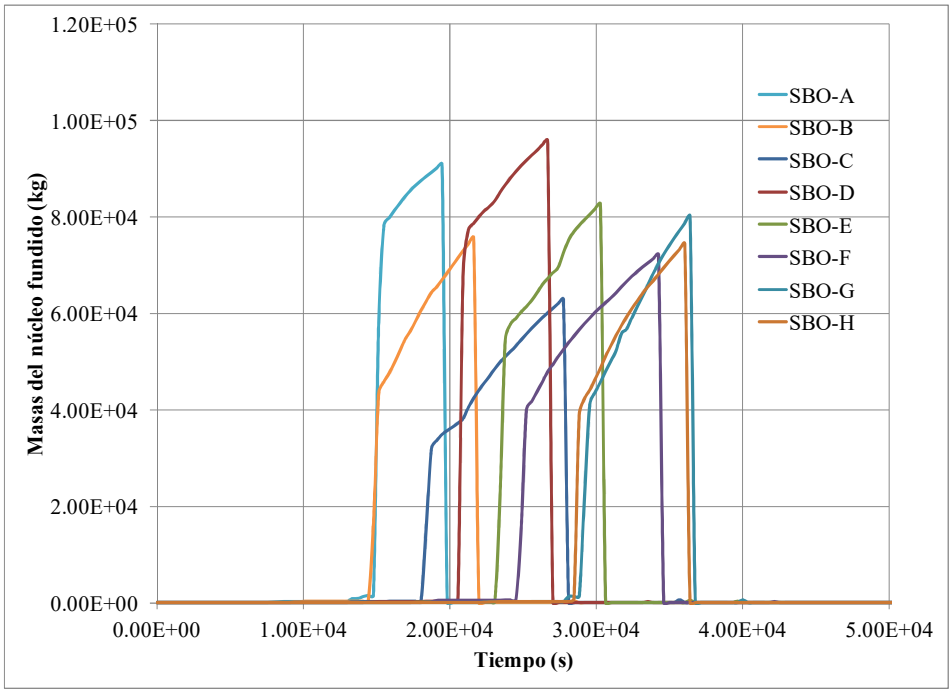


Figura 12. Masas del núcleo fundido y debris en el fondo de la vasija del reactor.

El comportamiento de los productos de fisión en el sistema primario es exhibido en la Figura 13, los cuales se acumulan dentro de la vasija del reactor, pero una vez que está falla comienzan a moverse hacia los distintos compartimientos. Y finalmente en la Figura 14 se presenta la masa total de hidrógeno generado por el núcleo, en cada caso simulado.

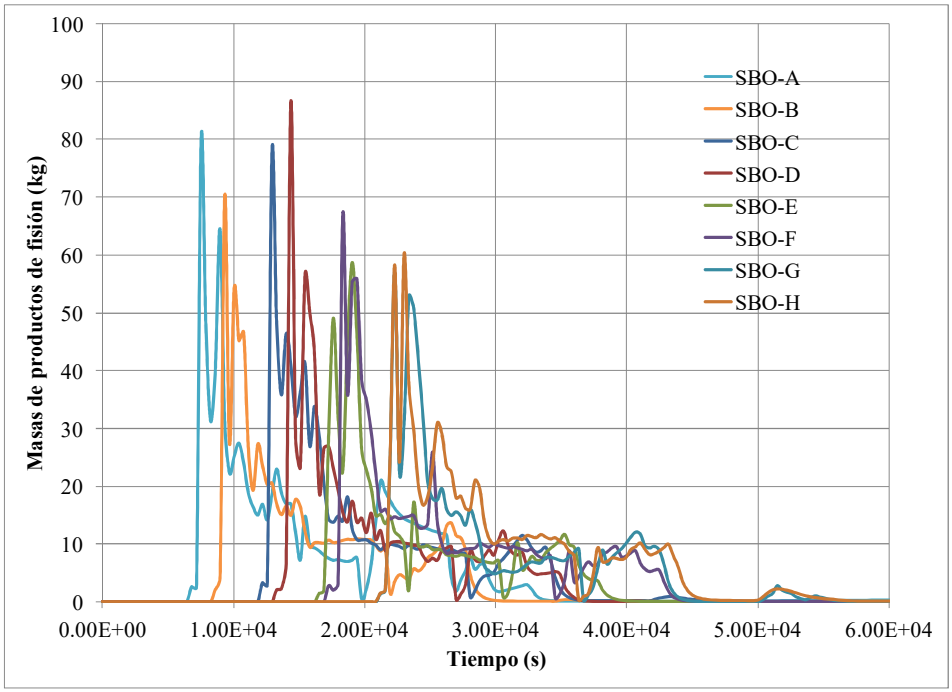


Figura 13. Masas de productos de fisión en el sistema primario.

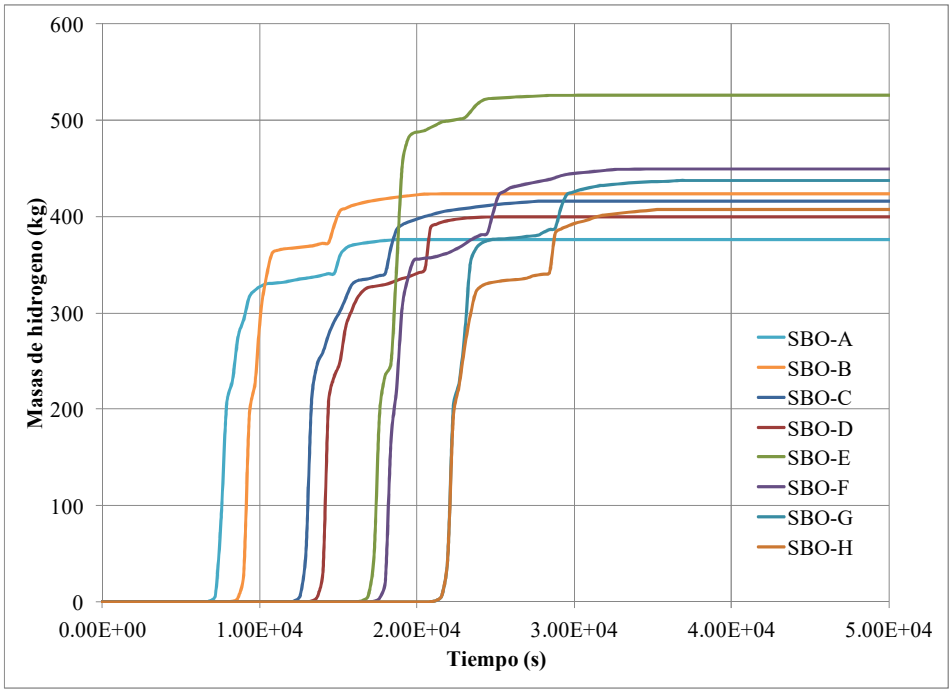


Figura 14. Masas de hidrogeno generado en el núcleo del reactor.

4. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos de la actualización y ejecución del estado estacionario, realizado con el código MAAP5.05, están dentro del intervalo de validez, acorde con la normativa ANSI/ANS-3.5 empleada como referencia.

El análisis del evento SBO sin la operación de los sistemas de emergencia para un reactor BWR/5 con Contendor Primario Mark II cumple con el "coping time" de 4 horas de acuerdo a lo que indicado por el NRC 10 CFR 50.63, con dicho análisis se está en la posibilidad de rehacer el análisis para extender ese coping time a 8 horas, como ha sido sugerido por el Órgano Regulador.

El análisis del evento SBO con la operación parcial o pérdida del RCIC evidencia que la vasija del reactor fallará y que será inevitable el venteo del contenedor primario, por tal motivo también se deben analizar otros escenarios correspondientes al SBO como pueden ser las estrategias FLEX, considerando que se presenta un SBO sin mitigación, pero que al cabo de cierto tiempo de iniciado el evento se puede inyectar refrigerante de manera continua, y la vasija del reactor se puede ir despresurizando a diferentes tiempos.

En las simulaciones del SBO con la operación del sistema RCIC y sin sistemas de emergencia de un reactor de agua en ebullición realizado con el código MAAP5.05 en el ININ, se implementaron algunas mejoras correspondientes al archivo de parámetros, resaltando la revisión y actualización realizada a:

- Sistema RCIC
- SRV
- Topología relacionada al venteo del pozo seco
- Topología relacionada al venteo del pozo húmedo

Además, se elaboró una serie de 8 archivos tipo "Include" para sistematizar el manejo de la información y la ejecución del código MAAP.

AGRADECIMIENTOS

Los autores reconocen el apoyo del Fondo de Sustentabilidad Energética SENER-CONACYT al proyecto FSE-2013-04-213519, del cual este trabajo forma parte de los Entregables del proyecto.

REFERENCIAS

1. EPRI, "Modular Accident Analysis Program 5 (MAAP5) Applications Guidance, Desktop Reference for Using MAAP5 Software—Phase 3 Report", Technical Report, November 2017.
2. Fausky & Associates, inc., "BWR MARK II Users Guide Modular Accident Analysis Program (MAAP)", Electric Power Research Institute (November 2008).
3. Informe Final de Seguridad Laguna Verde, LVNPS-1&2 FSAR.

4. U.S. Nuclear Regulatory Commission "Nuclear Power Plant Simulators for Use in Operator Training and Examination", ANSI/ANS-3.5-1998 (April 1998).
5. U.S.N.R.C., "Station Blackout Accident Analyses (Part of NRC Task Action Plan A-44)", NUREG/CR3226, May 1983.

AZTUSIA: AZtlan Tool for Uncertainty and SensItivity Analysis

Melisa del Carmen Reyes Fuentes y Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. IPN s/n, Col. Lindavista, México, Ciudad de México, 03020, México.
melisa@esfm.ipn.mx; evalle@ipn.mx

Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, Departamento de Sistemas Nucleares
Carretera México Toluca S/N, La Marquesa, Municipio de Ocoyoacac, Edo. de México, 5275, México.
armando.gomez@inin.gob.mx.

Resumen

El proyecto **AZTLAN Plataform** es una iniciativa nacional mexicana que tiene como objetivo contar con una plataforma para el análisis y diseño de reactores nucleares. Para mejorar la Plataforma **AZTLAN** con capacidades de mejor estimación más incertidumbre (BEPU: Best Estimate Plus Uncertainty), el código **AZTUSIA** (**AZ**tlan **T**ool for **U**ncertainty and **S**ensItivity **A**nalysis) ha sido desarrollado. **AZTUSIA** proporciona las capacidades BEPU para cumplir con los requisitos de licencia para preparar las herramientas desarrolladas para cálculos de mejor estimación (BE- Best Estimate). En este artículo, se describe brevemente el código **AZTUSIA**, sus principales características y capacidades. Por medio de herramientas de sensibilidad, es posible evaluar la influencia de la incertidumbre en los cálculos y distinguir tendencias de los resultados. Como conclusión principal, se ha desarrollado una nueva herramienta e incluida en la plataforma **AZTLAN** que permite el análisis de sensibilidad e incertidumbre no solo para los códigos internos sino también para cualquier código debido a la versatilidad de **AZTUSIA**.

1. INTRODUCCIÓN

El análisis de secuencias transitorias y accidentales, el cual evalúa el comportamiento de una central nuclear durante una secuencia, es un aspecto fundamental de la seguridad nuclear, ya que el objetivo principal de un Análisis de Seguridad es demostrar que existe un margen suficiente entre los valores reales de los parámetros más importantes y los valores umbrales a los que las barreras contra la liberación de radiactividad fallan. En la actualidad, existen dos enfoques de concesión de licencias: conservador y de mejor estimación. El "enfoque conservador" (conservative approach) involucra hipótesis y códigos conservadores para obtener la respuesta de la planta durante una secuencia accidental. El "enfoque de Mejor Estimación" (Best Estimate approach) reduce el uso de conservadurismo y proporciona valores más realistas, sin embargo, para aceptar este enfoque para la concesión de licencias, se requiere que se identifiquen y evalúen

las incertidumbres relacionadas con la simulación del accidente para que se pueda estimar la incertidumbre en los resultados calculados por lo que este enfoque recibió el nombre de enfoque Mejor Estimación Más Incertidumbre (BEPU: Best Estimate Plus Uncertainty)[1], [2].

Las predicciones de los códigos son inciertas debido a varias fuentes de incertidumbre, como son, incertidumbres del código y/o el modelo, incertidumbres de representación (modelización), incertidumbre debido a los datos utilizados de experimentos a escala, incertidumbre de los parámetros de la planta e incertidumbre debido al efecto usuario, [3] [4]. Un elemento común entre todos los métodos BEPU es que siguen dos pasos principales. El primero es la identificación y cuantificación de la incertidumbre de entrada y, en segundo lugar, la cuantificación de la influencia combinada de las entradas en las Figuras de Mérito (FoMs -Figure of Merits) de salida clave seleccionadas [5]. El objetivo del análisis de incertidumbre es, en primer lugar, identificar y cuantificar todos los parámetros inciertos potencialmente importantes. Su propagación a través de cálculos de código de computadora proporciona distribuciones de probabilidad y rangos para los resultados del código. La evaluación del margen de los criterios de aceptación, debe basarse en el límite superior de esta distribución para las temperaturas calculadas. Se necesita un análisis de incertidumbre si se obtienen conclusiones útiles con respecto a la capacidad de predicción, como la temperatura máxima del revestimiento, se obtendrán a partir de cálculos de código termohidráulico de “mejor estimación”; de lo contrario, se presentaran valores únicos de precisión desconocida para compararlos con los límites de aceptación. El análisis de incertidumbre con muestreo aleatorio de los parámetros de entrada y el uso de estadísticas de orden para los límites de tolerancia deseados de los parámetros de salida es un enfoque maduro y comúnmente aceptado [6].

Los procedimientos de concesión de licencias iniciales se establecieron en 1974 cuando el USNRC publicó las reglas para el análisis LOCA en 10CFR 50.46 y el Apéndice K [7]. Durante la década de los 80, se inició el uso de los métodos BEPU para los análisis de accidentes, con base en los resultados de la investigación de 1974 a 1986. En los EE.UU., la Comisión Reguladora Nuclear de los Estados Unidos (USNRC: United States Regulatory Commission) inicio´ un esfuerzo para desarrollar y demostrar un método de obtención de licencias de mejor estimación aceptable lo que podría traer beneficios a los operadores de plantas nucleares y esto se estableció´ de acuerdo con la guía reguladora RG 1.157, [1] y posteriormente la RG 1.1203 [8]. Actualmente el Código de Regulación Federal de EE. UU. (CFR: Code of Federal Regulations) 10 CFR 50.46 [9], permite usar un código de mejor estimación más identificación y cuantificación de incertidumbres, o la opción conservadora usando modelos de códigos de computadora conservadores enumerados en el Apéndice K de la CFR, Título 10, Parte 50.

El primer método BEPU desarrollado fue el método de Escalado, Aplicabilidad e Incertidumbre del Código (CSAU: Code Scaling, Applicability and Uncertainty) y se demostró´ para LOCA de rotura grande (LB) en un reactor de agua presurizada (PWR), [10]. Después del método CSAU, se desarrollaron varios métodos que se presentaron en un taller especial de la OECD / NEA / CSNI (Organización de Cooperación y Desarrollo Económicos / Nuclear Energy Agency / Committee on Safety of Nuclear Installations) sobre métodos de análisis de incertidumbre en 1994 [11]. Alguno métodos BEPU son: GRS [12], ASTRUM [13], o UMAE [14].

Durante los últimos años se han desarrollado una serie de herramientas para realizar Análisis de Sensibilidad e Incertidumbre, como son: TSUNAMI (Tools for Sensitivity and Uncertainty

Analysis Methodology Implementation)[15] desarrollado por ORNL (Oak Ridge National Laboratory), SUSA (System for Uncertainty and Sensitivity Analysis) [16] desarrollado por el GRS (Gesellschaft für Anlagen-und Reaktorsicherheit) y DAKOTA (Design Analysis Kit for Optimization and Terascale Applications) [17] desarrollado por SNL (Sandia National Laboratories).

2. PASOS GENERALES PARA LOS MÉTODOS BEPU

Durante los últimos 20 años se han desarrollado una serie de metodologías BEPU, sin embargo todavía no existe un consenso en cuanto a qué metodología es la mejor para satisfacer todas las necesidades que exige un análisis completo de la propagación de la incertidumbre. Sin embargo, se pueden identificar una serie de pasos básicos en la mayoría de las metodologías, los cuales son:

1. **Selección del escenario de interés:** El primer paso es identificar el problema que se quiere analizar y determinar el código y modelo que serán utilizados.
2. **Identificación y asociación de las incertidumbres a los parámetros de interés:** Es importante identificar todos los contribuyentes potencialmente importantes para el escenario de interés. Para cada caso los parámetros de interés varían. La estimación de incertidumbre final de los resultados del código depende de la información de incertidumbre asociada.
3. **Determinación del tamaño de la muestra:** Se debe determinar el tamaño de la muestra para la medición estadística significativa de la incertidumbre de las variables de salida. Existen diferentes maneras de determinar el tamaño de la muestra, sin embargo una de las más populares los últimos años ha sido por medio de las Fórmulas de Wilks[18]/Wald[19], seleccionando el nivel de confianza y el percentil deseado.
4. **Generación de la muestra:** Se procede a generar la muestra de salida. Esto se puede hacer variando simultáneamente los valores de los parámetros de entrada inciertos mediante un muestreo aleatorio de acuerdo con las Funciones de Densidad de Probabilidad (PDFs: Probability Density Functions) asociadas a cada parámetro. Una vez que se tienen los resultados del código, se deben seleccionar las Figuras de Mérito (FoMs: Figures of Merit)
5. **Procesamiento estadístico:** Teniendo una base de datos con los parámetros de entrada inciertos y las FoMs se puede proceder a realizar diversos análisis, entre ellos los Análisis de Incertidumbre y Análisis de Sensibilidad.
6. **Interpretación, análisis y discusión de los resultados:** Una vez procesando los datos que se tienen del escenario, se tiene diferentes resultados (p. ej. los parámetros de interés elegidos, las respuestas de interés observadas e incluso el modelo y códigos utilizados) los cuales deben ser analizados a profundidad, tomando en cuenta todos los factores.

Con la herramienta **AZTUSIA** es posible realizar los pasos 3, 4 y 5.

3. CÓDIGO AZTUSIA (AZtlan Tool for Uncertainty and SensItivity Analysis)

El código **AZTUSIA** (**AZ**tlan **T**ool for **U**ncertainty and **S**ens**I**tivity **A**nalysis) ha sido desarrollado para proporcionar a la Plataforma AZTLAN [20] una herramienta para realizar análisis de incertidumbre y sensibilidad. El código fue desarrollado en el lenguaje Python lo que lo hace versátil y multiplataforma.

La Figura 1 muestra la pantalla de inicio del código **AZTUSIA**. La herramienta cuenta con 3 secciones, "***SAMPLE***", "***UNCERTAINTY***" y "***SENSITIVITY***" funcionando y una en desarrollo "***GRAPH TOOL***". A continuación, se detallarán las funciones del código de las primeras 3 secciones.

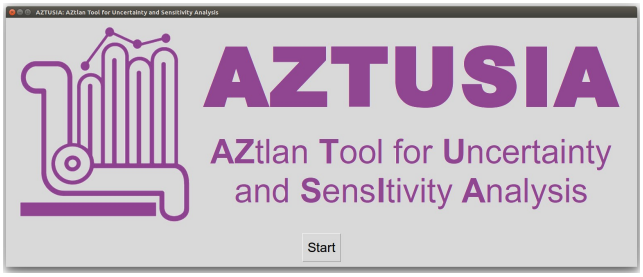


Figura 1. Pantalla de presentación del código AZTUSIA

3.1. Sección "SAMPLE"

En la sección de "SAMPLE", Figura 2, se podrá´ generar una muestra basándose en un archivo base con el modelo del escenario en el formato del código seleccionado. Actualmente se encuentra acoplado directamente con AZTRAN, sin embargo es posible usarlo con otros códigos.

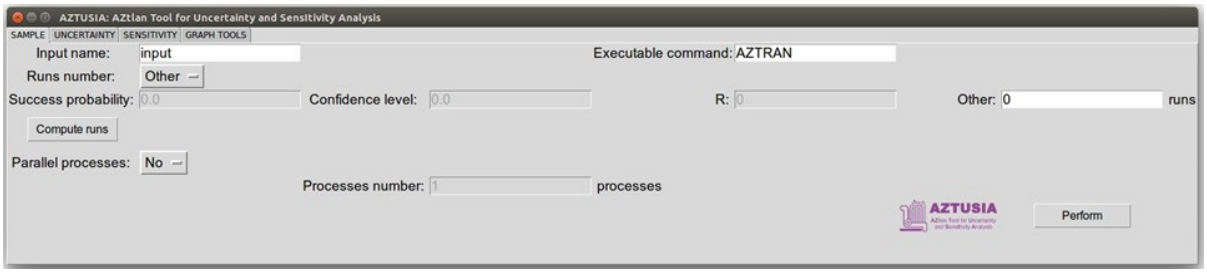


Figura 2. Sección de "SAMPLE".

Teniendo el escenario seleccionado y el input base con el cual se va a trabajar, es importante identificar los parámetros de incertidumbre que se tomaran en cuenta para el escenario. La herramienta identifica los parámetros inciertos con paréntesis angulares, $\langle\ \rangle$. Para la PDF seleccionada para cada parámetro, la herramienta tiene cuatro opciones de distribuciones, donde el primer número dentro de los paréntesis angulares indica el PDF elegido, Figura 3, y a partir de

ahí los siguientes números tienen diferentes significados según la PDF, como se describe a continuación:

1. **"Uniform",** $\langle 0, a, b \rangle$
   - $a \equiv$ el valor mínimo o límite inferior
   - $b \equiv$ el valor máximo o límite superior
2. **"Normal Truncated"**, $\langle 1, \mu, \sigma, a, b \rangle$, que conserva las características principales de la distribución normal evitando los valores extremos.
   - $\mu \equiv$ el valor esperado o la media
   - $\sigma \equiv$ la desviación estándar
   - $a \equiv$ el valor mínimo o límite inferior
   - $b \equiv$ el valor máximo o límite superior
3. **"Log Normal",** $\langle 2, \mu, \sigma \rangle$
   - $\mu \equiv$ el valor esperado o la media
   - $\sigma \equiv$ la desviación estándar
4. **"Triangular",** $\langle 3, a, b, c \rangle$
   - $a \equiv$ el valor mínimo o límite inferior
   - $b \equiv$ el valor máximo o límite superior
   - $c \equiv$ la moda o valor pico

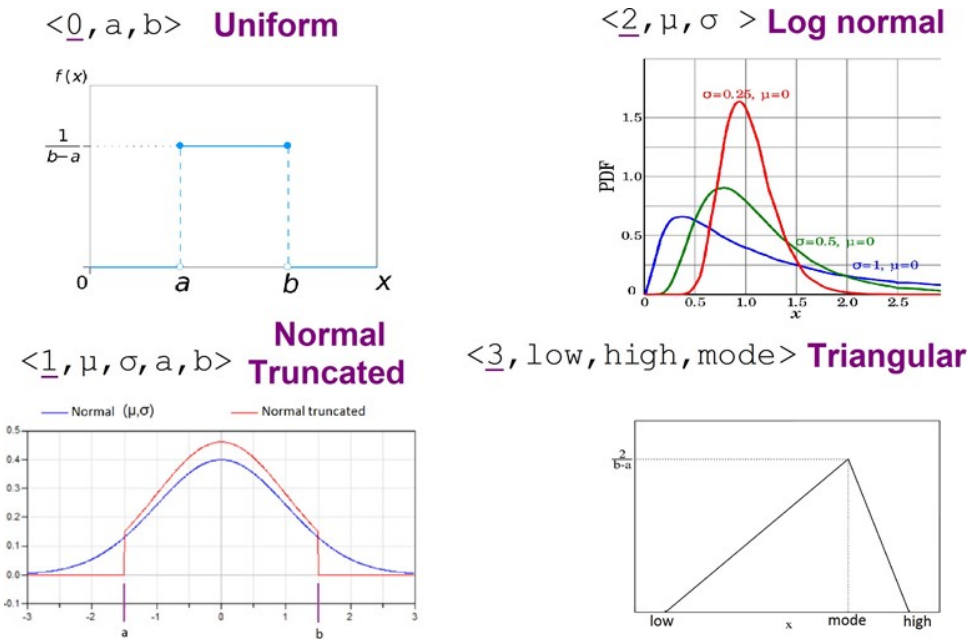


Figura 3. Funciones de Distribución de Probabilidad que se pueden usar en AZTUSIA.

Una vez que se tienen identificados los parámetros de incertidumbre en el input, se procede a seleccionar el tamaño de la muestra. Para generar el tamaño de muestra deseado, se incluyen cuatro opciones:

1. *"Wilks one-sided tolerance"*,
2. *"Wilks two-sided tolerance"*,
3. *"Wald"* y
4. *"Other"* en la que el usuario puede ingresar el tamaño deseado de la muestra.
5.

La herramienta cuenta con la opción de usar procesamiento en paralelo. Es importante mencionar que se deben tener bien identificados los recursos del equipo que se va a utilizar para una ejecución más eficiente. Si el código elegido a utilizar ya cuenta con procesamiento en paralelo, no se recomienda usar esta opción en **AZTUSIA**.

Una vez que ya se ha proporcionado el nombre del archivo base con los valores de los parámetros inciertos en el formato antes mencionado, y se ha seleccionado el tamaño de muestra deseado, **AZTUSIA** generara´ la muestra variando los parámetros dados con las PDFs correspondientes en el archivo de entrada base del escenario. En la Figura 4 se pueden observar las carpetas que genera el código, donde cada carpeta contiene los resultados del código para cada caso.

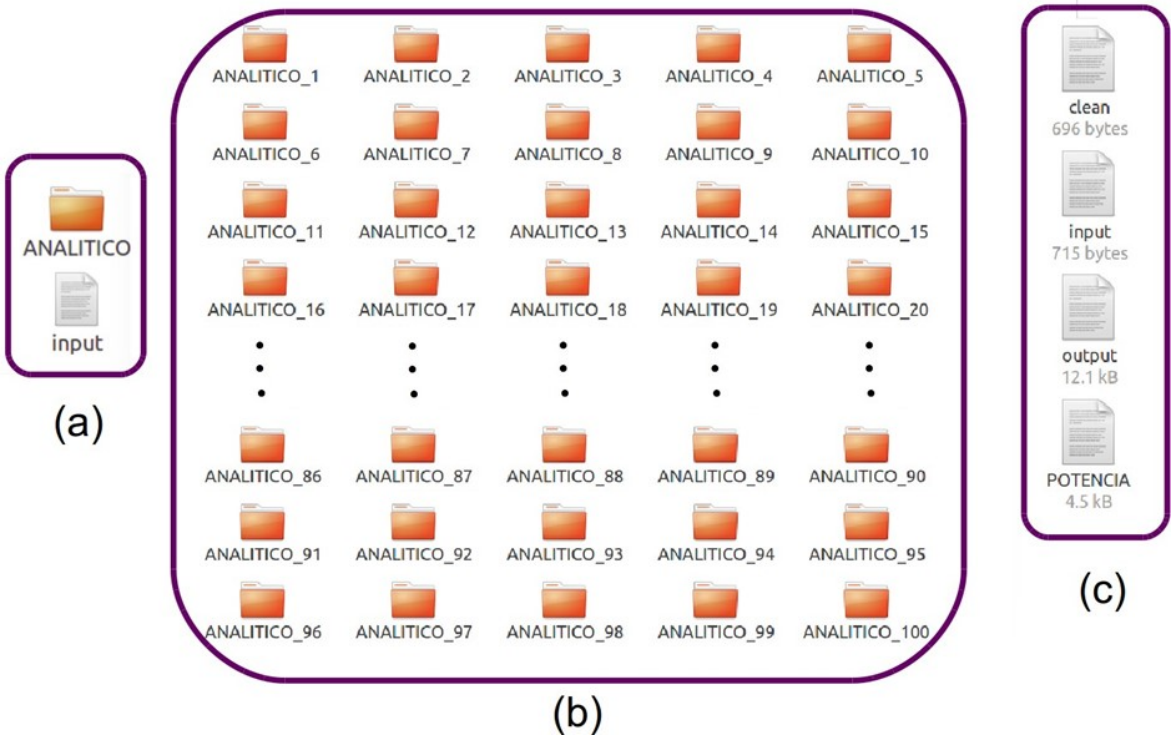


Figura 4. Archivos generados (a) Archivo base (input) y carpeta generada con el nombre del caso (p. ej. ANALITICO), (b) Carpetas contenidas dentro de la carpeta generada con el nombre del caso (p. ej. 100 carpetas) y (c) Archivos generados por el código para cada caso.

AZTUSIA proporciona un archivo con los valores de los parámetros de entrada inciertos para cada caso, Figura 5.

- En la primera línea se encuentra el nombre (*nombre_vj*) y la unidad de medida correspondiente (*unidades_vj*) para cada parámetro separando cada dato con una tabulación.
- A continuación, en cada línea se tendrán los valores de los j parámetros para cada caso (*n* casos), es decir que el número de columnas corresponderá al número de variables (*j*) y el número de filas al número de casos (*n*).

```
nombre_v1       unidades_v1     nombre_v2       unidades_v2 ... nombre_vj       unidades_vj
valor1_v1       valor1_v2       ...     valor1_vj
valor2_v1       valor2_v2       ...     valor2_vj
valor3_v1       valor3_v2       ...     valor3_vj
   ...             ...          ...        ...
valorn_v1       valorn_v2       ...     valorn_vj
```

Figura 5: Ejemplo del formato del archivo de salida.

3.2. Sección "UNCERTAINTY"

En la sección de "UNCERTAINTY", Figura 6, se encuentran dos casos, "Steady State" y "Transient", de las cuales se debe seleccionar solo una opción a la vez ya que el formato del archivo de entrada (Data) es diferente.

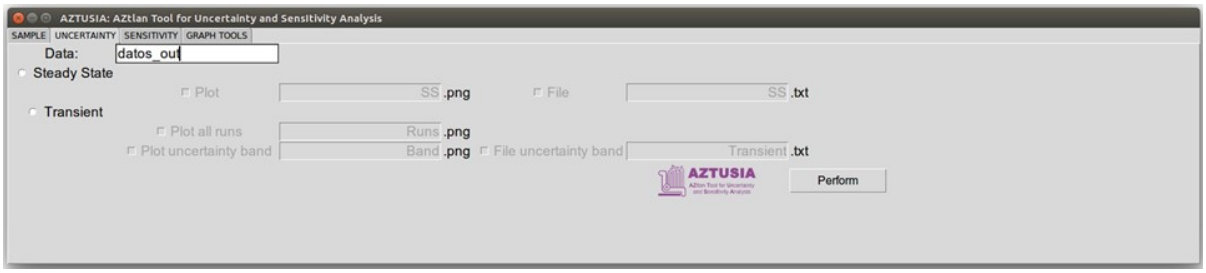


Figura 6: Sección de "UNCERTAINTY".

Una vez seleccionado el caso (Steady State o Transient), se activaran las opciones correspondientes a cada uno. Las opciones "Plot" generan archivos con extensión .png y las opciones "File" generan archivos con extensión .txt, esto en todas las secciones, para cada caso se puede personalizar el nombre de los archivos.

3.2.1. Caso "Steady State"

Para el caso "Steady State" se pueden generar dos tipos de archivo, un archivo gráfico y un archivo de texto. Para este caso el archivo de entrada (*nombre_archivo*) tendrá la misma estructura que el archivo de texto generado de los parámetros de entrada en la muestra generada,

Figura 5.

Una vez ingresado el nombre del archivo de entrada que cuente con el formato correspondiente y el cual se debe encontrar en la misma carpeta que el ejecutable, se podrán seleccionar los archivos que se quieren generar, grafico (*.png*) y/o de texto (*.txt*).

Si se selecciona la checkbox de "Plot", se generaran j archivos gráficos (*.png*), Figura 7, el nombre de cada archivo será´ el nombre del archivo general (*nombre_archivo*) + guion bajo (_) + el nombre de la variable (*nombre_vj*) + extensión (*.png*) (p.ej. *SS_PCT.png*, donde: *nombre_archivo* = *SS*, *nombre_vj* = *PCT*),Figura 8.

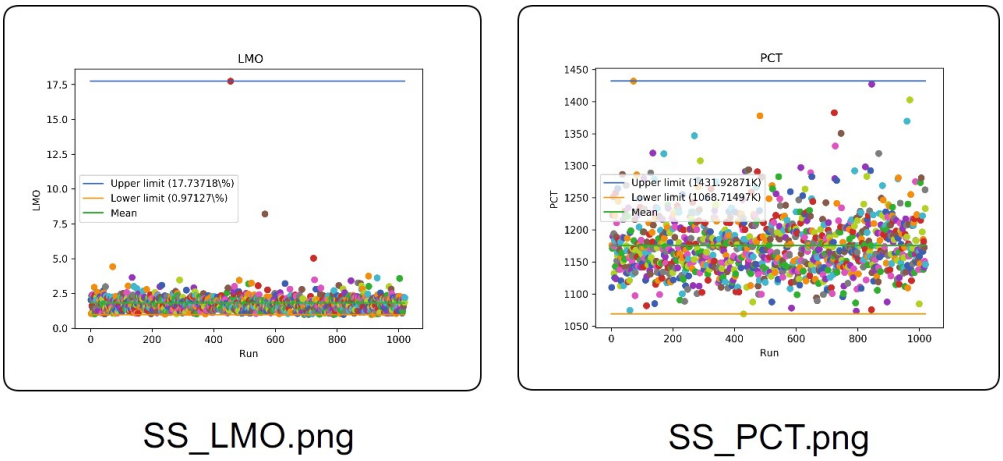


Figura 7: Ejemplo de gra´ficos generados en el caso "Steady State" para 2 FoMs (LMO y PCT).

Si se selecciona la checkbox de "File", se genera un archivo de texto (*.txt*) en el cual se podrán identificar los siguientes valores para cada línea, Figura 9:

- El nombre de la variable
- El valor máximo en la unidad de medida correspondiente y en qué caso se presentó.
- El valor mínimo en la unidad de medida correspondiente y en qué caso se presentó.
- El valor promedio calculado en la unidad de medida correspondiente.

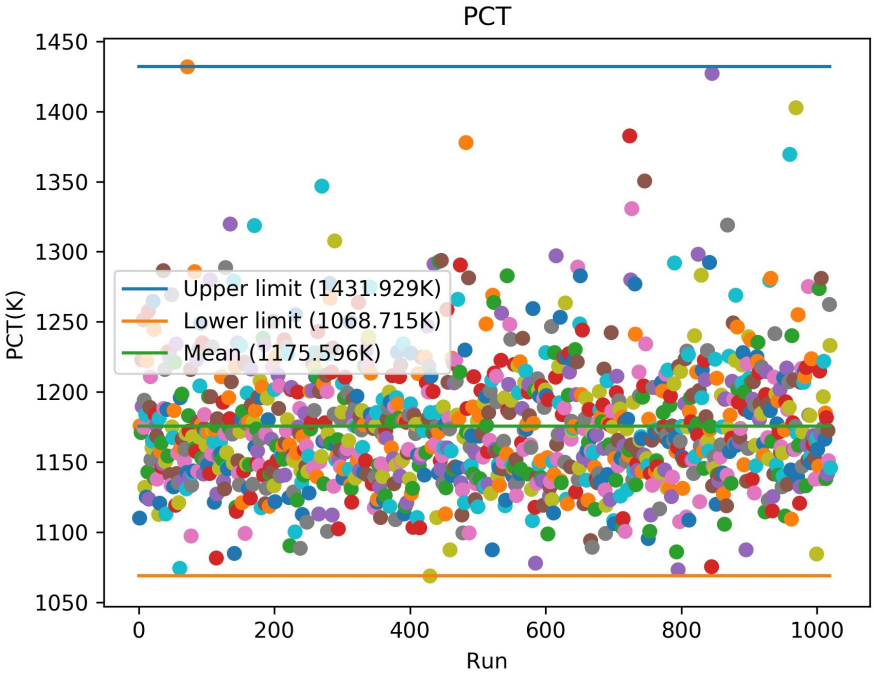


Figura 8: Ejemplo de una gráfica de dispersión generada para la variable PCT con 1020 valores, para el caso "Steady State", con nombre del archivo SS PCT.png.

3.2.2. Caso "Transient"

Para el caso "Transient" se pueden generar tres tipos de archivo, dos archivos gráficos y un archivo de texto. Para este caso el archivo de entrada (*nombre_archivo*) tendrá la siguiente estructura Figura 10:

- En la primera línea se debe escribir el nombre del eje *x* (*nombre_ejex*) y la unidad de medida correspondiente (*unidades_ejex*), el nombre del eje *y* (*nombre_ejey*) y la unidad de medida correspondiente (*unidades_ejey*), separando cada dato con una tabulación.
- A continuación, en cada línea se tendrá en la primera columna el valor del eje *x* seguida por el primer valor correspondiente para el eje *y*, lo mismo para el segundo valor correspondiente para el eje *y*, y así sucesivamente hasta el valor *n* correspondiente para el eje *y*, donde *n* será el total de casos, separando cada dato con una tabulación. Esto se repetirá *m* veces, siendo *m* el número de puntos para el eje *x*.

```
nombre_v1      max: XXX.XXXXunidades_v1,  run: XX;    min: XXX.XXXXunidades_v1,  run: XXX;    mean: XXX.XXXXunidades_v1
nombre_v2      max: XX.XXXXunidades_v2,  run: XXX;    min: XX.XXXXunidades_v2,   run: XXX;    mean: XX.XXXXunidades_v2
   ...                   ...                ...                   ...                ...                  ...
nombre_vj      max: XX.XXXXunidades_vj,  run: XXX;    min: XX.XXXXunidades_vj,   run: XXX;    mean: XX.XXXXunidades_vj
```

Figura 9: Ejemplo del formato de un archivo de texto generado para el caso "Steady State".
Una vez ingresado el nombre del archivo de entrada que cuente con el formato correspondiente y

el cual se debe encontrar en la misma carpeta que el ejecutable, se podrán seleccionar los archivos que se quieren generar, gráficos (*.png*) y/o de texto (*.txt*).

```
nombre_ejex     unidades_ejex   nombre_ejey     unidades_ejey
valor1_ejex     valor1_r1       valor1_r2       ...     valor1_rn
valor2_ejex     valor2_r1       valor2_r2       ...     valor2_rn
valor3_ejex     valor3_r1       valor3_r2       ...     valor3_rn
   ...             ...             ...          ...        ...
valorm_ejex     valorm_r1       valorm_r2       ...     valorm_rn
```

Figura 10: Ejemplo del formato del archivo de entrada para el caso "Transient".

Si se selecciona la checkbox de "Plot all runs", se generarán un archivo gráfico (*.png*), en el cual se podrán observar *n* gráficas para los valores establecidos para el eje *x*, Figura 11.

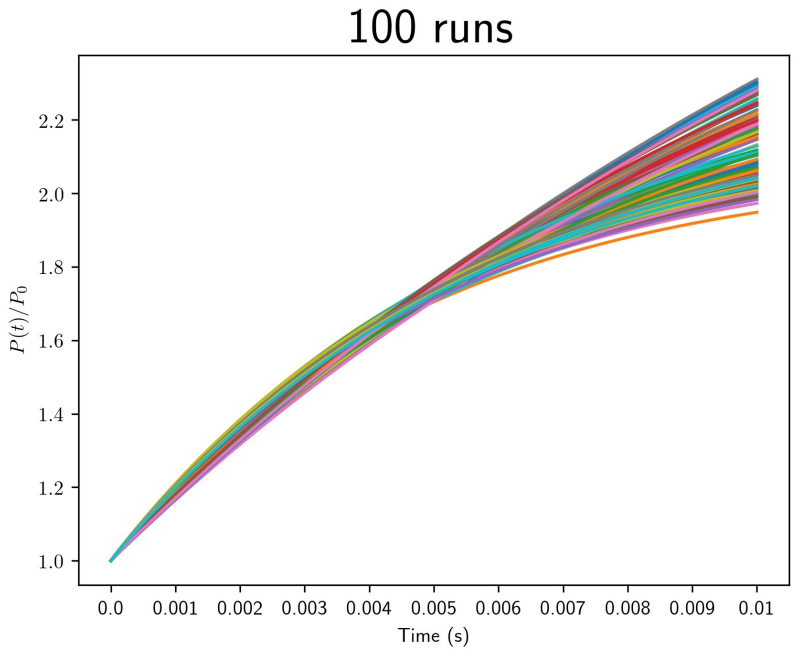


Figura 11: Ejemplo de un archivo gráfico generado con la opcio´n "Plot all runs" para el caso "Transient".

Si se selecciona la checkbox de "Plot uncertainty band", se generara un archivo gráfico (*.png*), en el cual se podrán observar tres gráficos, ver Figura 12, los cuales son:

- Upper limit: El cuál está representando el valor máximo de los *n* casos para cada valor del eje *x*.
- Lower limit: El cuál está representando el valor mínimo de los *n* casos para cada valor del eje *x*.
- Mean: El cuál está representando el valor promedio calculado de los *n* casos para cada valor

del eje *x*.

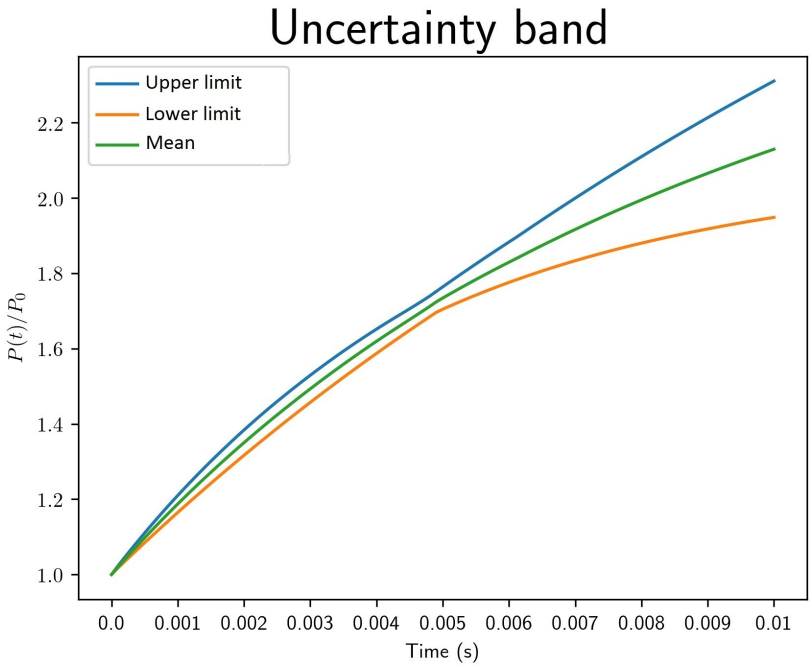


Figura 12: Ejemplo de un archivo gráfico generado con la opción "Plot uncertainty band" para el caso "Transient".

Si se selecciona la checkbox de "File uncertainty band", se genera un archivo de texto (*.txt*) en el cual se podrán identificar los siguientes valores para cada línea, ver Figura 13:

- El nombre de lo que representa cada columna: en la primer columna el *nombre_ejex* con su unidad de medida correspondiente; en la segunda columna el *nombre_ejey+_+max* con su unidad de medida correspondiente, esta columna contiene el valor máximo de los *n* casos para cada valor del eje *x*; en la tercera columna el *nombre_ejey+_ +min* con su unidad de medida correspondiente, esta columna contiene el valor mínimo de los *n* casos para cada valor del eje *x*; en la cuarta columna el *nombre_ejey+_+mean* con su unidad de medida correspondiente, esta columna obtendrá el valor promedio calculado de los *n* casos para cada valor del eje *x*.
- Las siguientes líneas contendrán los valores correspondientes a cada columna para cada los *m* valores del eje *x*.

```
nombre_ejex(unidades_ejex)      nombre_ejey_max(unidades_ejey)  nombre_ejey_min(unidades_ejey)  nombre_ejey_mean(unidades_ejey)
valor1_ejex     valor1_max      valor1_min      valor1_mean
valor2_ejex     valor2_max      valor2_min      valor2_mean
valor3_ejex     valor3_max      valor3_min      valor3_mean
   ...             ...             ...             ...
valorm_ejex     valorm_max      valorm_min      valorm_mean
```

Figura 13: Ejemplo del formato de un archivo de texto generado para el caso "Transient".

3.3. Sección “SENSITIVITY”

En la sección de “SENSITIVITY” 14 se encuentran 4 opciones para calcular el coeficiente de correlación entre dos variables, “Pearson Simple Correlation Coefficient”, “Spearman Rank Correlation Coefficient”, “Partial Correlation Coefficient” y “Partial Rank Correlation Coefficient”. La correlación la calcular´a a partir de las variables de los archivos de entrada “Data A” y “Data B”. Estos archivos de entrada tendrán el mismo formato que el archivo de texto generado de los parámetros de entrada en la muestra generada, ver Figura 5.

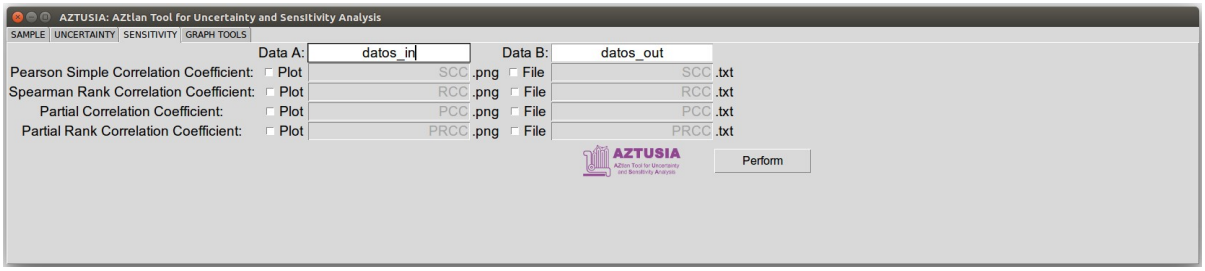


Figura 14: Sección de “SENSITIVITY”.

Para las 4 opciones se pueden generar 2 tipos de archivo, gráfico y de texto.

Si se selecciona la checkbox de “Plot” para cualquiera de las opciones, se generaran un archivo gráfico (*.png*), en el cual se podrá observar una matriz de gráficas de dispersión para la relación entre las variables en el *datos_in* (filas) y las variables en el *datos_out* (columnas), ver Figura 15. Si se selecciona la checkbox de “File” para cualquiera de las opciones, se generara un archivo de texto (*.txt*), en el cual se podrán identificar las correlaciones entre cada variable del *datos_in* y el *datos_out*, ver Figura 16.

4. CONCLUSIONES

AZTUSIA es una herramienta que facilita el análisis de sensibilidad e incertidumbre. Permite una visualización de resultados tanto numéricos como gráficos, lo cual el útil para tener una mejor perspectiva de los resultados. Una de las ventajas de **AZTUSIA** es que puede ser utilizado con diferentes códigos tanto neutrónicos como termohidráulicos, incluso se puede adaptar con códigos que no sean del área nuclear. Es una herramienta muy versátil, la cual además de ser útil para el AS&I, puede ser utilizada para otras aplicaciones.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero [20] del Proyecto Estratégico Nacional No. 212602 como parte del Fondo Sectorial de Sostenibilidad Energética CONACYT-SENER.

La primera autora agradece a CONACyT la beca otorgada para realizar sus estudios de doctorado.

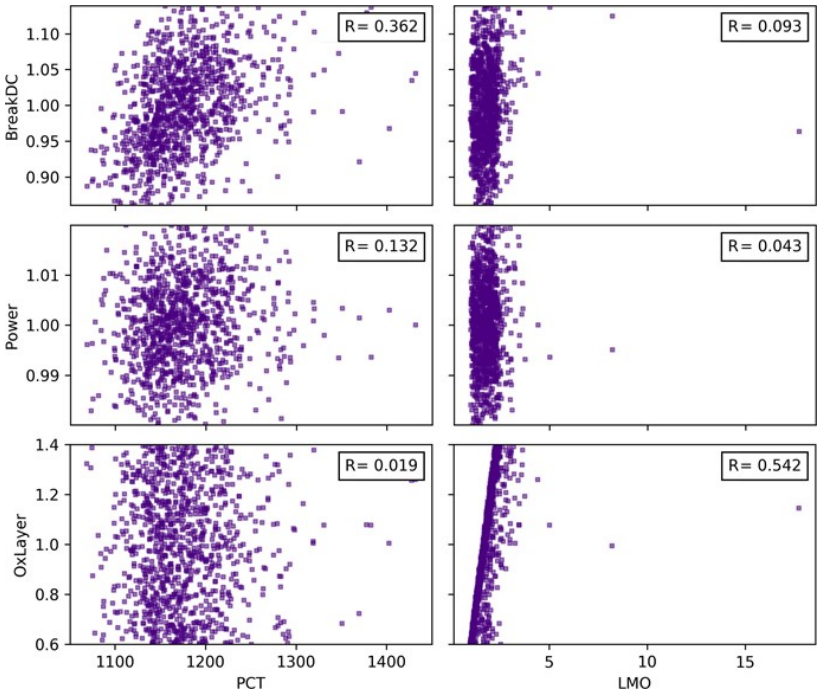


Figura 15: Ejemplo de un archivo gráfico generado para la sección "SENSITIVITY" para la opción "PRCC".

```
                    ['PCT' ,  'LMO']

BreakDC      0.362   0.093
  Power      0.132   0.043
OxLayer      0.019   0.542
```

Figura 16: Ejemplo del formato de un archivo de texto generado para la sección "SENSITIVITY" para la opción "PRCC".

REFERENCIAS

1. "Best-Estimate Calculations of Emergency Core Cooling System Performance." NRC Nuclear Regulatory Commission (1989).
2. Safety margins of operating reactors: Analysis of uncertainties and implications for decision making. IAEA-TECDOC-1332. *IAEA Safety Standards Series*, Viena (2003).
3. Best Estimate Safety Analysis for Nuclear Power Plants: Uncertainty Evaluation. *Number 52 in Safety Reports Series. International Atomic Energy Agency IAEA*, Vienna (2008).

4. F. Fiori, A. Kovtonyuk, O. Lisovyy, F. Veronese, M. Kovtonyuk, A. Petruzzi, and F. D'Auria. "Supporting Qualified Database for Uncertainty Evaluation." *In International Congress on Advances in Nuclear Power Plants 2012*, ICAPP 2012, **Volume 2** (2012).
5. E. Zugazagoitia, C. Queral, M. Fernandez-Cosials, J. Gómez, L. Durán-Vinuesa, J. Sánchez-Torrijos, and J. Posada., "Uncertainty and sensitivity analysis of a PWR LOCA sequence using parametric and non-parametric methods." *Reliability Engineering System Safety,* p. 106607 (2019).
6. Prošek, Andrej & Mavko, B., "Review of Best Estimate Plus Uncertainty Methods of Thermal-Hydraulic Safety Analysis." *International Conference - Nuclear Energy for New Europe, Proceedings*. (2003).
7. "Code of Federal Regulations." United States Office of the Federal Register, National Archives and Records Administration, Washington DC (1974).
8. "Transient and Accident Analysis methods." NRC Nuclear Regulatory Commission, (ML053500170) (2005).
9. "Acceptance criteria for emergency core cooling systems for light water nuclear power reactors,EECS evaluation models." CFR Code of Federal Regulations, Appendix K.
10. B. Boyack, R. Duffey, P. Griffith, K. Katsma, G. Lellouche, S. Levy, U. Rohatgi, G. Wilson, W. Wulff, and N. Zuber., "Quantifying reactor safety margins: Part 1: An overview of the code scaling, applicability, and uncertainty evaluation methodology.", *Nuclear Engineering and Design*, **Volume 119**, Issue 1, Pages 1-15, (1988).
11. A. Wickett and G. Yadigaroglu., "Report of a CSNI workshop on uncertainty analysis methods." NEA/CSNI/R(1994)20, 1 (1994).
12. H. Glaeser and et al., "Uncertainty Methods Study for Advanced Best Estimate Thermalhydraulic Code Applications." Report from the Uncertainty Analysis Group, CSNI, 2 (1998).
13. M. Nissley, C. Frepoli, K. Ohkawa, and K. Muftuoglu., "Realistic Large-Break LOCA Evaluation Methodology Using the Automated Statistical Treatment of Uncertainty Method (ASTRUM)." (2005).
14. F. D'Auria, G. Giorgio, and N. Debrecin., "Outline of the Uncertainty Methodology Based on Accuracy Extrapolation.", *Nuclear Technology*, **109**, pp. 21–38 (1995).
15. M. Dahmani and D. Kastanya., "Use of sensitivity and uncertainty analysis in reactor design verification. Part I: TSUNAMI analysis.", *Annals of Nuclear Energy*, **60**, pp. 439–447 (2013).
16. M. Kloos., "SUSA Version 3.6 User's Guide and Tutorial." Gesellschaft fu¨r Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) (2008).
17. B. Adams and et al., "Dakota Version 6.0 Theory Manual." Sandia National Laboratories (2014).
18. S. S. Wilks., "Mathematical statistics." John Wiley&Sons (1962).
19. A. Wald., "An Extension of Wilks' Method for Setting Tolerance Limits.", *The Annals of Mathematical Statistics*, **14(1)**, pp. 45–55 (1943).
20. A. M. Gómez-Torres, F. Puente Espel, E. del Valle Gallegos, J.L. François, C. Martin-delCampo, G. Espinosa-Paredes, "Mexican platform for analysis and design of nuclear reactors." *Proceedings of the International Congress on Advances in Nuclear Power Plants ICAPP.* Niza, Francia (2015).

Modelo de Oxidación del Encamisado del Combustible Nuclear Basado en la Teoría de Difusión en un Medio Multifásico de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO

Heriberto Sánchez Mora, Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n, Edificio 9, Col. San Pedro Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, C. P. 07738, Ciudad de México.
heribertosanchez7@hotmail.com; edmundo.delvalle@gmail.com

Javier Ortiz Villafuerte
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Municipio de Ocoyoacac, C. P. 52750, Méx.
javier.ortiz@inin.com

Marco Antonio Polo Labarrios, Sergio Quezada García, Carlos Chávez Mercado
Universidad Nacional Autónoma de México
C.U., Coyoacán, C. P.04510, Ciudad de México.
plabarrios@hotmail.com; sequga@gmail.com; chm.carlos@gmail.com

Resumen

En este trabajo se desarrolla un modelo matemático para simular el proceso de oxidación en el encamisado de las barras de combustible nuclear debido al contacto con vapor a altas temperaturas. Se toma en cuenta el proceso de difusión de O_2 en el Zircaloy, se considera la dinámica de generación por oxidación de las fases de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO y su retroalimentación con la transferencia de calor en las barras de combustible por la energía liberada durante la reacción de oxidación. El fenómeno de oxidación es simulado en el rango de temperaturas de 1273 K a 1800 K. El modelo contempla la formulación de una barra equivalente para el análisis de la transferencia de calor en la barra de combustible en las direcciones radial y axial, el transporte de calor unidimensional en el vapor generado por evaporación, oxidación del encamisado por difusión de O_2 y la retroalimentación del calor liberado por la reacción de oxidación. Con este modelo desarrollado es posible determinar el espesor de la capa de ZrO_2 en el encamisado y la cantidad de H_2 generado por reacción.

1. INTRODUCCIÓN

La reacción de oxidación ocurre cuando las condiciones de flujo de vapor de agua y la temperatura del encamisado, hecho de Zr en su gran mayoría, son adecuadas. La oxidación del encamisado de las barras de combustible a altas temperaturas, en el rango de 1273 K a 1853 K, es uno de los fenómenos clave durante la progresión de un accidente severo en un reactor nuclear. En este rango de temperatura se tiene una rápida generación de ZrO_2 en comparación con el

rango de temperaturas inferiores de 923 K a 1273 K, donde inicia la reacción de oxidación del encamisado del combustible nuclear [1]. El flujo de calor y la química del refrigerante influyen poco en el grado de oxidación. La ecuación estequiométrica de la reacción de oxidación es,

$$Zr + 2H_2O \rightarrow ZrO_2 + 2H_2 + Calor \tag{1}$$

Esta reacción es altamente exotérmica, donde el calor liberado produce un efecto de retroalimentación, ya que aumenta la temperatura del encamisado y esto a su vez acelera la reacción y por lo tanto la generación de hidrógeno, así como la degradación del encamisado [2]. Este proceso de degradación es perjudicial para la integridad de las barras de combustible y la contención del reactor, ya que al fallar el encamisado los productos de fisión son liberados y las altas concentraciones del H_2 generado producen explosiones que dañan la integridad de la contención del reactor.

Durante la reacción se generan varias capas de distintas fases de óxido de circonio en encamisado. Estas fases dependen de la temperatura y la concentración de oxígeno. En la **Figura 1** se muestran las fases consideradas en este trabajo en el orden de aparición en el encamisado que son las fases de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO, también se muestra la región del vapor que está en contacto con superficie exterior del encamisado.

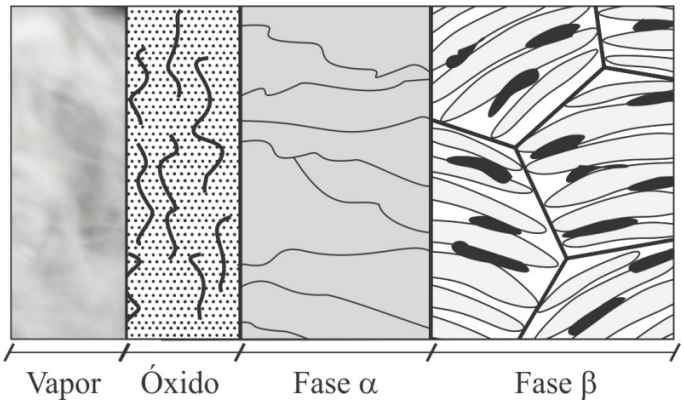


Figura 1. Esquema de fases de óxido en el zircaloy-2

El objetivo de este trabajo es desarrollar un modelo matemático para simular el proceso de oxidación en el encamisado de las barras de combustible debido al contacto con vapor a altas temperaturas, tomando en cuenta el proceso de difusión de O_2 en Zircaloy, considerando la dinámica de generación por oxidación de las fases de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO y su retroalimentación en la transferencia de calor en las barras de combustible por la energía liberada durante la reacción de oxidación. También se considera la transferencia de calor en la barra de combustible y el calor transportado por el vapor durante el proceso de evaporación durante la pérdida de nivel en la zona activa del núcleo. Esto último para asegurar la generación de vapor que esté en contacto con el encamisado y la temperatura de oxidación.

El modelo contempla la formulación de barra equivalente para el análisis de la transferencia de calor en la barra de combustible en las direcciones radial y axial, el transporte de calor unidimensional en el vapor generado por evaporación, oxidación del encamisado por difusión de O_2 y la retroalimentación del calor liberado por la reacción de oxidación. Se obtiene el espesor de las capas de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO en el encamisado y la cantidad de H_2 generado por reacción.

2. MODELO MATEMÁTICO

El modelo considera la pérdida del nivel del refrigerante circundante en la zona activa del combustible, el flujo del vapor generado, la transferencia de calor por decaimiento de las barras de combustible, la generación de calor por la reacción de oxidación del Zr y la difusión de oxígeno en el encamisado. Este último fenómeno considera las fases ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO. El modelo de transferencia de masa considera la difusión de oxígeno en el Zircaloy del clad de las barras de combustible. Esto hace que en la superficie del clad, que esté en contacto con el vapor, crezca una capa de ZrO_2 durante el proceso de oxidación. El modelo de transferencia de energía considera la transferencia por convección entre el combustible y el vapor. Los procesos de transferencia de calor y masa están acoplados a través de la tasa de reacción y calor de reacción, los cuales son funciones de la temperatura.

2.1. Transferencia de Calor en la Barra de Combustible

La transferencia de calor en una barra de combustible se calcula aplicando el método de barra promedio. Se considera este modelo a partir de SCRAM, donde la potencia por barra está dada por,

$$Q_{rod} = \frac{Q_T}{\mathrm{N_A N_B}} \omega(t) \tag{2}$$

donde Q_{rod} es la potencia por barra, Q_T es la potencia térmica nominal, t es el tiempo después del apagado del reactor, $\mathrm{N_A}$ es el número de ensambles, $\mathrm{N_B}$ es el número de barras por ensamble y ω es la tasa de calor por decaimiento que está dada por [3],

$$\omega(t) = 0.066\left[t^{-0.2} - (t+\tau_s)^{-0.2}\right] \tag{3}$$

donde τ_s es el tiempo de operación del reactor a la potencia nominal antes de ser apagado.
Para determinar la distribución de potencia a través de la barra se tiene,

$$q_{rod}(z) = \theta(z) Q_{rod} \tag{4}$$

donde q_{rod} es la distribución de potencia en la barra y z es la dirección axial.

El fenómeno de transferencia de calor en la barra es gobernado por la ecuación de conducción de calor considerando paredes compuestas. Este modelo toma en cuenta la transferencia de calor en las direcciones axial y radial, debido a que la dependencia radial es resuelta en distintas posiciones de la dirección axial considerando la distribución de potencia axial. La transferencia de calor en el combustible, gap y revestimiento están dadas por,

Combustible (UO_2)

$$\left(\rho Cp\right)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \frac{k_f}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_f}{\partial r}\right) + q'''\left(z\right) \qquad 0 \le r \le r_f \tag{5}$$

Gap (Helio)

$$0 = \frac{k_g}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_g}{\partial r}\right) \qquad r_f \le r \le r_g \tag{6}$$

Clad (Zircaloy-2)

$$\left(\rho Cp\right)_{cl} \frac{\partial T_{cl}}{\partial t} = \frac{k_{cl}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T_{cl}}{\partial r}\right) \qquad r_g \le r \le r_{cl} \tag{7}$$

donde ρ es la densidad, Cp es el calor específico, T es la temperatura, k es la conductividad térmica, q''' es la densidad de calor de decaimiento, los subíndices f, g y cl se refieren al combustible, gap y clad, respectivamente. La densidad de calor de decaimiento se puede calcular a partir de la siguiente ecuación,

$$q'''\left(z\right) = \frac{q_{rod}\left(z\right)}{V_f} \qquad 0 \le z \le L_b \tag{8}$$

donde V es el volumen y L_r es la longitud de la barra. La Ec. (5) está sujeta a las siguientes condiciones de frontera,

$$-k_f \frac{dT_f}{dr} = 0 \quad \text{en} \quad r = 0 \tag{9}$$

$$T_f = T_g \quad \text{en} \quad r = r_f \tag{10}$$

La Ec. (6) está sujeta a las siguientes condiciones de frontera,

$$-k_f \frac{dT_f}{dr} = -k_g \frac{dT_g}{dr} \quad \text{en} \quad r = r_f \tag{11}$$

$$T_g = T_{cl} \quad \text{en} \quad r = r_g \tag{12}$$

La Ec. (7) está sujeta a las siguientes condiciones de frontera,

$$-k_g \frac{dT_g}{dr} = -k_{cl} \frac{dT_{cl}}{dr} \quad \text{en} \quad r = r_g \tag{13}$$

$$-k_{cl}\frac{dT_{cl}}{dr}=h\left(T_{cl}-T_{w/vap}\right) \quad \text{en} \quad r=r_{cl} \tag{14}$$

donde h es el coeficiente convectivo de transferencia de calor y el subíndice *w/vap* se refiere al refrigerante ya sea en estado líquido o vapor. Los valores de las propiedades anteriormente mencionadas están dados por [4-6],

$$\left(\rho Cp\right)_f=\frac{8.510322\times10^{11}e^{\left(535.28/T_f\right)}}{T_f^2\left(e^{\left(535.28/T_f\right)}-1\right)^2}+243.48\,T_f+\frac{1.66098\times10^{16}e^{\left(-1897.06/T_f\right)}}{T_f^2} \tag{15}$$

$$k_f=\frac{3825.5}{T_f+129.41}+6.08\times10^{-11}T_f^3 \tag{16}$$

$$k_g=0.144\left(\frac{T_g}{273.15}\right)^{0.71} \tag{17}$$

$$k_{cl}=7.51+2.09\times10^{-2}T_{cl}-1.45\times10^{-5}T_{cl}^2+7.67\times10^{-9}T_{cl}^3 \tag{18}$$

$$\left(\rho Cp\right)_{cl}=1.8204\times10^6+3.0838\times10^5\tau-1.063\times10^5\tau^2 +2.8102\times10^4\tau^3-2.723\times10^3\tau^4 \tag{19}$$

Donde

$$\tau=\frac{T_{cl}-300.0}{200.0} \tag{20}$$

Para determinar el valor de h se usa la siguiente correlación [7],

$$\mathrm{Nu}=\frac{hl}{k_{w/vap}}=0.27\left(\mathrm{Gr}\,\mathrm{Pr}\right)^{0.25} \tag{21}$$

donde Nu es el número de Nusselt, l es la longitud característica, Gr es el número de Grashof y Pr es el número de Prantl.

La Ec. (17) es válida debido a que la conductividad del helio no cambia significativamente con la presión [8].

2.2 Nivel de refrigerante en el reactor

Para calcular la pérdida de nivel durante el proceso de evaporación del refrigerante se considera que se encuentra a temperatura de saturación, por lo que la energía latente es tomada en cuenta en la fase líquida y se considera un nivel colapsado. La ecuación que describe este fenómeno es la siguiente,

$$\rho_{sat} A_f h_{fg} \frac{dL}{dt} = -q'_{rod} L \tag{22}$$

donde h_{fg} es la entalpía de cambio de fase para el agua, L es el nivel de agua en contacto con la barra de combustible promedio, A_f es el área de flujo del canal promedio, el subíndice *sat* hace referencia a las propiedades de agua saturada y q'_{rod} es la potencia lineal la cual está dada por,

$$q'_{rod} = \frac{Q_{rod}}{L_b} \tag{23}$$

el área de flujo del canal promedio está dada por,

$$A_f = L_{pitch}^2 - \pi r_{cl}^2 \tag{24}$$

donde L_{pitch} es la longitud *pitch,* es la distancia entre los centros de dos barras de combustible conjuntas.

De la Ec. (22) se puede determinar la razón de generación de vapor,

$$\frac{dm_{vap}}{dt} = \frac{q'_{rod} L}{h_{fg}} \tag{25}$$

donde m es la masa y el subíndice *vap* se refiere al vapor. Por lo tanto la velocidad del vapor generado que fluye entre el área de flujo del canal de las barras de combustible es,

$$v_{vap} = \frac{q'_{rod} L}{\rho_{sat-vap} A_f h_{fg}} \tag{26}$$

donde el subíndice *sat-vap* se refiere a las propiedades del vapor saturado. Para determinar el transporte de calor de las barras de combustible a través del vapor generado en la dirección axial se usa la ecuación de transporte de calor unidimensional que está dada por,

$$(\rho Cp)_{vap} \left(\frac{\partial T_{vap}}{\partial t} + v_{vap} \frac{\partial T_{vap}}{\partial z} \right) = \frac{2\pi r_{cl}}{A_f} h \left(T_{cl} - T_{vap} \right) \tag{27}$$

Se considera que la velocidad del vapor es constante debido a su baja densidad y a la baja tasa de generación.

La **Figura 2** ilustra parte de un ensamble con geometría cuadrada, señalando el área de flujo considerada en este trabajo, la distancia entre barras y los distintos radios de la barra de combustible.

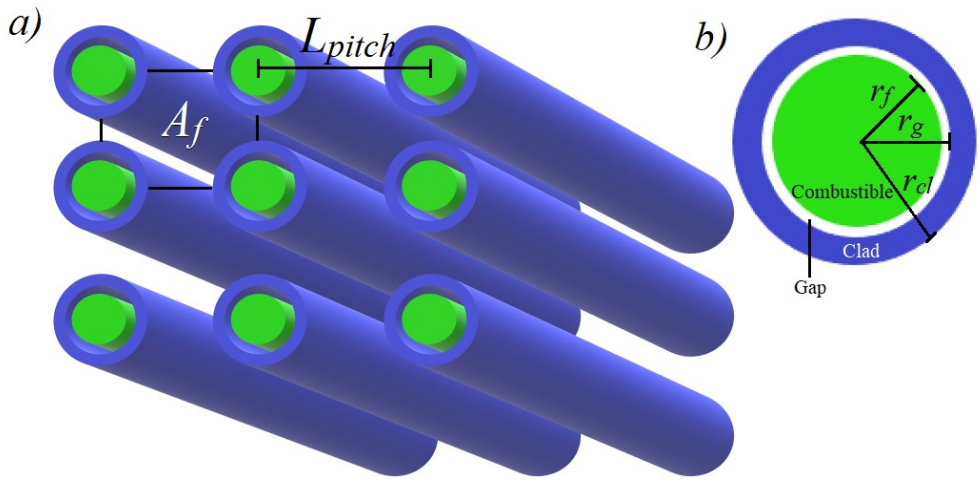


Figura 2. Ensamble con geometría cuadrada por barra promedio: *a)* Arreglo de barras donde se ilustra la región del área de flujo del refrigerante y la distancia entre barras, *b)* muestra los distintos radios en la barra de combustible.

2.3. Generación de Hidrógeno

La generación de hidrógeno, por medio de la reacción de oxidación dada por la Ec. (1), comienza cuando se alcanza la temperatura de reacción y la cantidad de vapor de agua necesaria para iniciar la difusión de oxígeno en el circonio del clad de las barras de combustible. Esto hace que en la superficie del clad, que esté en contacto con el vapor, crezca una capa de ZrO_2 durante el proceso de oxidación. Un efecto de retroalimentación por el proceso de oxidación de Zr es la liberación de energía con un valor alrededor de 6.43 MJ - 6.53 MJ por kilogramo de Zr reaccionado [9-10].

El modelo de difusión de oxígeno se basa en un modelo similar a Sethumadhavan et al. [11] con la diferencia que en este estudio se considera un medio finito, donde se consideran las fases β-Zr, α-Zr y ZrO_2, como se muestra en la **Figura 3**.

Los modelos que determinan el espesor ZrO_2 y α-Zr debido a la difusión de oxígeno en Zr están dados por [11],

Espesor de ZrO_2

$$\frac{d\delta_{ox}}{dt} = \frac{D_\alpha \left.\frac{dC_\alpha}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}} - D_{ox} \left.\frac{dC_{ox}}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}}}{\left(\upsilon C_{ox/\alpha} - C_{\alpha/ox}\right)} \tag{28}$$

Espesor de α-Zr

$$\frac{d\delta_\alpha}{dt} = \frac{D_\beta \left.\frac{dC_\beta}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}+\delta_\alpha} - D_\alpha \left.\frac{dC_\alpha}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}+\delta_\alpha}}{\left(C_{\alpha/\beta} - C_{\beta/\alpha}\right)} \tag{29}$$

Espesor de β-Zr

Debido a que se considera β-ZrO como la fase en todo el clad en un inicio, su espesor depende de la variación del espesor de las otras fases.

$$\delta_\beta = \delta_{cl} - \left(\delta_{ox} + \delta_\alpha\right) \tag{30}$$

De las Ecs. (28) a la (30) se tiene que δ es el espesor, D es el coeficiente de difusión de masa, C es la concentración de oxígeno, υ es la razón de Pilling-Bedworth con valor de 1.56. Los subíndices ox, α y β denotan las propiedades a las fases ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO, respectivamente, y el subíndice cl hace referencia al clad. Para la solución de las Ecs. 28 y 29 se proponen espesores iniciales de las fases. Por otro lado, la concentración de equilibrio entre fases que dependen de la temperatura, los cuales están dados por [12-13],

$$\ln C^*_{\alpha/\beta} = -2.28 + 0.535 \ln\left(T_{cl} - 1083\right) \tag{31}$$

$$\ln C^*_{\beta/\alpha} = 5.02 - \frac{8220}{T_{cl}} \tag{32}$$

Para $T_{cl} > 1280$ K,

$$C_{ox/\alpha} = 1.517 - 7.5\times10^{-5} T_{cl} \tag{33}$$

$$C_{\alpha/ox} = 0.4537 \tag{34}$$

Los coeficientes de difusión para cada una de las fases son los siguientes [14],

$$D_{ox} = A \cdot 0.157 \times 10^{-4} e^{\left(\frac{-17685}{T_{cl}}\right)} \tag{35}$$

$$D_{\alpha} = A \cdot 4.11 \times 10^{-4} e^{\left(\frac{-25682}{T_{cl}}\right)} \tag{36}$$

$$D_{\beta} = 2.64 \times 10^{-6} e^{\left(\frac{-14107}{T_{cl}}\right)} \tag{37}$$

donde A = 0.62 es un factor de multiplicación acorde con los resultados de Malang y Neitzel [15].

Tomando en cuenta que el perfil de difusión de oxígeno es lineal, como se ilustra en la **Figura 3**, de las Ecs. (28) y (29), el flux de masa se puede reescribir como,

$$D_{ox} \left.\frac{dC_{ox}}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}} = -D_{ox} \frac{C_{ox/g} - C_{ox/\alpha}}{\upsilon \delta_{ox}} \tag{38}$$

$$D_{\alpha} \left.\frac{dC_{\alpha}}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}} = -D_{\alpha} \frac{C_{\alpha/ox} - C_{\alpha/\beta}}{\delta_{\alpha}} \tag{39}$$

$$D_{\alpha} \left.\frac{dC_{\alpha}}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}+\delta_{\alpha}} = -D_{\alpha} \frac{C_{\alpha/ox} - C_{\alpha/\beta}}{\delta_{\alpha}} \tag{40}$$

$$D_{\beta} \left.\frac{dC_{\beta}}{dr}\right|_{r=\delta_{ox}+\delta_{\alpha}} = -D_{\beta} \frac{C_{\beta/\alpha} - C_{o}}{\delta_{\beta}} \tag{41}$$

donde $C_{ox/g}$ = 1.511 g/cm^3 es la concentración de oxígeno en equilibrio en la fase de óxido en contacto con el vapor de agua y C_o es concentración inicial de oxígeno en el Zr.
El calor generado por oxidación está dado por,

$$P_{ox} = Q_{ox} \rho_{Zr} A_L \frac{d\delta_{ox}}{dt} \tag{42}$$

donde P_{ox} es la potencia generada por la reacción, Q_{ox} es la energía liberada por unidad de masa reaccionada de Zr, ρ_{Zr} es la densidad del Zr y A_L es el área lateral externa del encamisado.

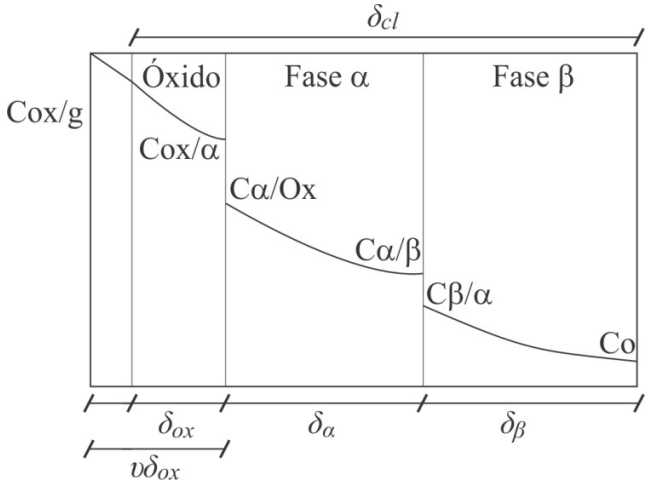


Figura 3. Perfil de concentración de oxígeno en Zr [11].

A partir de Ec. (1) se determina la tasa de generación de H_2 que está dada por,

$$\frac{dm_{H_2}}{dt} = 2 \times \frac{\mathrm{M}_{H_2}}{\mathrm{M}_{Zr}} \rho_{Zr} A_L \frac{d\delta_{ox}}{dt} \tag{43}$$

donde m es la masa, M es la masa molar, los subíndices H_2 y Zr hacen alusión al hidrógeno y circonio, respectivamente.

En este artículo se considera que el recurso de vapor siempre está presente para la reacción de oxidación y es suficiente para mantener las concentraciones de oxígeno en equilibrio en cada una de las fronteras.

2.4. Solución Numérica

Para la solución del modelo anterior se aplica el método de diferencias finitas sobre el dominio de la barra de combustible en n_z nodos axiales para solucionar la transferencia de calor radial en cada nodo axial. Las Ecs. (5) - (7), son aproximadas mediante el esquema de integración implícito, donde se obtiene la siguiente estructura tridiagonal,

$$aT_{i,j}^{t} = bT_{i+1,j}^{t+\Delta t} + cT_{i,j}^{t+\Delta t} + dT_{i-1,j}^{t+\Delta t} \qquad i = 1, n \quad j = 1, n_z \tag{44}$$

donde a, b, c y d, corresponden a los coeficientes correspondientes de la discretización para cada región de la barra, el subíndice i es la posición en el nodo radial, j es el nodo axial de la barra y el super íncide t es la evaluación en el tiempo presente y $t+\Delta t$ es la evaluación en tiempo futuro, n es la cantidad de nodos que depende de la región del combustible, gap y clad. La cantidad de nodos radiales en el combustible n_f, los nodos en el gap n_g y los nodos para el clad n_{cl}. La Ec. (44) es resuelta con el algoritmo de Gauss-Thomas [16].

Por otro lado, las Ecs.(22), (27), (28) y (29), son resueltas aplicando el método de Euler hacia delante. En particular, la estructura de Ec. (27), que determina la temperatura del vapor, es la siguiente,

$$aT_j^{t+\Delta t} = aT_j^t + b\left(T_{cl}^t\Big|_{r=r_g,j} - T_j^t \right) + c\left(T_j^t - T_{j-1}^t \right) \qquad j = 1, n_z \tag{45}$$

donde es la temperatura en el último nodo radial del clad. Las Ecs. (28) y (29) son resueltas para cada nodo axial.

Dada la anterior nodalización axial, A_L considera el área lateral por nodo, esto es,

$$A_L = 2\pi r_{cl}\Delta z \tag{46}$$

donde $\Delta z = L_b/(n_z\text{-}1)$.

3. ESCENARIO DE APLICACIÓN DEL MODELO: SBO SIN MITIGACIÓN

Un escenario donde el modelo puede ser aplicado es el conocido como *Short-Term Station Blackout* (STSBO), el cual consiste en la pérdida de energía eléctrica y de todos los sistemas de seguridad en una Planta de Energía Nuclear (PEN), acelerando el proceso del accidente [17]. Una vez perdido el suministro de energía eléctrica Como medida de seguridad, el reactor es apagado súbitamente mediante SCRAM, que es la inserción inmediata, automática o manual, de las barras de control. Sin embargo, aún se produce calor por el decaimiento de los productos de fisión en las barras de combustible. Este calor es denominado como calor de decaimiento y es capaz de evaporar el agua que se mantiene en el núcleo. El nivel del refrigerante en el núcleo disminuye debido al calor de decaimiento que es transferido al agua circundante. Una vez que la zona activa es descubierta, el vapor entra en contacto con las barras de combustible, por lo que empieza a aumentar su temperatura debido al calor sensible transferido al vapor. Al existir las condiciones de flujo de vapor por evaporación y la temperatura en el encamisado de las barras del reactor, constituido de Zr en su gran mayoría, ocurre la reacción de oxidación.

Un escenario similar como el que fue descrito anteriormente fue simulado con los códigos RELAP/SCDAP Mod. 3.4 y MELCOR 1.8.6 por Polo-Labarrios y Espinosa-Paredes (2015) [17], donde se compara la progresión del accidente y la generación de hidrógeno en un proceso de presurización del reactor a partir de 1200 s.

El modelo se aplica considerando los parámetros de la Tabla 1, correspondientes a un reactor del tipo BWR, con un arreglo de 8×8 barras de combustible por ensamble con dos barras de agua, lo que deja 62 barras por ensamble.

Tabla I. Características del reactor tipo BWR

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidad
Potencia Térmica Nominal	Q_T	2317	MW_{th}
Número de ensambles	N_A	444	-
Número de barras por ensamble	N_B	62	-

Pitch entre barras	L_{picth}	16.2	mm
Radio del combustible	r_f	5.207	mm
Radio interno del clad	r_g	5.321	mm
Radio externo del clad	r_{cl}	6.234	mm
Espesor del clad	δ_{cl}	0.913	mm
Longitud de la barra de combustible	L_b	3.81	m

*Valor obtenido de Polo-Labarrios et al [17].

En el artículo de Polo-Labarrios et al. [17] se consideran 4 regiones o anillos en el núcleo, se asume que hay una distribución de potencia radial como también axial, por lo tanto el progreso del escenario depende también de estos factores. En la **Figura 4** se muestra el perfil de potencia axial basado de Espinosa-Paredes et al. [4].

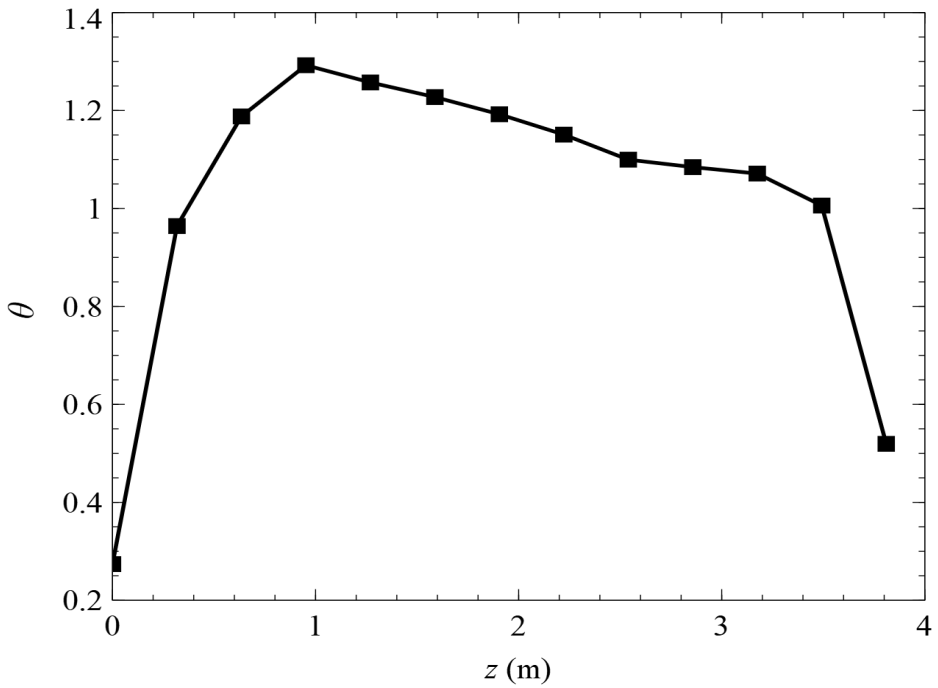


Figura 4. Perfil de potencia axial [4].

Para la comparación de resultados se considera el momento del escenario cuando el nivel de refrigerante alcanza la zona activa superior, aproximadamente en el segundo 1200 s después del apagado del reactor por SCRAM. La presión considerada es la presión promedio mostrada en Polo-Labarrios et al. [17] a partir de 1200 s hasta que el escenario alcanza los 1800 K como la máxima temperatura.

4. RESULTADOS

Las **Figuras 5**, **6** y **7** muestran las comparaciones con MELCOR, RELAP/SCDAP y el presente estudio, mostrando la temperatura máxima, la cantidad de hidrógeno generado y el nivel de refrigerante a partir de 1200 s, respectivamente. En la **Figura 5**, se muestra el comportamiento de la temperatura máxima en el núcleo, se observa que los resultados obtenidos con el modelo propuesto en este trabajo siguen la tendencia del aumento de la temperatura máxima con del resultado obtenido por MELCOR, alcanzando la temperatura de 1800 K en el tiempo 3050 s y MELCOR en 3062 s, lo que da un margen de tiempo de 12 s entre ambos eventos. Sin embargo, para el caso de RELAP/SCDAP, existe una diferencia en el perfil del aumento de la temperatura máxima, alcanzando 1800 K al tiempo 2860 s, con un margen de diferencia de casi 100 s con respeto al presente estudio y MELCOR. La **Figura 6** muestra la generación de hidrógeno, donde MELCOR estima la generación de H_2 a partir del tiempo 2279 s, que coincide con la temperatura máxima de 1100 K, antes del proceso de oxidación acelerado, estimando un total 28.82 kg de H_2. El presente estudio comienza con la generación de hidrógeno a partir del tiempo de 2415 s y muestra una tendencia muy simular a MELCOR, produciendo 28.5 kg de H_2. RELAP/SCDAP empieza la generación de H_2 al tiempo de 2482 s que coincide con la temperatura máxima de 1222 K, mostrando un perfil de generación más acelerado que el presente estudio y MELCOR. La pérdida de nivel se muestra en la **Figura 7**, donde se observa que el presente estudio tiene una tendencia similar a MELCOR, como ya se ha mostrado en los previos resultados. MELCOR estima 1/3 del nivel al tiempo de 1954 s y el presente estudio en 1965 s; resultados bastante cercanos. Por otro lado, RELAP/SCDAP predice el mismo nivel de agua al tiempo de 1778 s, casi 200 s antes que el presente estudio. La **Tabla II** muestra el tiempo en los eventos antes mencionados

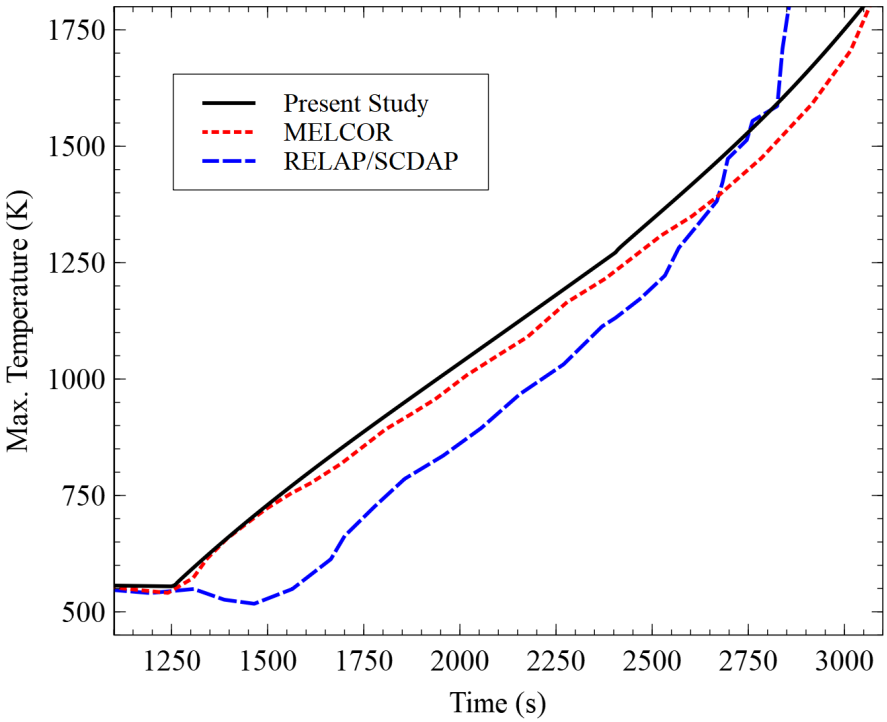


Figura 5. Comparación de la temperatura máxima en el núcleo.

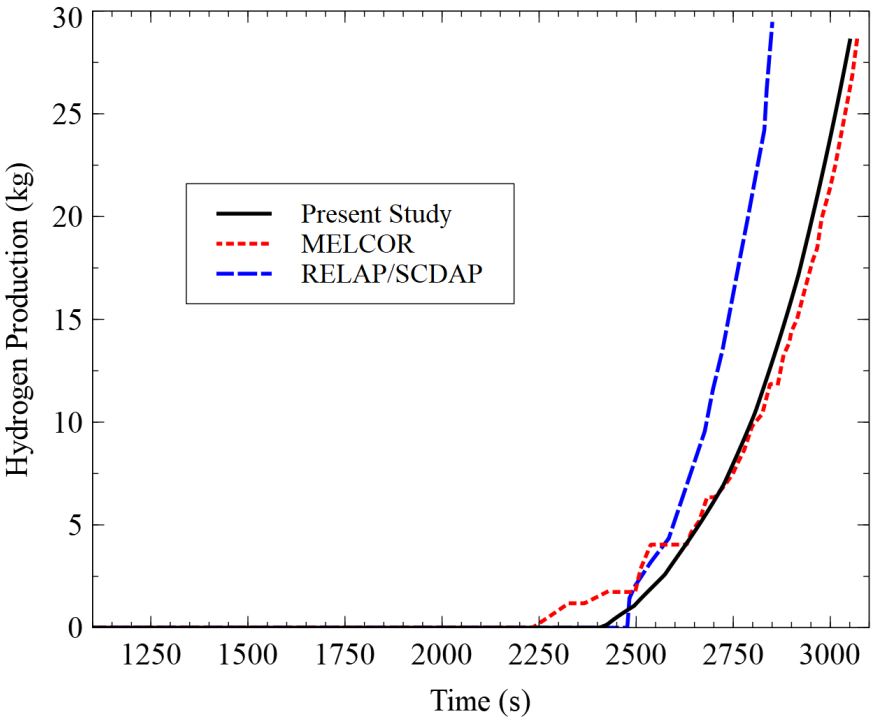


Figura 6. Generación de hidrógeno.

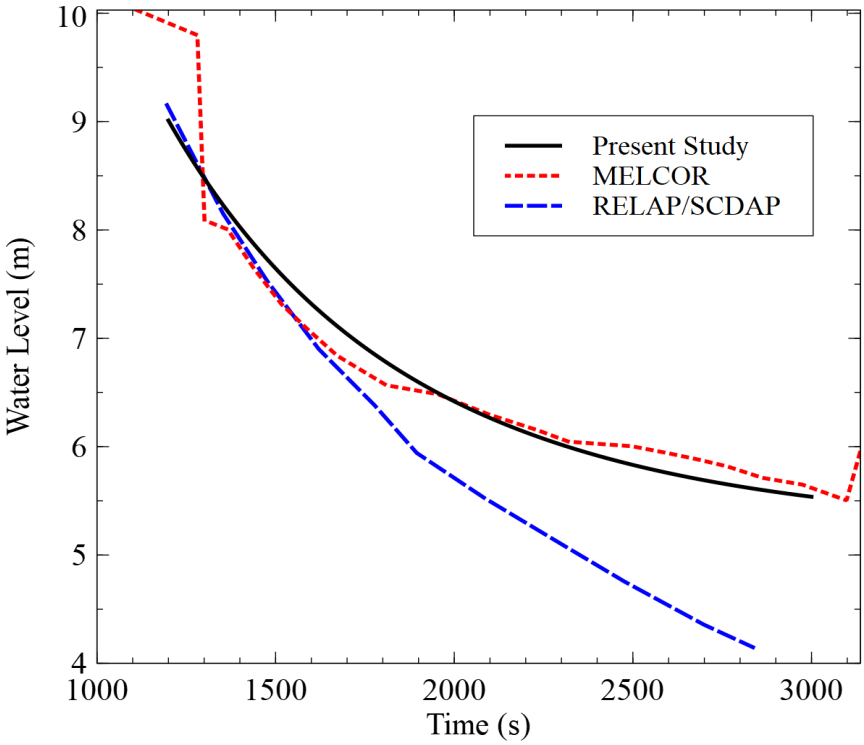


Figura 7. Nivel de refrigerante en la zona activa.

Tabla II. Tiempo de eventos y generación de hidrógeno.

Evento	RELAP/SCDAP	MELCOR	Presente Estudio
Nivel del refrigerante a 1/3 de la zona activa inferior	1778 s	1954 s	1965 s
Temperatura máxima igual a 1255 K	2560 s	2457 s	2325 s
Comienzo de la generación de hidrógeno	2482 s	2279 s	2415 s
Temperatura máxima igual a 1800 K	2860.0 s	3062.0 s	3050.0 s
Hidrógeno generado cuando la temperatura máxima es igual a 1800 K	29.3 kg	28.82 kg	28.5 kg

La **Figura 8**, **9** y **10** muestran el cambio de los espesores de las capas de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO a diferentes niveles de la barra de combustible. Se observa que la región con mayor cantidad de óxido está en parte superior, debido al proceso de descubrimiento del núcleo que depende de la pérdida del nivel, exponiendo inicialmente la zona superior de la barra de combustible con el vapor generado, aumentando así la temperatura en esa zona. La **Figura 11** ilustra este proceso de calentamiento.

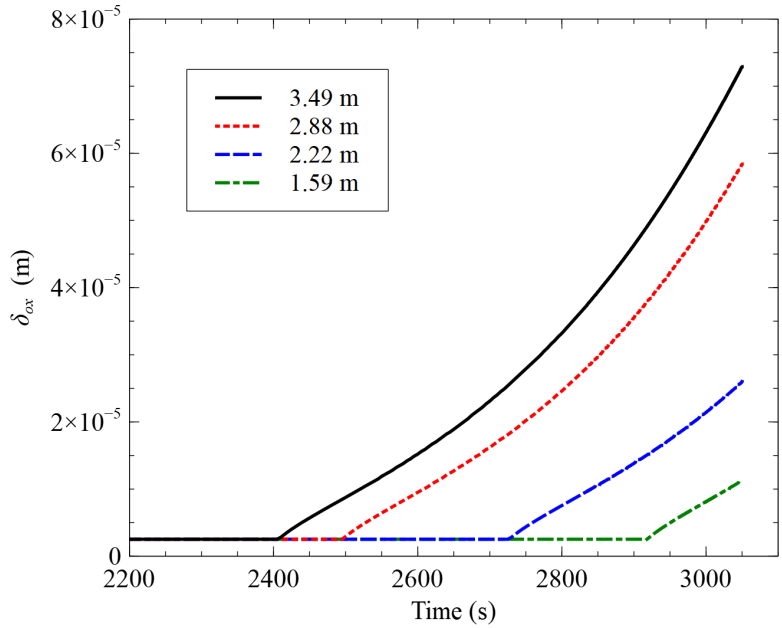


Figura 8. Crecimiento de la capa de ZrO_2 a diferentes niveles de la barra de combustible.

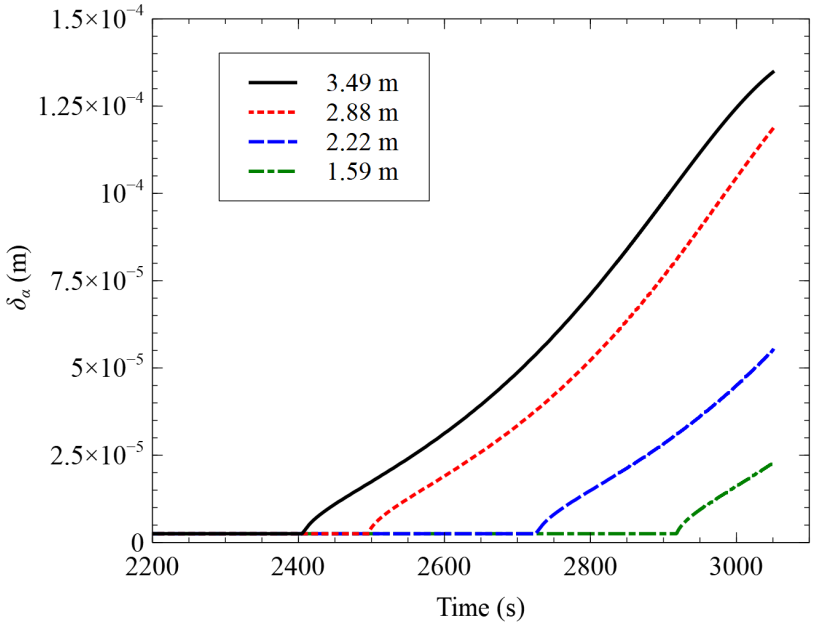


Figura 9. Crecimiento de la capa de *α*-ZrO a diferentes niveles de la barra de combustible.

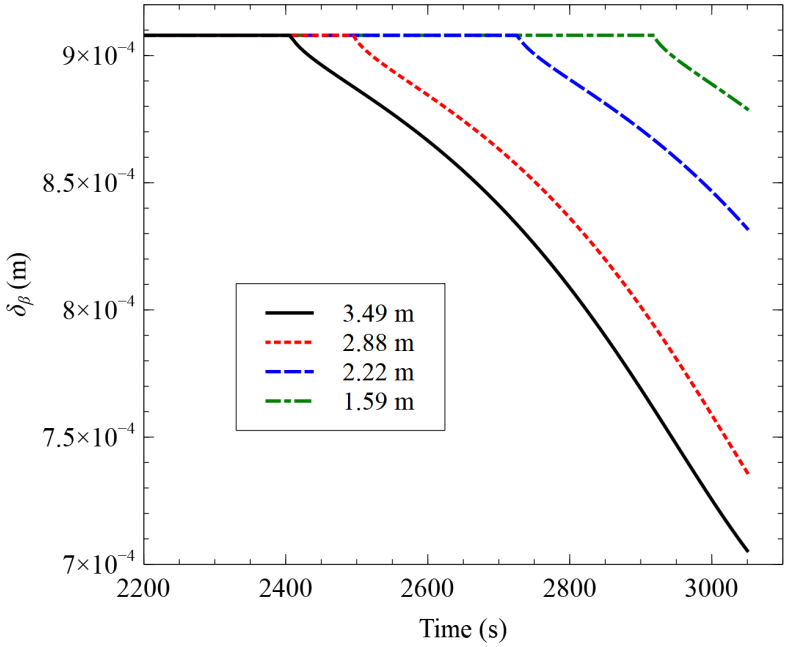


Figura 10. Decremento de la capa de *β*-ZrO a diferentes niveles de la barra de combustible.

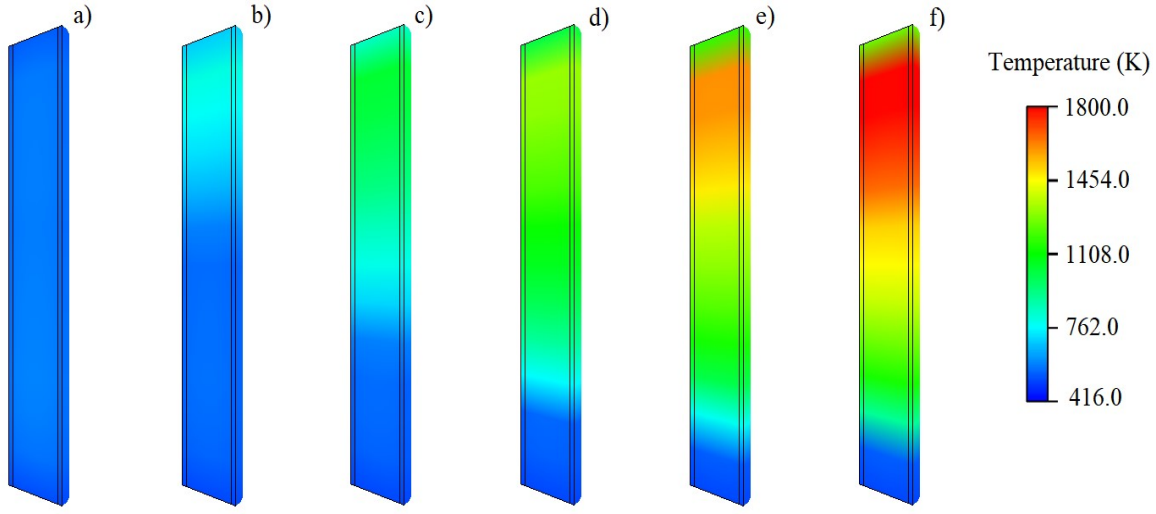


Figura 11. Proceso del calentamiento de la barra de combustible en el STSBO a los tiempos a) 1200 s, b) 1607.9 s, c) 2007.2 s, d) 2458.0 s, e) 2843.0 s, f) 3050.0 s.

Con el presente modelo es posible de mostrar el perfil de concentración de O_2 en Zr a través del encamisado, el cual se muestra en la **Figura 12** en la altura de 3.49 m de la barra de combustible a diferentes tiempos, en donde se puede observar la dinámica de las fases de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO como se ilustró en la **Figura 3**.

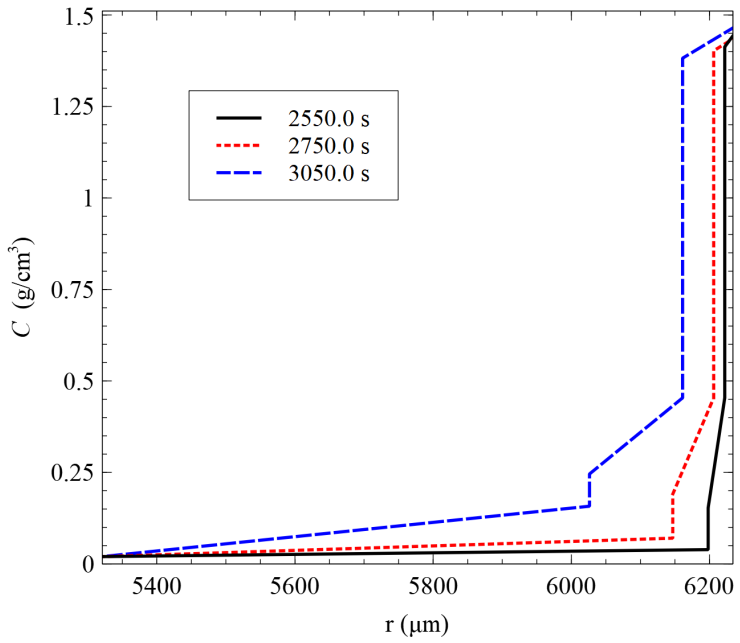


Figura 12. Concentración de O_2 en el encamisado en la altura de la barra de 3.49 m.

En términos generales, los resultados comparados con datos reportados por Polo-Labarrios et al [17] en un escenario STSBO, con el presente estudio muestran una excelente similitud en la

cantidad de hidrógeno generado con una diferencia del -1.7% para la comparación con RELAP/SCDAP y -1.11% para la comparación con MELCOR

4. CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrollo de un modelo matemático para simular el proceso de oxidación en el encamisado de las barras de combustible debido al contacto con vapor en el rango de temperaturas de 1273 K a 1800 K. Este modelo considera el proceso de difusión de O_2 en Zircaloy, lo cual permite determinar la dinámica de generación por oxidación de las fases de ZrO_2, α-ZrO y β-ZrO y su retroalimentación en la transferencia de calor en las barras de combustible por la energía liberada durante la reacción de oxidación.

El modelo se desarrolla para una barra de combustible equivalente, donde el análisis de la transferencia de calor en la barra de combustible se realiza en las direcciones radial y axial, mientras que el transporte de calor en el vapor generado por evaporación es unidimensional. Se considera la oxidación del encamisado por difusión de O_2 y la retroalimentación del calor liberado por la reacción de oxidación.

Este modelo permite determinar el espesor de la capa de ZrO_2 en el encamisado y la cantidad de H_2 generado por reacción. Los resultados fueron comparados con datos reportados por Polo-Labarrios et al [17] en un escenario STSBO, donde el presente estudio mostró una excelente similitud en la cantidad de hidrógeno generado con una diferencia del -1.7% para la comparación con RELAP/SCDAP y -1.11% para la comparación con MELCOR. Por otro lado, las tendencias entre el presente estudio y MELCOR fueron parecidas en la evolución del escenario STSBO, pronosticando la temperatura máxima de 1800 K con una diferencia de 12 s.

Una de las ventajas de este modelo es que permite determinar el perfil de concentración de O_2 difundido en el Zr del encamisado, que a diferencia de los códigos como RELAP/SCDAP y MELCOR no pueden calcular [18], sin embargo, con los resultados comparados en este trabajo, es posible observar que mediante las ecuaciones parabólicas de crecimiento de ZrO_2 con las que trabajan ambos códigos se obtienen resultados consistentes.

REFERENCIAS

1. Baker, L. Jr. (1983). Hydrogen-generating reactions in LWR severe accidents: Chapter 16. United States: American Nuclear Society.
2. D. R. Olander, “Materials chemistry and transport modeling for severe accident analyses in light-water reactors I: external cladding oxidation,” *Nuclear Engineering and Design*, **vol. 148**, no. 2-3, pp. 253–271, 1994.
3. N. E. Todreas, M. S. kazimi “Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals”, Hemisphere Publishing Corporation, 1990.
4. G Espinosa-Paredes, EG Espinosa-Martinez “Fuel rod model based on Non-Fourier heat conduction equation” Annals of Nuclear Energy, **Vol. 36** (5), 680-693.
5. Hagrman, D L, & Reymann, G A. ”MATPRO-Version 11: a handbook of materials properties for use in the analysis of light water reactor fuel rod behavior.” United States.

6. Petersen, H.”The properties of helium: density, specific heats, viscosity, and thermal conductivity at pressures from 1 to 100 bar and from room temperature to about 1800 K” (RISO--224). Denmark.
7. RELAP5/MOD3 code manual: Code structure, system models, and solution methods. Volume 1. United States. doi:10.2172/105079.
8. Lamarsh, J. R., & Baratta, A. J. (2001). Introduction to nuclear engineering. Upper Saddle River, N.J: Prentice Hall.
9. Milinchuk, V.K., Klinshpont, Eh.R., Belozerov, V.I., & Zagorodnyaya, A.V. “Hydrozirconium reaction in heterogeneous compositions”. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenij Yadernaya Ehnergetika, (4), 23-30.
10. Ikeda, T, Naitoh, M, Katsuragi, K, & Shirakawa, N. “Analysis of international standard problem no.45, QUENCH06 test at FZK by detailed severe accidents analysis code”, IMPACT/SAMSON. Korea, Republic of.
11. Sethumadhavan, V., Sathe, S.M., Sunil Kumar, Khan, K.B., & Sah, D.N. (1997). ”High temperature steam oxidation of zircaloy-2 cladding of PHWR fuel element“ (BARC--1997/E/016). India
12. Chung H. M., and KassnerT. K., "Pseudo-binary Zircaloy-Oxygen Phase Diagram" J. Nuc. Mater., **84** (1979) 327.
13. Pawel R. E., Cathcart J. V. and Mckee R. A., The Kinetics of Oxidation of Zircaloy-4 in Steam at High Temperatures", Jr. of Elec. Sc & Tech, **vol. 126**, No. 7, July 1979, p1105.
14. Iglesias F. C, Dunkan D. B., Sagat S. and Stills H. E., "Verification of the FROM Model for Zircaloy Oxidation During High Temperature Transients", J. Nuc. Mater., **130** (1985)36.
15. Malang S. and Neitzel H. J., IAEA Report IWGFPT/16, 1983, p213-219.
16. Patankar, S. V. (1980). Numerical heat transfer and fluid flow. Hemisphere Publishing Corporation (CRC Press, Taylor & Francis Group). ISBN: 978-0891165224.
17. Polo-Labarrios, M.A., & Espinosa-Paredes, G. (2015). “Comparative study of the hydrogen generation during short term station blackout (STSBO) in a BWR” Annals of Nuclear Energy (Oxford), 274-282.
18. He, Xiaoqiang, Yu, Hongxing, Jiang, Guangming, Dang, Gaojian, Wu, Dan, & Zhang, Yu. “Cladding oxidation model development based on diffusion equations and a simulation of the monoclinic-tetragonal phase transformation of zirconia during transient oxidation”.Journal of Nuclear Materials, **451**(1-3), 55-64

Cálculo de los Parámetros del Combustible 8x8 Depositado en la Alberca de Combustible Gastado de un BWR

José Luis Montes Tadeo, Raúl Perusquía, José Luis Hernández Martínez, Javier Ortiz Villafuerte
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, Estado de México
México CP 52750

joseluis.montes@inin.gob.mx; raul.perusquia@inin.gob.mx; joseluis.hernandez@inin.gob.mx; javier.ortiz@inin.gob.mx

Resumen

En este trabajo se presentan los resultados de la simulación con el código SNF de 1,104 ensambles de combustible tipo 8x8 de un reactor BWR. Este combustible ha sido retirado del núcleo del reactor al terminar su vida útil y depositado en la alberca de combustible gastado del reactor en consideración. Se hace un seguimiento individual del desempeño de cada ensamble de combustible y se calcula la concentración de los isótopos más relevantes. La elección de los isótopos se hace con base en las recomendaciones de la guía reguladora 1.183 de la NRC. Se calcula para cada ensamble el calor y tasa de decaimiento en función del tiempo de enfriamiento del combustible. Se muestran los isótopos de mayor importancia por su concentración, actividad y calor de decaimiento. Se usa una fecha de referencia para conocer los resultados de estos parámetros en la alberca de combustible gastado, asociados al total de ensambles de combustible gastado analizados. Se muestran además los resultados para el comportamiento de dichos parámetros hasta un tiempo de enfriamiento de 100 mil años, incluyendo el momento en que se descarga cada ensamble de combustible. El código SNF utiliza los resultados del seguimiento operativo de diez ciclos de operación del reactor. La simulación del reactor en tres dimensiones en estado estacionario se lleva acabo usando el código SIMULATE5. Finalmente, se analiza el comportamiento de los parámetros mencionados para los ensambles de combustible que alcanzan el mayor quemado.

1. INTRODUCCIÓN

En cada ciclo de operación de un reactor de potencia de agua en ebullición (BWR, de sus siglas en inglés) se retira de su núcleo alrededor de una carta parte de la cantidad de ensambles de combustible para ser depositados en la alberca de combustible gastado. A partir de este momento comienza su período de enfriamiento. En el momento de descarga el combustible presenta los valores más elevados de decaimiento y calor radiactivo. Por otra parte, el diseño de combustible nuclear evoluciona de manera permanente, por lo que es usual que un reactor incluya en su historial de operación diferentes diseños de combustible. En el presente trabajo se analiza el

diseño de combustible que fue descargado después de operar durante los primeros diez ciclos de operación del reactor. De este diseño se tienen dos variantes, en la primera de ellas el ensamble incluye dos varillas centrales de agua, en el otro caso el diseño sólo tiene una barra central de agua. Para el periodo de los diez ciclos se realiza la simulación del desempeño operativo de cada ensamble de combustible. Los resultados de esta simulación se usan como datos de entrada en el código SNF [1], el cual calcula el decaimiento radiactivo, la concentración, y el calor de decaimiento de los 387 radionúclidos más relevantes de cada ensamble gastado de combustible.
El código SNF ha sido incorporado al sistema de simulación del núcleo de reactores de agua ligera conocido como CMS (del inglés, Core Management System). Este programa computacional surge como una importante herramienta que complementa el alcance que tienen códigos estándar como el código ORIGEN [2] del sistema SCALE [3]. Por ejemplo, en [4], se describe su aplicación para auxiliar en la estimación del contenido isotópico y actividad del combustible nuclear gastado con base en la información de los simuladores del manejo del combustible dentro del núcleo del reactor. En esta referencia se describe un procedimiento basado en el historial de agotamiento individualizado de cada ensamble de combustible, permitiendo abrir la posibilidad de optimizar las cargas de los contenedores desde el punto de vista de criticidad, calor de decaimiento y fuentes de emisión de radiación.

En la siguiente sección se describe la metodología utilizada para realizar la serie de cálculos requeridos, posteriormente se presentan los principales resultados obtenidos y finalmente algunas conclusiones que se derivan del contenido del presente trabajo.

2. METODOLOGÍA

Se ha utilizado el sistema CMS5 para generar los resultados que se presentan en este trabajo. Esta versión es la más actualizada que actualmente se ha liberado. De dicho sistema se han utilizado los códigos CASMO5 [5] y CMSLINK5 [6] para la generación de las bibliotecas usadas tanto para la simulación del reactor con el código SIMULATE5 [7], como por el código SNF.

Como se mencionó el combustible 8x8 considerado presenta dos variantes. A la primera de ella se ha denominado tipo A (TA), para este tipo se tienen 3 lotes de combustible. La segunda variante del combustible se identifica como tipo B (TB), para este segundo tipo de combustible se tienen 12 lotes.

El procedimiento de cálculo es el siguiente:

a) Generación de parámetros nucleares para los celdas o segmentos de combustible de los 15 lotes de combustible.

    a. Formación de las bibliotecas tanto en condición fría (CZP), como caliente (HFP) con la información generada para los 15 lotes de combustible.

b) Formación del modelo tri-dimensional de simulación estática del núcleo del reactor.

    a. Simulación de la operación del reactor durante los diez ciclos en que se utilizó el combustible analizado.

c) Finalmente, cálculos de post-irradiación de cada uno de los 1104 ensambles quemados que se depositan en la alberca del combustible gastado del reactor.

Las primeras dos etapas de cálculo (a), b)) representan por ellas mismas fines propios. Puesto que los resultados de estas etapas se pueden usar no solamente para el cálculo de post-irradiación que es la parte que se presenta en el presente trabajo. Por ejemplo, los resultados de la parte a) puede usarse para otros códigos del sistema CMS, no solamente para SIMULATE. Los de la parte b) permiten realizar análisis del desempeño del núcleo del reactor. Por lo que se mencionará con mayor detalle la parte c).

La mayoría de los resultados se generan y presentan de acuerdo a las recomendaciones de la guía reguladora 1.183[8]. Esta guía forma parte de la documentación de la Comisión Reguladora Americana (NRC, por sus siglas en inglés). En resumen, esta guía reguladora describe la normativa que permite establecer un término fuente para diversos análisis y evaluaciones del reactor. Es importante mencionar que no es el propósito de este trabajo obtener un término fuente.
Por su importancia notable en los análisis de accidentes y propósitos de análisis radiológicos, la mencionada guía recomienda analizar el comportamiento de los siguientes elementos químicos y los radionúclidos asociados a éstos:

Tabla I. Grupos de radionúclidos

Grupo	Elementos
Gases Nobles	Xe, Kr
Halógenos	I, Br
Metales Alcalinos	Cs, Rb
Grupo de Telurio	Te, Sb, Se, Ba, Sr
Metales Nobles	Ru, Rh, Pd, Mo, Tc, Co
Grupo de Cerio	Ce, Pu, Np
Lantánidos	La, Zr, Nd, Eu, Nb, Pm, Pr, Sm, Y, Cm, Am

Con base en la información que se presenta en la Tabla I, se hace un seguimiento de los grupos, de radionúclidos o bien de los isótopos que tienen mayor relevancia básicamente en tres parámetros de cada ensamble de combustible gastado, a saber: a) Calor de decaimiento, b) Concentración y c) Decaimiento radiactivo. Adicionalmente a estos parámetros, se toma en cuenta el quemado de los ensambles; así como el ciclo de operación del ensamble o lote de combustibles gastados.

3. RESULTADOS

Los resultados se presentan en diferentes secciones, las cuales se distinguen por las distintas condiciones de análisis consideradas para su obtención. Las cuales son: a) Tiempo de descarga (TD) y de 60 años de enfriamiento a partir de TD, b) Parámetros del total de ensambles tipo 8x8 depositados en la alberca de combustible a una fecha de referencia, c) Decaimiento radioactivo total de los diferentes grupos de la Tabla I y para cada uno de los diez ciclos de operación del reactor, d) Parámetros de los lotes de combustible gastado, e) Equivalencia en quemado entre ensambles del tipo A y tipo B, f) Concentración de radionúclidos como función del tiempo de enfriamiento del combustible gastado, g) Parámetros de los combustibles gastados de mayor y menor quemado.

3.1. Tiempo de descarga y de 60 años de enfriamiento del combustible gastado

Se presentan los resultados para cada uno de los grupos de radionúclidos descritos en la Tabla I. Corresponden a dos ensambles de cada uno de los tipos TA y TB. Estos ensambles gastados alcanzaron el mínimo y máximo quemado durante su vida útil de operación. El quemado mínimo y máximo es de 2,662.2 y 32,505.4 MWd/tHM para los ensambles del tipo TA respectivamente. El quemado mínimo y máximo es 31,338.4 y 45,707.8 MWd/tHM para los ensambles del tipo TB respectivamente.

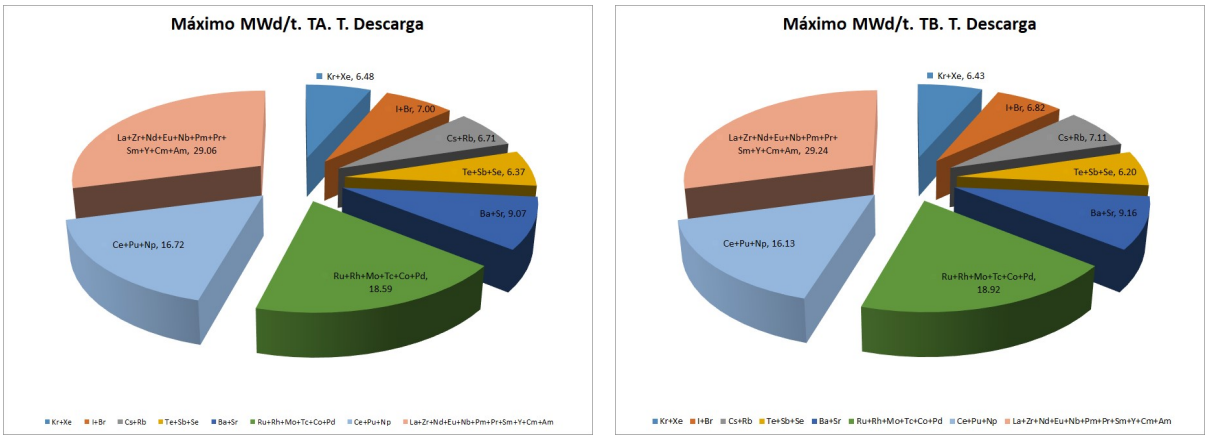


Figura 1. Distribución del decaimiento radioactivo (Bq/t) para las dos variantes de combustible 8X8 analizado, al momento de ser descargados del núcleo

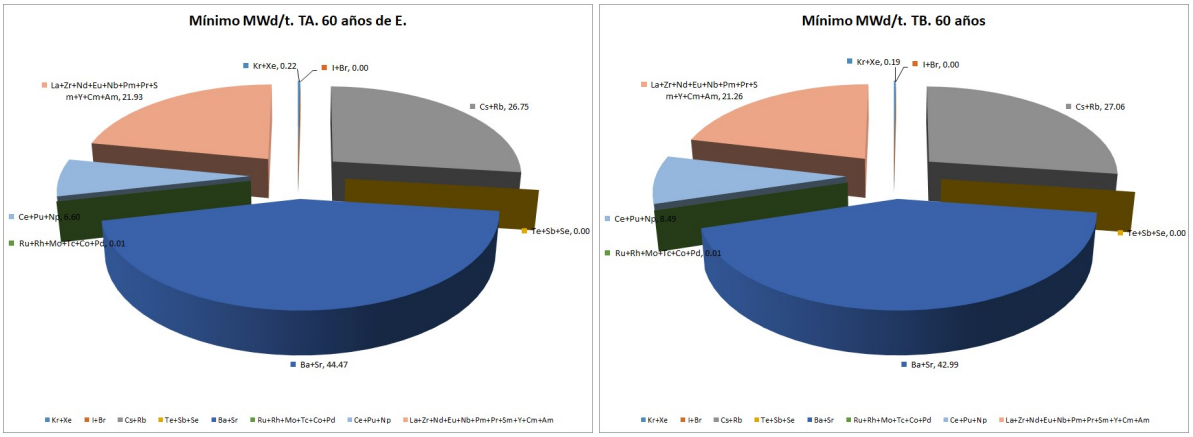


Figura 2. Decaimiento radioactivo (Bq/t), combustibles de menor quemado, 60 años después de ser descargados del núcleo

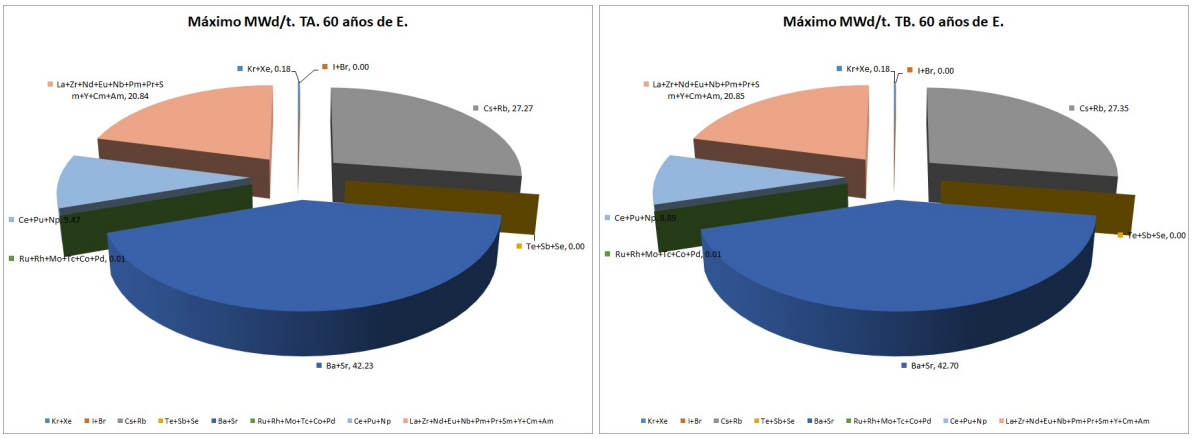


Figura 3. Decaimiento radioactivo (Bq/t), combustibles de mayor quemado, 60 años después de ser descargados del núcleo

Como puede notarse gráficamente, los comportamientos de las actividades son muy semejantes para condiciones iguales. La mayor diferencia entre la actividad total de los grupos se observa en el momento de la descarga (TD) con un valor de 1.635E18 Bq/t.

3.2. Cantidad total de ensambles tipo 8x8 depositados en la alberca de combustible

En esta sección se muestran los resultados correspondientes al efecto total de los 1,104 ensambles en la alberca de combustible gastado, cuando sus propiedades se evalúan en un momento específico, la fecha de referencia para este caso es el día 2 de julio de 2020. Es una fecha arbitraria que sólo muestra el propósito descrito.

La Tabla II muestra el calor de decaiminento (CD) en la alberca de combustible gastado de los 10 isótopos más relevantes del combustible 8x8 analizado.

Tabla II. Calor de decaimiento de 1,104 ensambles tipo 8x8

#	Isótopo	W/t	%
1	BA137M	218.0695	27.33
2	Y90	217.9895	27.32
3	PU238	83.6819	10.49
4	AM241	73.8515	9.26
5	CS137	65.3426	8.19
6	CM244	53.5671	6.71
7	SR90	45.7098	5.73
8	PU240	15.3868	1.93
9	EU154	9.0501	1.13
10	PU239	8.0228	1.01
	Resto	7.1378	0.89

En la Tabla III se muestra la concentración en gramos por tonelada (g/t) de los 10 isótopos más relevantes del total de ensambles combustibles 8x8 analizados.

Tabla III. Concentración (g/t) de 1,104 ensambles tipo 8x8

#	Isótopo	g/t
1	PU239	4.1616E+03
2	PU240	2.1773E+03
3	CS137	6.7522E+02
4	AM241	6.4572E+02
5	SR90	2.7864E+02
6	PU238	1.4744E+02
7	CM244	1.8923E+01
8	EU154	3.6863E+00
9	Y90	7.2401E-02
10	BA137M	1.0313E-04

La Tabla IV muestra la actividad (Bq/t) de los diez isótopos más relevantes de los 1,104 ensambles de combustible gastado 8x8 analizados. Gráficamente se presentan los resultados en las Figuras 4 y 5.

Tabla IV. Actividad radiactiva (Bq/t) de 1,104 ensambles tipo 8x8

#	Isótopo	Bq/t	%
1	CS137	2.1749E+15	21.07
2	BA137M	2.0538E+15	19.90
3	Y90	1.4569E+15	14.12
4	SR90	1.4565E+15	14.11
5	PU241	1.2422E+15	12.04
6	PU238	9.3434E+13	0.91
7	AM241	8.1898E+13	0.79
8	KR85	7.2729E+13	0.70
9	CM244	5.5394E+13	0.54
10	EU154	3.6531E+13	0.35
	Resto	1.5971E+15	15.47

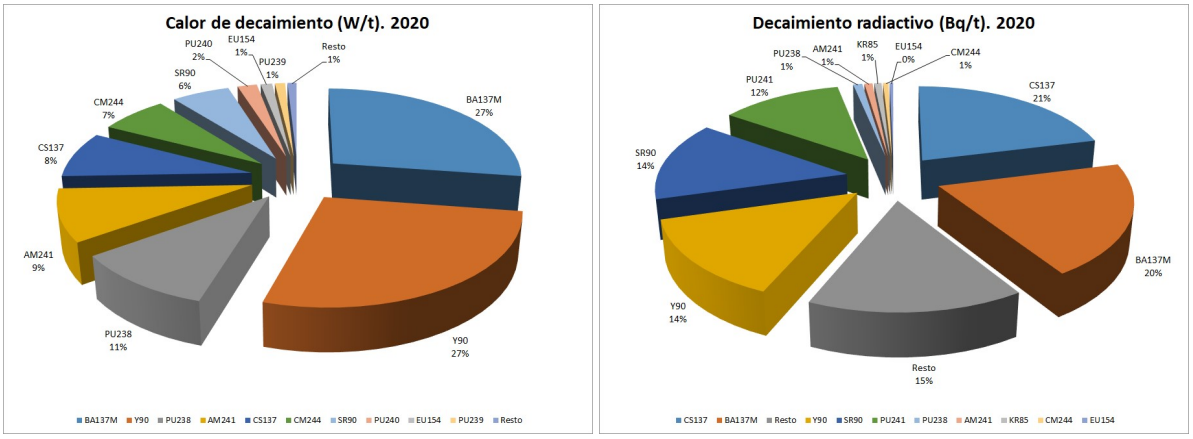


Figura 4. Calor (W/t) y Decaimiento radioactivo (Bq/t) de 1104 ensambles tipo 8x8

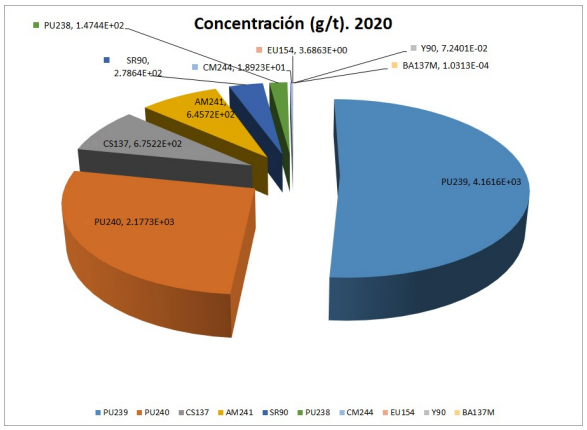


Figura 5. Concentración (g/t) de 1104 ensambles tipo 8x8

3.3. Decaimiento radiactivo en función del tiempo de enfriamiento

En esta sección se presentan los resultados del decaimiento radioactivo total de los diferentes grupos de la Tabla I. Por motivo de espacio se presenta sólo un par de casos de los ciclos de operación del reactor. Se presentan 4 intervalos de tiempo de enfriamiento, a partir de la condición de fin de ciclo EOC (de siglas en inglés): 0 a100 mil años, 0 a 100 años, 0 a 60 años, y 0 a 5 años.

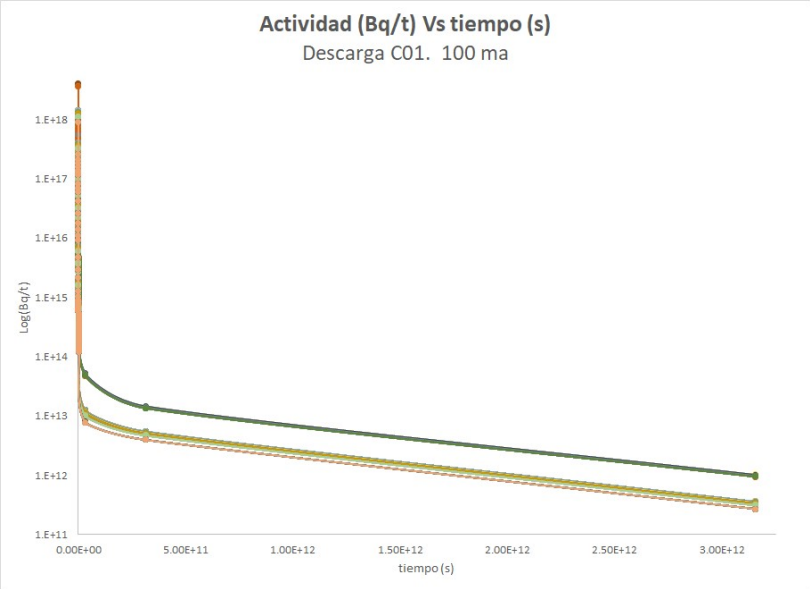


Figura 6. Decaimiento radiactivo total de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento. TD a 100 mil años, EOC 1

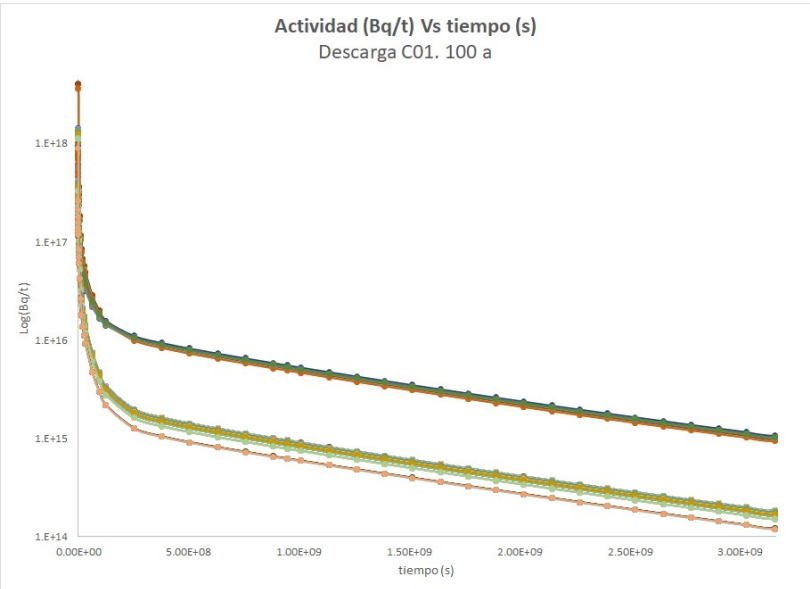


Figura 7. Decaimiento radiactivo total de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento. TD a 100 años, EOC 1

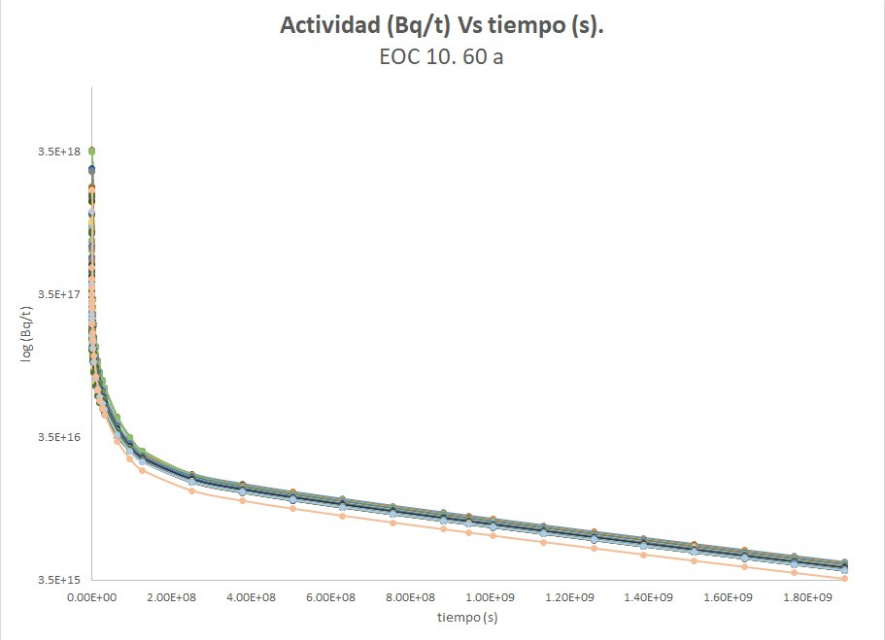


Figura 8. Decaimiento radiactivo total de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento. TD a 60 años, EOC 10

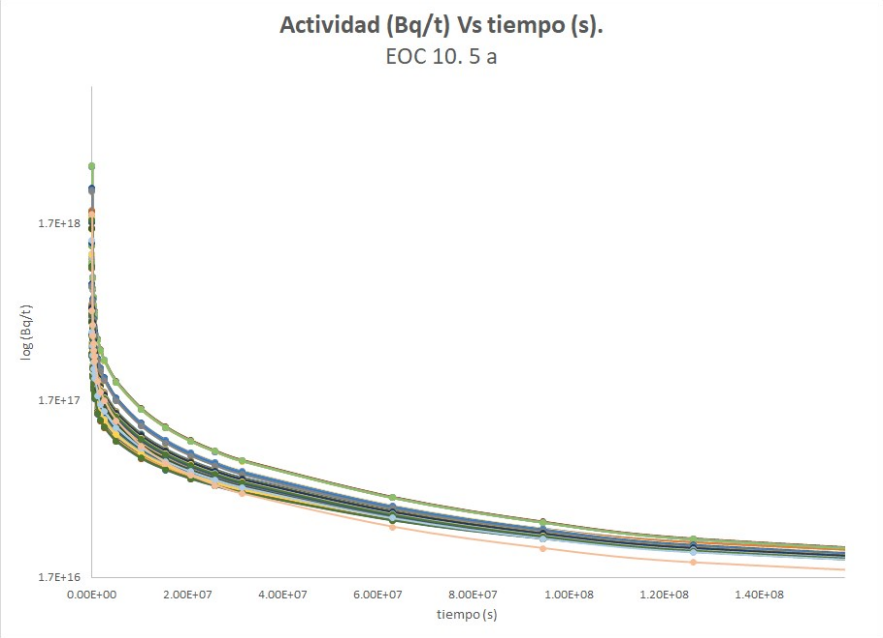


Figura 9. Decaimiento radiactivo total de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento. TD a 5 años, EOC 10

Las figuras 6 y 7 muestran el decaimiento total (Bq/t) de los 92 ensambles descargados al final de la operación del ciclo 1. Las figuras 8 y 9 corresponden a 108 ensambles descargados al final del ciclo 10.

De interés también es conocer el desempeño de cada lote y sub-lote de combustible gastado. En las Figuras 10 y 11 se presenta el comportamiento del decaimiento radiactivo (Bq/t) en función del tiempo de enfriamiento, por lote de combustible gastado. Se presentan los ensambles de mayor y menor actividad de todos los sub-lotes tanto del tipo A como del tipo B del combustible 8x8 analizado.

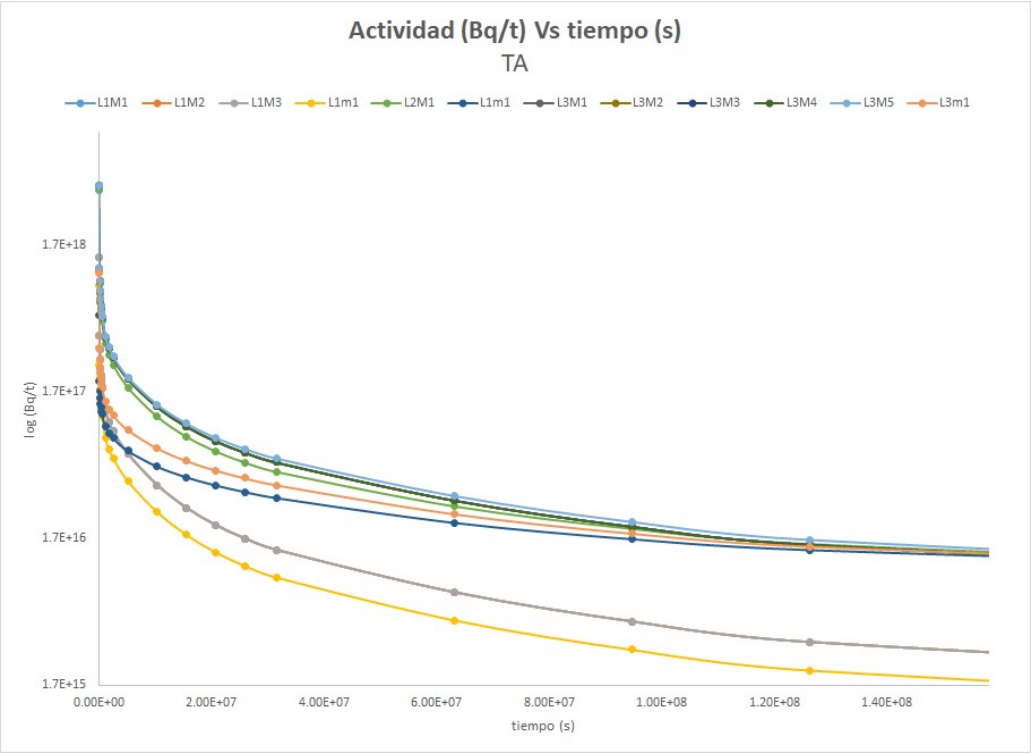


Figura 10. Decaimiento radiactivo de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento, por lote de combustible TA

En estas dos figuras, 10 y 11, el número de lote se idéntica por L, m indica el valor menor de actividad, mientras que M el mayor valor. El intervalo de tiempo de enfriamiento va desde 0 a 5 años. Es notable la dispersión mayor para los lotes de combustible correspondientes al tipo de combustible A.

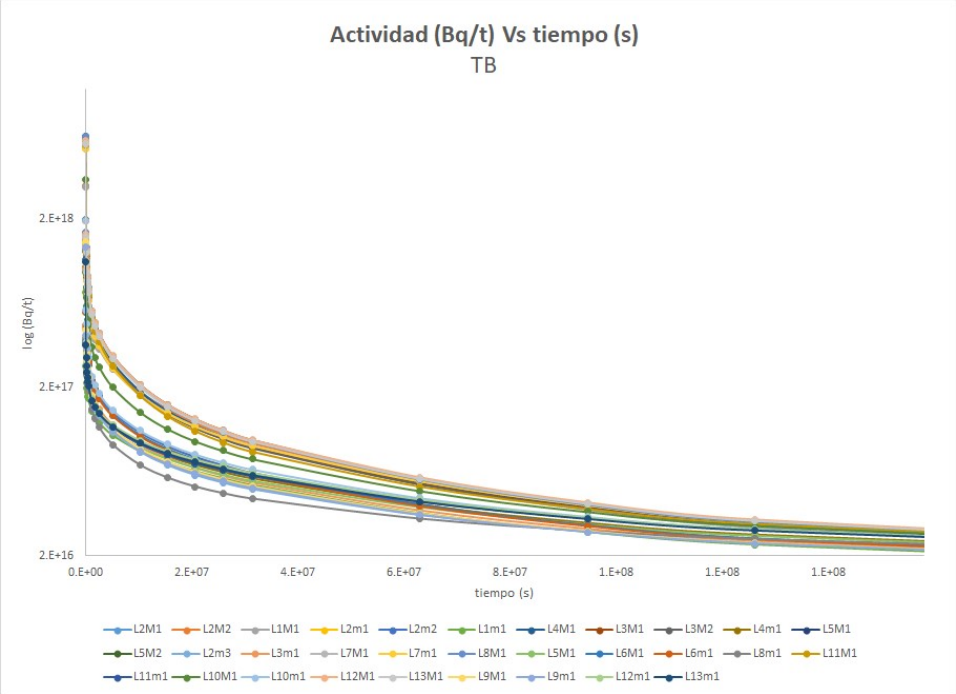


Figura 11. Decaimiento radiactivo de los grupos de radionúclidos en función del tiempo de enfriamiento, por lote de combustible TB

3.4. Ensambles equivalentes entre los tipos TA y TB

Con la idea de evaluar el desempeño de las dos variantes del combustible 8x8 analizado, se ha hecho una comparación del comportamiento de la actividad de cada grupo de radionúclidos descritos en la Tabla I para dos ensambles con quemados aproximadamente iguales, 31,000 MWd/t. Los resultados se resumen en la Tabla V.

Tabla V. Comparación de la actividad entre TA y TB

Grupo	(TA - TB/TA)*100
Kr+Xe	-9.73
Te+Sb+Se	-8.47
La+Zr+Nd+Eu+Nb+Pm+Pr+Sm+Y+Cm+Am	-3.89
Ba+Sr	-2.23
Cs+Rb	0.51
Ru+Rh+Mo+Tc+Co+Pd	2.69
I+Br	8.00
Ce+Pu+Np	9.37
Promedio	5.61

Las distribuciones de actividad (Bq/t) se muestran en la figura 12.

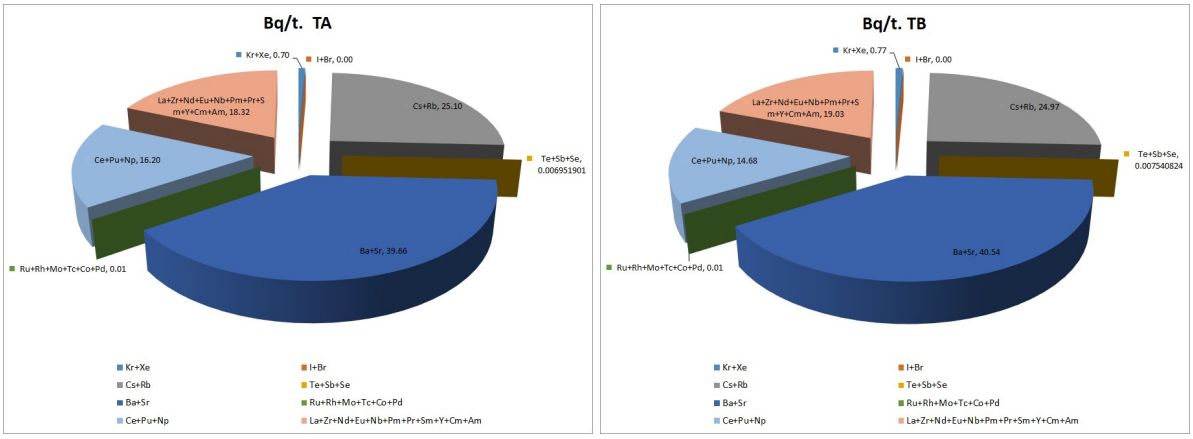


Figura 12. Decaimiento radiactivo (Bq/t) de los grupos de radionúclidos de los tipos A y B

Se toma la misma fecha de referencia de los casos anteriores. La mayor diferencia se observa para el caso de los gases nobles.

Usando los resultados del ensamble de mayor quemado del tipo B se muestra en la figura 13 el comportamiento de la concentración (g/t) de cada uno de los elementos químicos que se incluyen en la Tabla I.

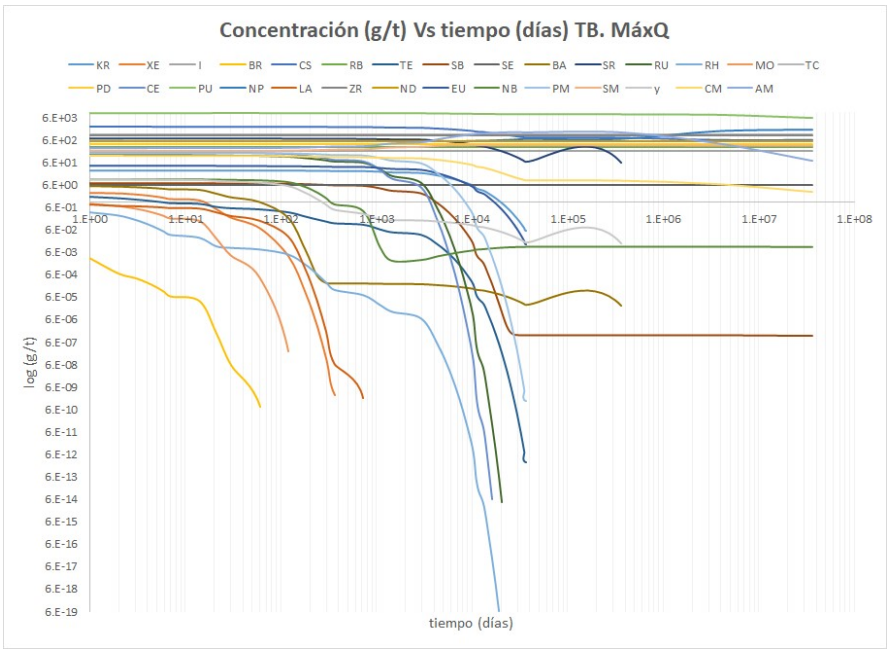


Figura 13. Concentración (g/t) de los elementos químicos considerados. Ensamble de combustible TB

Para cada uno de los elementos químicos que se muestran en la figura anterior se puede conocer el comportamiento de los isótopos que lo forman, como ejemplo se muestra el comportamiento de la concentración (g/t) de cada uno de los isótopos del Am que reporta el código SNF. Los resultados corresponden al ensamble de la figura 13 y, además, se adicionan los correspondientes resultados para el ensamble de menor quemado, del mismo tipo de combustible.

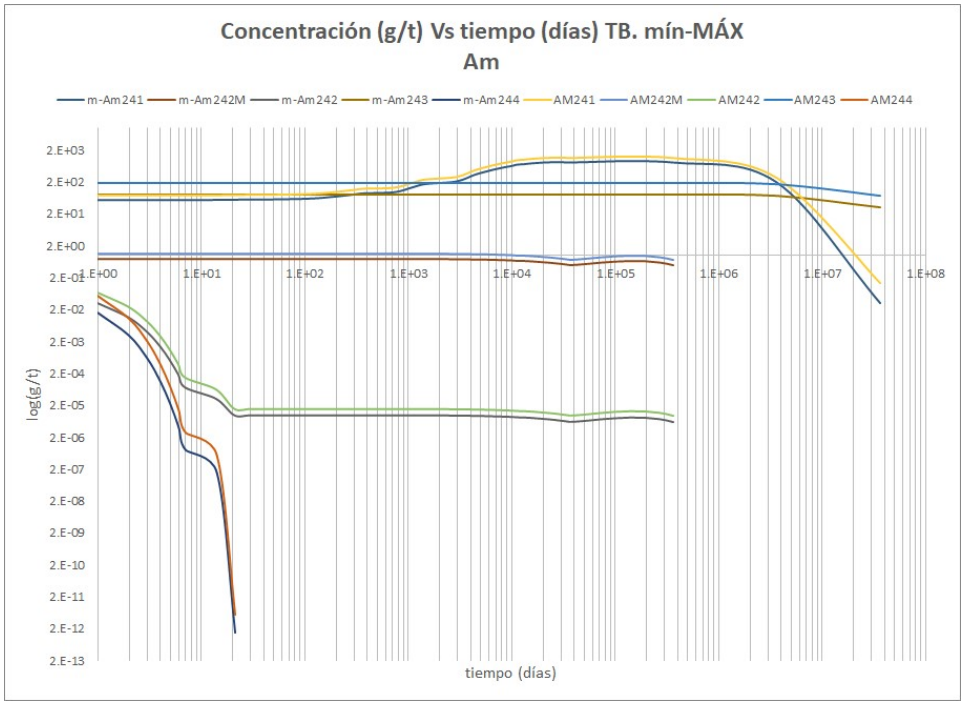


Figura 14. Concentración (g/t) de los isótopos del Am que reporta SNF. Ensambles de combustible TB

En la figura 14, los resultados para el combustible de menor quemado se denotan con "m-" al inicio del nombre del isótopo.

Finalmente, para el ensamble de mayor quemado del tipo B se presenta en la figura 15 el comportamiento del calor de decaimiento (CD) de 61 isótopos cuyo valor se mantiene después de alcanzar el tiempo de enfriamiento de cinco años. Se resaltan los isótopos que tienen la mayor aportación al calor de decaimiento del ensamble de combustible gastado analizado.

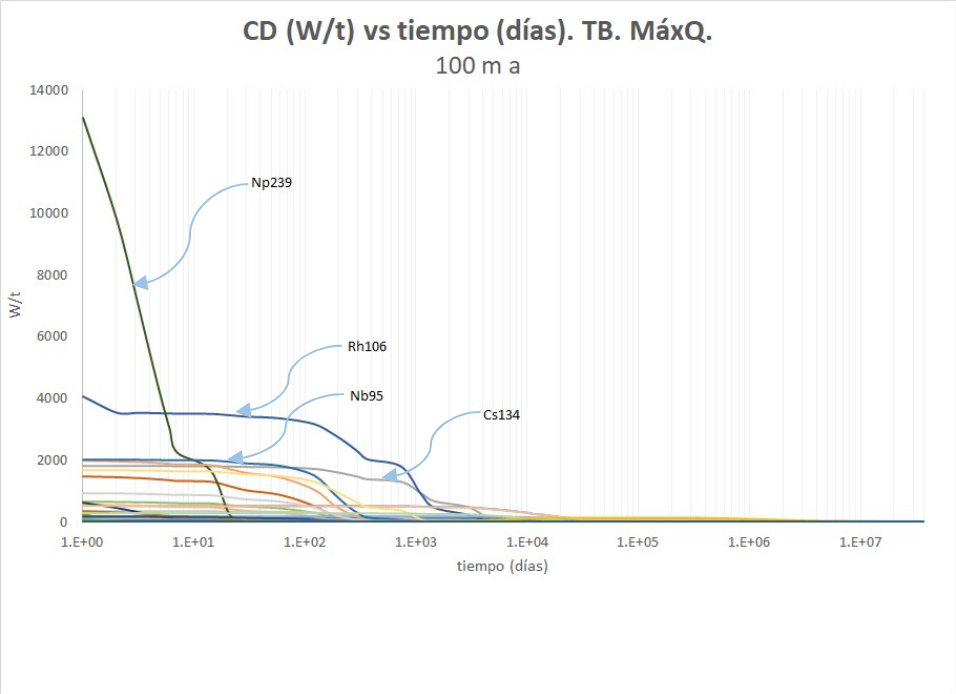


Figura 15. Calor de decaimiento de 61 isótopos de un combustible tipo B en función del tiempo de enfriamiento

4. CONCLUSIONES

Se presenta un análisis de los parámetros más relevantes del combustible gastado del tipo 8x8 que se utilizó durante diez ciclos de operación en un reactor BWR. Se realiza un seguimiento particular del contenido isotópico de cada uno de los ensambles de combustible gastado a partir de que se descarga del núcleo del reactor hasta distintas fechas de enfriamiento. Las fechas se escogen en función de eventos especiales tanto para el combustible como para la planta misma. Se incluyen, por ejemplo, los cinco años de enfriamiento del combustible con el interés que puede generar el estado que guarda con propósitos de su almacenamiento en silos secos. Los resultados que se presentan son parte de la aplicación que se ha empezado a hacer del código SNF. El cual muestra un potencial importante de aplicación para las actividades del manejo del combustible gastado de un reactor nuclear. Esta situación sugiere complementar su uso con el de códigos estándar en este tipo de cálculos como lo es el código ORIGEN. En particular para este trabajo se puso particular atención a las recomendaciones derivadas de la guía reguladora 1.183 de la NRC.

AGRADECIMIENTOS

Los autores reconocen el apoyo de SENER-CONACYT, a través de su Fondo de Sustentabilidad Energética, al proyecto FSE-2103-04-213519.

REFERENCIAS

1. T. Simeonov, G. Anton, J. D. Rhodes, A. Becker. SNF User's Manual. Studsvik, SSP-11/328 REV3. June 11, 2011.
2. I. C. Gauld, O. W. Hermann, R. M. Westfall, "ORIGEN-S: SCALE System Module to Calculate Fuel Depletion, Actinide Transmutation, Fission Product Buildup and Decay, and Associated Radiation Source Terms", Nuclear Science and Technology Division, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Volumen II, Sect. F7, (January 2009).
3. ORNL "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations", ORNL/TM-2005/39, Version 6, January 2009.
4. D. Rochman, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, M. Pecchia. "Consistent criticality and radiation studies of Swiss spent nuclear fuel: The CS2M approach." Journal of Hazardous Materials. 357, p. 384-392 (2018).
5. J. D. Rhodes, R.M. Ferrer, J. Hykes, D. Kropaczek. CASMO5. A fuel Assembly Burnup Program. User's Manual. Proprietary SSP-07/431 Rev 9. Studsvik. 2015.
6. T. Bahadir, R. M. Ferrer, J. D. Rhodes. CMSLINK5. User's Manual. SSP-10/437 Rev 5. Studsvik. 2015.
7. Studsvik Scandpower, SIMULATE5 Advanced Three-Dimensional Multigroup Reactor Analysis Code User’s Manual. SSP-10/438 Rev 5, 2015.
8. Regulatory Guide 1.183. Alternative Radiological Source Terms for Evaluating Design Basis Accidents at Nuclear Power Reactors. U.S. Nuclear Regulatory Commission. July 2000

Paralelización híbrida (MPI-OpenMP) en el código de transporte AZTRAN

Julian A. Duran Gonzalez, Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas
Av. Instituto Politécnico Nacional s/n Edificio 9 Unidad Profesional "Adolfo López Mateos", Col. San Pedro Zacatenco, Alc. Gustavo A. Madero, Ciudad de México, C.P. 07738, México
jdurang0900@alumno.ipn.mx; evalle@ipn.mx

Armando M. Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, Estado de México, C.P. 52750, México
armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

En el presente trabajo se describe el procedimiento llevado a cabo para realizar una paralelización híbrida (MPI-OpenMP) en el código neutrónico AZTRAN el cual está programado en Fortran 90. El código resuelve numéricamente la ecuación de transporte de neutrones en geometría cartesiana usando el método de ordenadas discretas. En los últimos años, el incremento de recursos computacionales ha permitido la tendencia de paralelizar códigos de simulación numérica con el fin de reducir tiempos de ejecución. La paralelización de la ecuación de transporte se logra con la descomposición en dominios de las variables independientes con la idea de asociar la descomposición en subdominios, los cuales son distribuidos en los CPU del equipo de cómputo. Los subdominios son resueltos de forma independiente y al terminar el cálculo éstos se comunican para actualizar la solución del dominio completo. En el código, la descomposición se hizo en las variables espacial (interfaz MPI) y energía (interfaz OpenMP) obteniendo una versión paralela híbrida. El Benchmark del ensamble de combustible C5G7 MOX en estado estacionario fue simulado obteniendo soluciones próximas a la referencia y en relación con la aceleración obtenida por la paralelización híbrida se encontraron resultados altamente satisfactorios. La confianza obtenida alienta a colocar al código como una herramienta doméstica para el análisis de reactores nucleares.

1. INTRODUCCIÓN

Para diseñar o analizar un reactor nuclear es esencial poder predecir la distribución de población de neutrones en cada celda del reactor. Esta distribución de neutrones es determinada por una ecuación de balance entre ganancias y pérdidas de neutrones, las cuales se llevan a cabo en el núcleo del reactor, el cual es gobernado por el transporte e interacción de los neutrones con los materiales del núcleo. Esta ecuación de balance (1) es nombrada ecuación de transporte de neutrones o también es conocida en la literatura como "ecuación de transporte de Boltzmann" (BTE), donde se encuentra que $\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)$ es el flujo angular de neutrones, $V(E)$ es la velocidad de los neutrones, $\Sigma_t(\vec{r},E,t)$ es la sección eficaz macroscópica total, y $S(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)$ es la fuente de neutrones.

$$\frac{1}{V(E)}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)+\hat{\Omega}\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)+\Sigma_t(\vec{r},E,t)\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)=S(\vec{r},\hat{\Omega},E,t) \qquad (1)$$

Se han realizado esfuerzos para encontrar una solución a la distribución de neutrones mediante métodos analíticos y numéricos. Sin embargo, debido a la complejidad y heterogeneidad del reactor nuclear los métodos analíticos no son viables. En vista de esto varias aproximaciones numéricas han sido desarrolladas para transformar la ecuación a un sistema algebraico de ecuaciones que se puede resolver en equipos de cómputo, pero demanda una gran cantidad de recursos computacionales.

El proyecto mexicano AZTLAN Platform [1,2], tiene como uno de sus objetivos desarrollar software doméstico para el análisis de reactores nucleares, una de las herramientas en desarrollo es el código AZTRAN (AZtlan TRANsport) [3,4], el cual resuelve la ecuación de transporte dependiente del tiempo numéricamente usando el método de ordenadas discretas [5] en geometría cartesiana. El código discretiza las 7 variables independientes con los siguientes métodos:

variable espacial $(\vec{r})$: método nodal RTN-0 (Raviart-Thomas-Nédélec)
variable energía (E): método de multigrupos
variable ángulo $(\hat{\Omega})$: método de ordenadas discretas S_N
variable tiempo (t): método θ

Luego la solución es obtenida por medio de métodos iterativos, la aproximación del flujo angular es obtenida usando el método de iteración de fuente [6], al resolver el estado estacionario para un problema de medio multiplicativo (medio con fisiones) la ecuación de transporte se convierte en un problema de valor propio por lo que se utiliza el clásico método de las potencias [7].

Tradicionalmente al hacer un análisis neutrónico de un núcleo completo de un reactor nuclear se usa una aproximación de menor orden como puede ser el método por difusión [8] debido a que se puede encontrar una solución al flujo neutrónico mucho más rápido si usara una aproximación por transporte, no obstante en la actualidad los recursos computacionales son inmensos y esto ha permitido que los códigos de transporte de neutrones sean paralelizados, lo que refiere a que se haga uso simultáneo e independiente de múltiples recursos computacionales para resolver un problema computacional y reducir los tiempos de ejecución. Esto con miras a simular problemas con mayor detalle y posiblemente hacer un análisis neutrónico de núcleo completo con códigos de transporte.

Para llevar a cabo la paralelización existen múltiples algoritmos, pero los más exitosos son los métodos de descomposición en dominios (DDM) [9], los cuales consisten en dividir el dominio total del problema en subdominios y estos son asignados a los recursos computacionales para ser resueltos de forma simultánea e irán iterando para coordinar una solución entre subdominios adyacentes.
En este trabajo la paralelización en AZTRAN se efectuó en la versión bidimensional en estado estacionario usando la interfaz MPI [10] sobre la variable espacial y la interfaz OpenMP [11] en la variable energía, con las que se obtuvieron reducciones de tiempo sobresalientes.

2. ESQUEMAS DE DESCOMPOSICIÓN EN DOMINIO PARALELO

Los algoritmos paralelos que resuelven la ecuación de transporte de neutrones han sido desarrollados y analizados en los últimos años. A medida que los ambientes de computación paralela se hicieron más frecuentes y los recursos computacionales más grandes, los desarrolladores buscaron algoritmos que utilizaran de manera más eficiente la totalidad de recursos computacionales disponibles para que pudieran escalar con la cantidad de procesadores.

La paralelización en la solución de transporte de neutrones se logra con mayor frecuencia con la descomposición en dominios de cualquier variable independiente: energía, angular o espacial. DDM es el acto de dividir las tareas a realizar entre los procesadores de acuerdo con la discretización de las variables independientes.

El rendimiento en paralelo suele cuantificarse con el "speedup" (2) el cual es la relación entre el tiempo de ejecución en serie y el tiempo de ejecución en paralelo.

$$S = \frac{T_{serie}}{T_{paralelo}} \tag{2}$$

Existen tres formas de aceleración:

La aceleración Ideal, en el cual el algoritmo se acelerará linealmente en proporción al número de procesadores ejecutados.

La aceleración sub-lineal, la cual es obtenida en la mayoría de los casos, es el resultado del trabajo adicional relacionado con la configuración de la ejecución paralela, la sobrecarga, el tiempo dedicado a la comunicación de datos y las operaciones adicionales que no se realizan en una ejecución secuencial, lo cual degrada el desempeño.

Finalmente, en raras ocasiones existe la aceleración super-lineal casi siempre está relacionado con los llamados efectos de caché. Los efectos de caché se refieren al beneficio de un conjunto de datos más pequeño que se ajusta a la caché de la unidad central de procesamiento (CPU) más fácilmente que un conjunto de datos más grande asociado con menos procesadores, lo que resulta en menos pérdidas de caché, lo que causa un speedup adicional al cómputo real.

2.1. Descomposición del Dominio en la variable Energía

La paralelización en la variable energía se llevó a cabo mediante el modelo de programación paralelo OpenMP (Open MultiProcessing), la cual es una interfaz estándar para definir programas de múltiples subprocesos. Su principal propósito es proporcionar una plataforma simple y flexible para desarrollar aplicaciones paralelas con C/C++ y Fortran.
OpenMP implementa un modelo "fork-join", el cual es una forma de configurar y ejecutar programas en paralelo, el programa inicia la ejecución en serie y se identifica la región paralela de manera que esa región se bifurca y se genera un equipo de "hilos" los cuales trabajan en forma simultánea, los cuales al terminar la tarea se reanuda la ejecución en secuencial.

Además, OpenMP se basa en un modelo de memoria compartida, esto significa que todos los hilos pueden acceder a la memoria disponible e interactúan con otros hilos mediante variables compartidas, en la Figura 1 se muestra la arquitectura de memoria compartida.

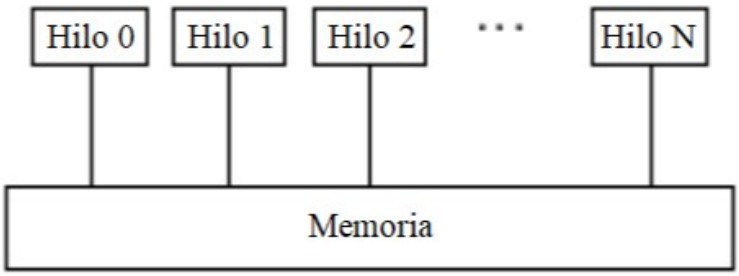


Figura 1. Arquitectura de Memoria Compartida

La descomposición en energía [12] se lleva a cabo asociando a cada grupo de energía un hilo, de esta forma en las subrutinas donde se encuentre un bucle asociado a la región paralela de energía, el conjunto de hilos resolverá de forma simultánea por grupo de energía hasta terminar barrer todos los grupos de energía. En la Figura 2 se presenta un ejemplo de un problema con 2 grupos de energía y la forma como se distribuye los subdominios en energía en 2 hilos usando OpenMP.

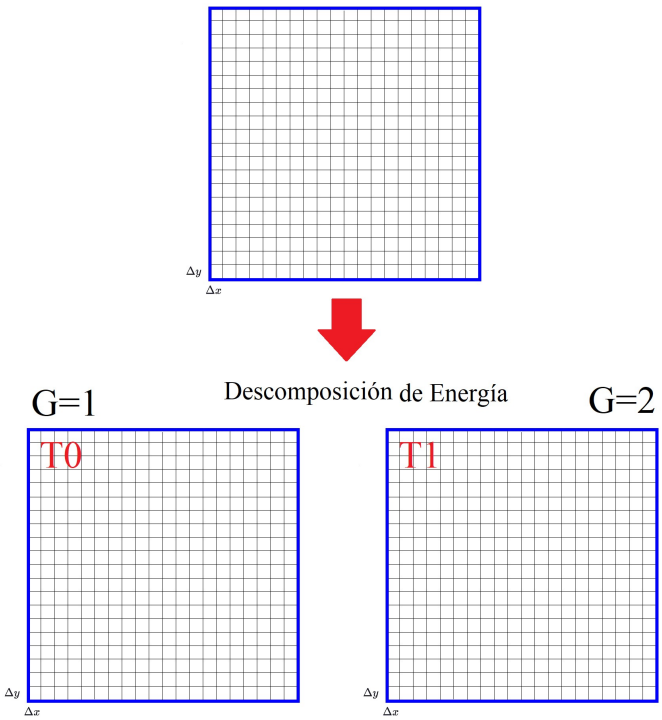


Figura 2. Descomposición en Energía

2.2. Descomposición del Dominio en la variable Espacial

En el caso de la paralelización en la variable espacial se empleó el modelo de programación paralelo MPI (Message Passing Interface), el cual es un protocolo de comunicación entre computadoras. MPI consiste en un conjunto de bibliotecas con rutinas que pueden ser utilizadas en programas escritos en C/C++ y Fortran.

MPI utiliza un modelo de memoria distribuida, el cual consiste en que un conjunto de "procesos" independientes con memoria local que pueden comunicarse con otros procesos enviando y recibiendo mensajes, en la Figura 3 se aprecia la arquitectura de la memoria distribuida.

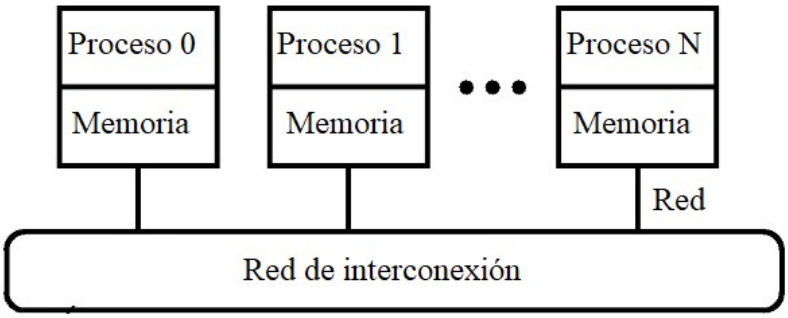


Figura 3. Arquitectura de Memoria Distribuida

La descomposición espacial [13] se efectuó usando la biblioteca MPI que proporciona el medio para la creación de una topología cartesiana virtual que permite la partición espacial del dominio en subdominios para asociarlos a los procesadores. Dado los subdominios espaciales asignados en los procesadores, el flujo neutrónico es resuelto con el método de iteración de fuente de forma simultánea en cada procesador, al finalizar cada procesador de aproximar el flujo en todas las celdas correspondientes, los procesadores se comunican por medio mensajes para actualizar los valores del flujo en las fronteras adyacentes. En la Figura 4 se ejemplifica la forma en que se descompone el dominio espacial y se distribuye en 16 procesos.

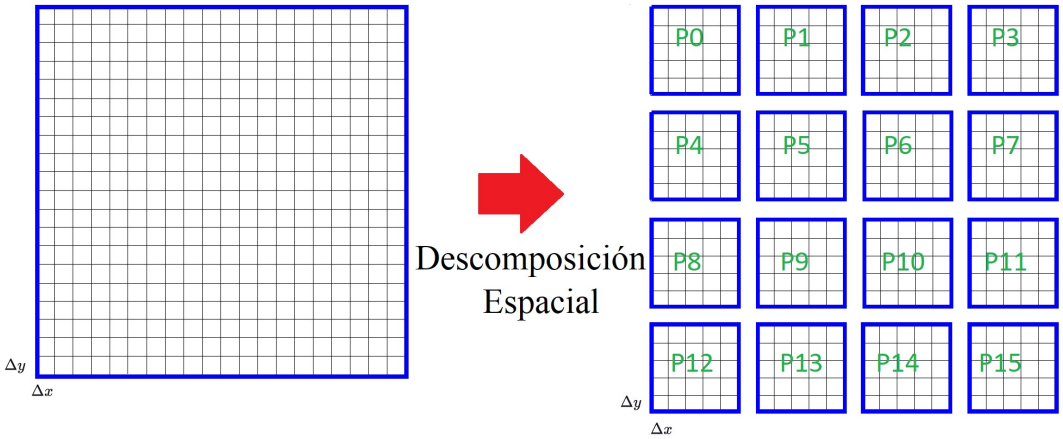


Figura 4. Descomposición en Espacial

2.2. Descomposición del Dominio Híbrido (Energía-Espacio)

OpenMP y MPI son dos enfoques populares en el área de programación paralela, donde OpenMP con su memoria compartida, mecanismo de control implícito puede acoplarse con MPI y su memoria distribuida, mecanismo de control explícito además con buena escalabilidad, conduciendo al paralelismo multinivel, la idea es aprovechar el potencial del paralelismo tanto como sea posible.

Este nuevo modelo paralelo se denomina programación paralela híbrida y consiste en utilizar plenamente la ventaja de los modelos MPI y OpenMP, haciendo uso de un mecanismo de control explícito de MPI en cada proceso y el paralelismo fino dentro del proceso por los hilos de OpenMP.

La descomposición híbrida es una combinación de la descomposición espacial y de energía, aprovechando la aceleración independiente de cada modelo de programación y la partición de memoria que ofrece OpenMP (energía) y MPI (espacio) respectivamente. Esta estrategia de descomposición se basa en los algoritmos descritos en las secciones anteriores. El estilo híbrido apropiado para la implementación es el "Master-only" lo que significa que todas las comunicaciones debidas a MPI no se realizan en la región de OpenMP. Esto implica que OpenMP realiza el cálculo en cada subdominio simultáneamente, al terminar el cálculo la región paralela de OpenMP se cierra y entonces las fronteras de los subdominios se actualizan con las funciones MPI. Figura 5 muestra un ejemplo de descomposición de dominio híbrido, para una partición con 16 procesadores (MPI) y 2 hilos (OpenMP), generando 18 procesos en paralelo.

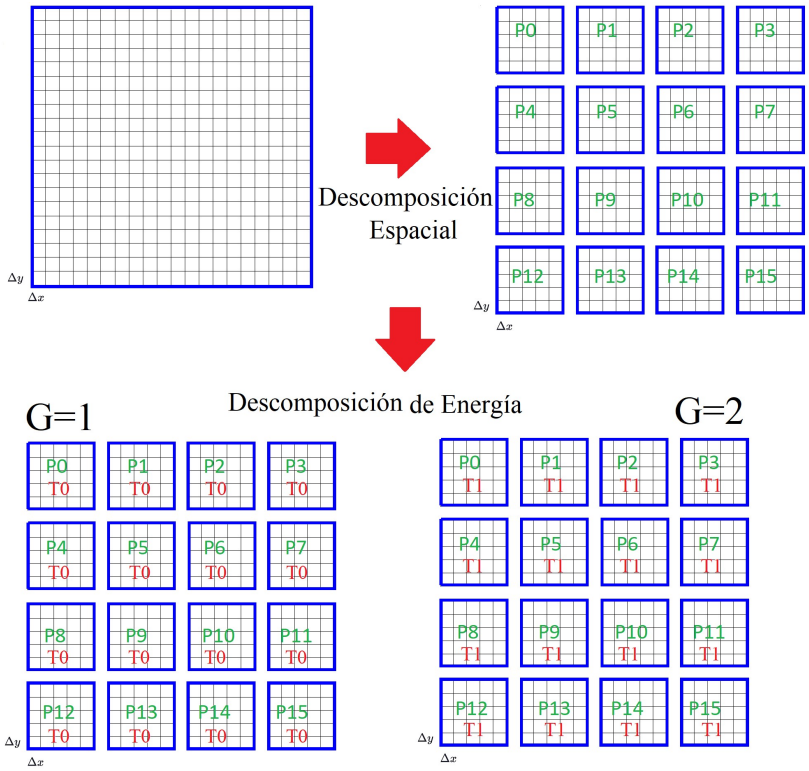


Figura 5. Descomposición híbrida

3. RESULTADOS

Uno de los ejercicios numéricos más utilizados para la verificación de códigos neutrónicos es el Benchmark C5G7-2D MOX, el cual fue propuesto por la OECD/NEA para probar la capacidad de los códigos para tratar problemas de reactores heterogéneos sin homogeneización espacial. El modelo es de un ensamble de combustible de un reactor tipo PWR con 7 grupos de energía, el cual se muestra en la Figura 6 y consiste en 4 ensambles de 17×17 (UO2/MOX), con dimensiones totales de 64.26 cm$\times$64.26 cm, por la simetría del problema se simuló solo un

cuarto del problema usando las condiciones de frontera apropiadas para acelerar la ejecución. Una descripción detallada junto las secciones eficaces correspondientes pueden ser halladas en la referencia [14].

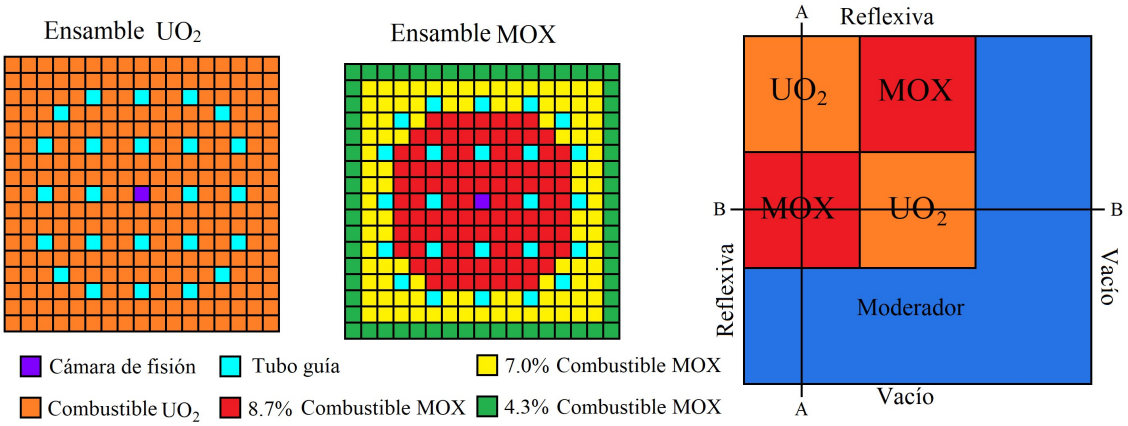


Figura 6. Configuración Benchmark C5G7-2D

De acuerdo con las especificaciones las celdas de combustible tienen una la longitud de un lado de 1.26 cm, así como su radio de 0.54 cm. En consecuencia, se requiere simular una geometría circular, sin embargo, AZTRAN ni otros códigos basados en geometría cartesiana pueden simular esta figura, no obstante, es posible aproximar la forma por medio de una malla cartesiana. Detalles del procedimiento que conduce a la nodalización cartesiana de una celda de combustible se dan en la referencia [15]. En la Figura 7 se ilustra la malla de forma escalonada de cada celda usado en AZTRAN para aproximar la geometría.

Para hacer un análisis comparativo con los resultados de la referencia (MCNP) se usó el error pcm (3) para comparar la k_{eff} y el error máximo (4) para cotejar las potencias de las celdas y de los ensambles. Los criterios de convergencia propuestos son 1×10^{-6} para aproximar el flujo angular y 1×10^{-5} para la fuente de fisión.

$$\varepsilon_{pcm} = \frac{k_{eff}^{AZTRAN} - k_{eff}^{Ref}}{k_{eff}^{Ref}} \times 100000 \tag{3}$$

$$\varepsilon_{\max} = \max_{1\le i\le I} \left| \frac{P_i^{AZTRAN} - P_i^{Ref}}{P_i^{Ref}} \right| \times 100 \tag{4}$$

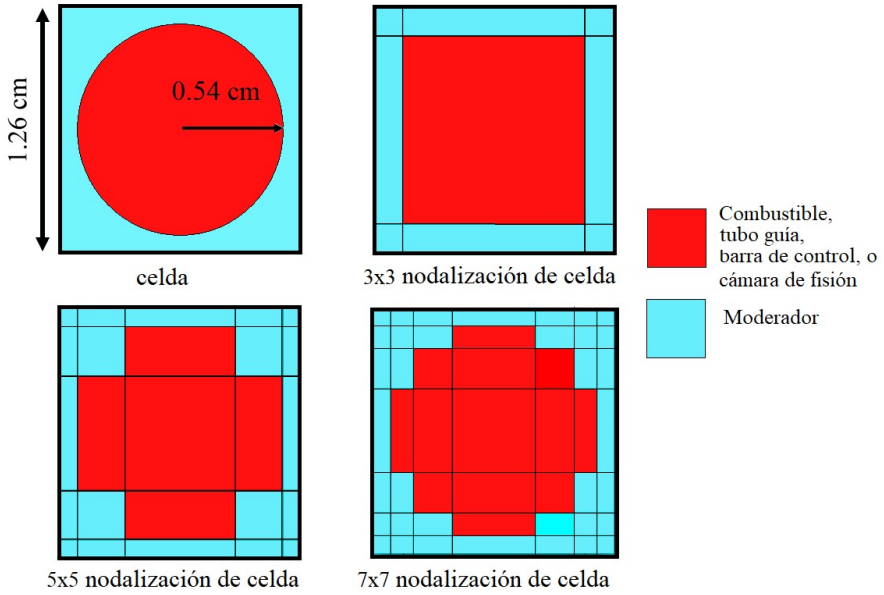


Figura 7. Configuración de la celda de combustible

En la Tabla 1 se encuentran los resultados obtenidos por AZTRAN y fueron comparados con la referencia MCNP. En esta tabla los cálculos fueron hechos usando una nodalización de celda 7×7 y una aproximación angular S_{16}.

Tabla I. Comparación de resultados del Benchmark C5G7-2D MOX

	AZTRAN	Referencia	Error
k_{eff}	1.184818	1.186550	-145 pcm
Potencia máxima de la celda	2.505	2.498	0.28%
Potencia mínima de la celda	0.232	0.232	0.00%
Potencia ensamble interno UO_2	493.904	492.8	0.22%
Potencia ensamble MOX	211.239	211.7	0.21%
Potencia ensamble externo UO_2	139.599	139.8	0.14%

La Tabla 1 muestra que AZTRAN obtiene buenos resultados en comparación con MCNP, el cual es un código que usa el método de Montecarlo y puede simular el problema con la geometría exacta. El error porcentual máximo obtenido es menor que 0.28\%. Además, el cálculo presentó que la posición de la potencia máxima de la celda está en la posición (4,5) o (5,4) y la potencia mínima en la posición (33,33) como reporta la referencia. Finalmente, el error del factor de multiplicación es menor a 145 pcm, lo cual es aceptable para la comparación entre un cálculo determinístico sin un refinamiento abultado y Montecarlo. En la Figura 8 se aprecia la distribución de potencia normalizada del C5G7-2D obtenida por AZTRAN.

En la Figura 8 como era de esperar (debido a las condiciones de frontera), la máxima potencia ocurre en el ensamble UO_2 interior cerca del centro del ensamble de combustible. En dirección al moderador la potencia va disminuyendo, aun así, hay un pequeño aumento cerca de la interfaz combustible-moderador. Finalmente, entre interfaces de UO_2 y combustible MOX se puede notar un cambio de espectro de energía debido al combustible (de uranio a plutonio).

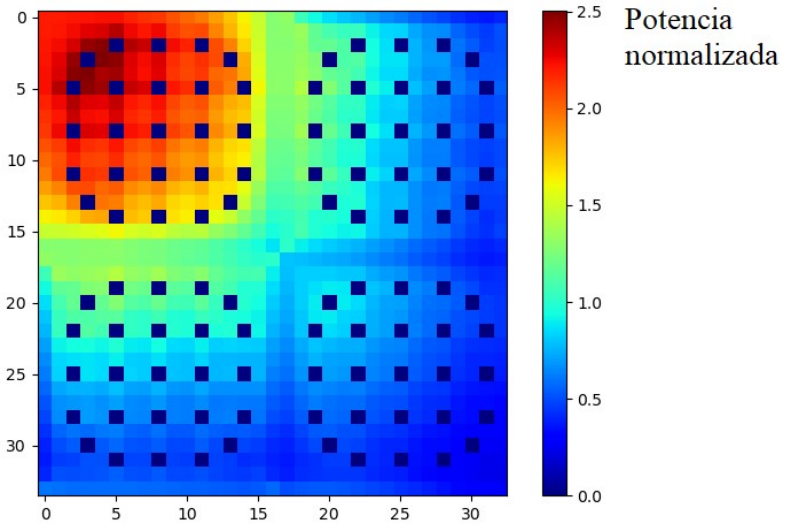


Figura 8. Distribución de potencia normalizada C5G7-2D

En la Figura 9 se detalla el efecto del factor de multiplicación efectiva y en la Figura 10 el error máximo de la celda o pin, ambas en función de diferentes resoluciones espaciales y angulares.

En la Figura 9 se puede notar que el caso menos refinado (3×3 y S_2) parece estar más cerca de la referencia, pero hay que tomar en cuenta que la k_{eff} es un valor integral y una comparación completa se debe tomar la distribución de potencia para considerar efectos locales. También se puede apreciar que al aumentar el refinamiento angular y espacial el valor de k_{eff} se va acercando a la solución.

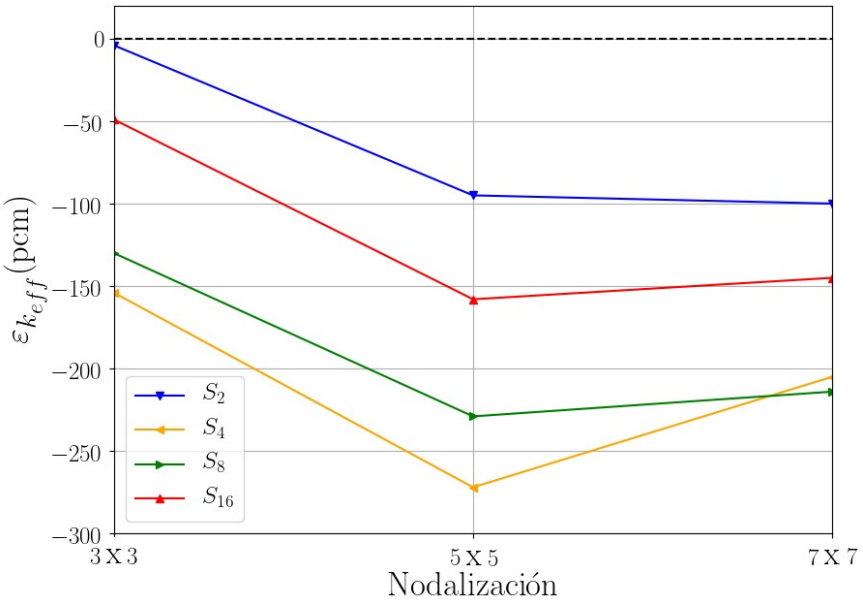


Figura 9. Comportamiento de la k_{eff} para diferentes resoluciones del C5G7-2D

Respecto a la Figura 10 en el mismo caso (3×3 y S_2), ahí es donde se encuentra el mayor error alrededor del 3.5% y para esa aproximación angular el error se mantiene hasta un 3%, sin embargo, al incrementar la variable angular se reduce hasta el 1.5% y para la resolución más detallada el error es menor al 0.5%.

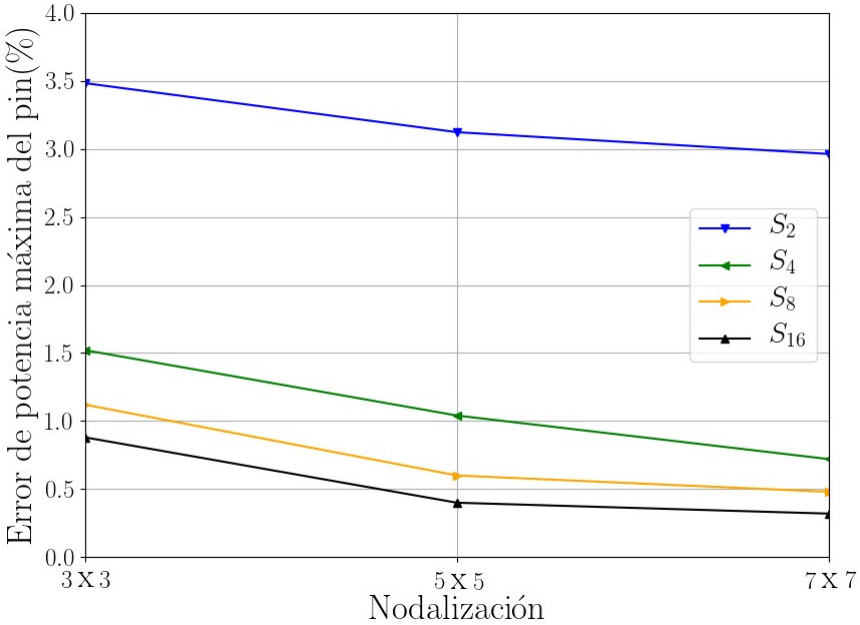


Figura 10. Error porcentual de potencia máximo para diferentes resoluciones del C5G7-2D

Una vez verificada la solución numérica, la implementación de la descomposición híbrida fue puesta a prueba. Todos los resultados fueron obtenidos en una Workstation con un procesador Intel Xeon CPU E5-2699 V3 @2.30GHz x 18C-36T y una memoria RAM de 128GB.

En la Tabla 2 se ilustra la descomposición híbrida propuesta para simular el Benchmark. La aceleración obtenida por AZTRAN para estas configuraciones se presentan en las Figuras 11 y 12.

Tabla II. Configuración de la descomposición híbrida

MPI	OpenMP	Número total de procesadores
1	1	1
3	1	3
9	1	9
3	7	10
9	7	16

En la Figura 11 se muestra la aceleración promedio para diferentes configuraciones espaciales, las cuales son muy similares, pero se nota que tiene un mejor desempeño la configuración 7x7, la cual es más robusta. En relación con la Figura 12 se proporciona la aceleración promedio para diferentes direcciones angulares, donde tiene un comportamiento en cual a mayor índice de ordenada discretea mayor será la aceleración.

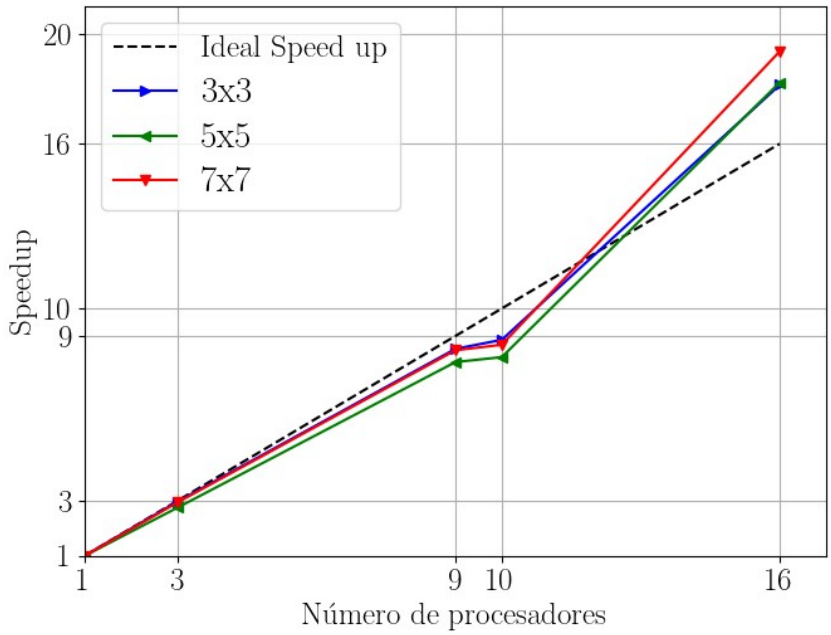


Figura 11. Speedup alcanzado por AZTRAN para diferentes resoluciones espaciales

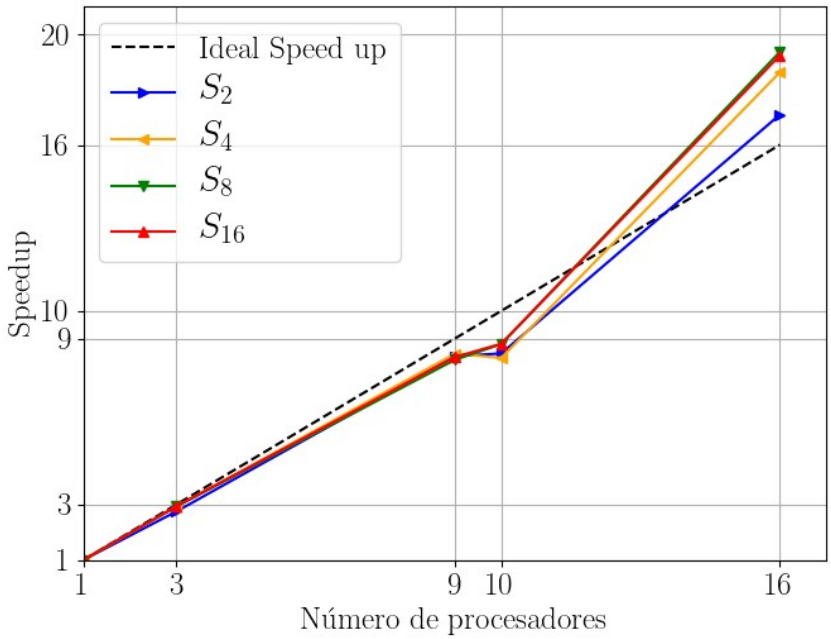


Figura 12. Speedup alcanzado por AZTRAN para diferentes resoluciones angulares

En ambas figuras existe casi una aceleración lineal hasta con 9 procesadores en el caso de 10 procesadores que es la configuración híbrida hay una degradación en el desempeño, pero al usar los 16 procesadores existe un speedup super-lineal.

Finalmente, en la Tabla 3 se presenta los resultados de la aceleración obtenidas para diferentes configuraciones espaciales usando la mayor cuadratura de ordena discreta (S_{16}) en AZTRAN.

Tabla III. Speedup para diferentes resoluciones usando la aproximación S_{16}

Número de procesadores	3×3 Speedup	5×5 Speedup	7×7 Speedup
1	1	1	1
3	2.98	2.83	3.00
9	8.54	8.10	8.35
10	8.50	8.57	9.36
16	19.13	18.57	20.00

Lo que se puede concluir de esta tabla es que a mayor discretización espacial y angular se puede obtener un speedup mayor, esto es muy beneficioso ya que nos asegura que para simular problemas con un refinamiento muy detallado podremos obtener el mayor speedup posible.

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se presentó la implementación de la descomposición híbrida (MPI-OpenMP) en el código AZTRAN. Con esto se extienden las capacidades de AZTRAN para realizar cálculos en paralelo para reducir los tiempos de ejecución. La verificación llevada a cabo por el Benchmark C5G7-2D, en donde se encontraron resultados aceptables en comparación a la referencia y se observó que, a mayor refinamiento espacial y angular, más precisos fueron los resultados. La implementación híbrida nos permite realizar simulaciones a problemas detallados con mallas espaciales e índices de aproximación angular robustas en tiempos de cómputo razonables, ya que a mayor refinamiento el speedup aumenta e incluso se obtienen aceleraciones super-lineales. La confianza obtenida por los resultados obtenidos alienta a un desarrollo posterior para colocar al código AZTRAN como una herramienta domestica para análisis de reactores nucleares e incluso para usarlo para cálculos multifísicos al acoplarlo con códigos de subcanal.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN-Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACYT-SENER.

El primer autor agradece al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca que está siendo otorgada para la realización de sus estudios de doctorado.

REFERENCIAS

1. “Página de AZTLAN Platform.””, http://www.aztlanplatform.mx (2020).
2. Gómez Torres, A. M., Puente Espel, F., del Valle Gallegos, E., François, J. L., Martín-del-Campo, C. and Espinosa-Paredes, G. (2015). AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors. In *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, France. May 03-06. Paper 15493.

3. Vallejo Quintero, J. A., Bastida Ortiz, G. E., Xolocostli Munguía J. V, del Valle Gallegos E., Martín-del-Campo, C. and Espinosa-Paredes, G. (2017). Verification of AZTRAN v1.2 code with PWR-MOX Benchmark problem. In *Transactions of the American Nuclear Society*, San Francisco, California.
4. Duran Gonzalez, Julian Arturo. *Implementación de la Cinética en el Código de Transporte Tridimensional AZTRAN*, tesis maestría, Instituto Politécnico Nacional, ESFM, CDMX (2017).
5. C. Bengt and G. I Bell. Solution of the Transport Equation by SN method. In *Proc. U.N. Intl. Conf. Peaceful Uses of Atomic Energy* (1958).
6. M. L Adams and E. W. Larsen, "Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations", *Progress in Nuclear Energy*, **40**, p. 3-159 (2002).
7. S. Nakamura. *Computational Methods in Engineering and Science.* (1977).
8. J. R LaMarsh and A. J Barratta. *Introduction to Nuclear Engineering.* Prentice Hall (2001).
9. M. Yavuz and E. W. Larsen, "Iterative methods for solving x-y geometry SN problems on parallel architecture computers", *Nucl Sci Eng*, **112**, p. 3-42 (1992).
10. Gropp, W., E. Lusk, and A. Skjellum, *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface*, Cambridge, Massachusetts: MIT Press, (1994).
11. Chapman B., Jost G., and Pas. R. V., *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming (Scientific and Engineering Computation)*, Cambridge, Massachusetts: MIT Press, (2007).
12. Duran Gonzalez Julian A., del Valle Gallegos Edmundo, Gómez Torres Armando M., "Aplicación de memoria compartida en el código AZTRAN usando OpenMP", *In XXIV Reunión Nacional Académica de Física y Matemáticas*, Ciudad de México, México (2019).
13. Duran Gonzalez Julian A., del Valle Gallegos Edmundo, Gómez Torres Armando M., "Implementación del Método de Descomposición en Dominios en AZTRAN", *Memorias XXX Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana*, Monterrey Nuevo León, México (2019).
14. "Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenization", www.oecd-nea.org/science/docs/2003/nsc-doc2003-16.pdf (2003).
15. Zangenbuch S. Seubert A. and Zwermann W., "Results on the OECD/NEA C5G7-MOX benchmark obtained with the discrete ordinates DORT code", *Progress in Nuclear Energy*, **45**, p. 153-158 (2004).

A Verification Exercise for the AZNHEX Code Using the CEFR Neutronics Benchmark and the OpenMC and INSTANT Codes

Juan Galicia Aragón; Roberto Carlos López Solís; Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ)
Carretera México-Toluca S/N, C.P. 52750, La Marquesa, Ocoyoacac,Estado de México
jgaliciaa87@gmail.com; roberto.lopez@inin.gob.mx; armando.gomez@inin.gob.mx

Edmundo del Valle Gallegos; Lucero Arriaga Ramirez
Instituto Politécnico Nacional (IPN)
Av. Luis Enrique Erro S/N, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, Alcaldía Gustavo A. Madero, C.P. 07738, Ciudad de México
edmundo.delvalle@gmail.com; guten_tag_04@hotmail.com;

Augusto Hernández Solís; Hirepan Palomares Chávez
Belgian Nuclear Research Center (SCK·CEN)
Boeretang 200, 2400 Mol, Belgium
augusto.hernandez.solis@sckcen.be; hirepan.palomares.chavez@sckcen.be

Xingkai Huo
China Institute of Atomic Energy (CIAE)
Xinzheng, Fangshan District P.O. Box 275 Beijing, 102413 China
huoxingkai06@163.com

Anstract

In 2018, the China Institute of Atomic Energy (CIAE) proposed a benchmark based on the start-up tests of the China Experimental Fast Reactor (CEFR), due to the large amount of experimental data that was obtained and made available for code validation. This benchmark represents an important opportunity for V&V of nuclear codes which, at first hand, could directly benefit the fast reactor community. For this benchmark several codes have been used worldwide; in Mexico for instance, the AZNHEX code was utilized, which is a neutron diffusion solver aimed for hexagonal geometry. Preliminary results showed large deviations and two main reasons were identified: a great influence on leakage phenomena (small core with very high energy neutrons) and scattering effects mainly related to large anisotropic effects. For the simplified core, vaccum boundary conditions (both radial and axial) were considered, and the reference solution was obtained with the Monte Carlo code OpenMC. The nodal multi-group macroscopic cross-sections were also obtained with the help of OpenMC. By means of the diffusion solver AZNHEX and the transport solver INSTANT, it is shown that scattering effects and a strong leakage dependance of the angular flux account for up to 8000 pcm's of this core configuration.

1. INTRODUCTION

AZNHEX is a 3D neutron diffusion code that is part of the Mexican project AZTLAN platform, which consists of the development of domestic nuclear reactors analysis software. Currently, essential improvements have been made in the most recent version of the code, such as parallelization, reducing the running time considerably. The Verification and Validation (V&V) process of the AZNHEX code started with some academic exercises [1]; however, to represent more realistic scenarios, the AZNHEX development team decided to participate in different benchmarks to demonstrate the sound capabilities of the code [2].

China Institute of Atomic Energy (CIAE) proposed a benchmark based on the start-up tests of the China Experimental Fast Reactor (CEFR) due to a large amount of experimental data obtained [3]. This benchmark represents an important opportunity for V&V of nuclear codes, which benefit the worldwide fast reactor community. The physical start-up of CEFR consisted of a series of experiments that were carried out in four aspects: 1) criticality experiments, 2) measurement of control rod worth, 3) measurement of reactivity coefficients, and 4) foil activation measurements.

Several institutions around the world participated in the reactor core modeling to calculate the desired neutronic parameters established in the benchmark, by means of both stochastic and deterministic nuclear codes.

From some preliminary calculations using the neutron diffusion solver AZNHEX, several discrepancies were observed for this fast reactor core which has the particularity of being very small radially and with a high power density. The AZNHEX code, despite being a diffusion code, has been verified and validated using bigger fast reactor core models like the ones presented in reference [2] with accurate results. Since for this small core the deviations using diffusion are much more significant, a study on scattering effects was done in an international collaboration with the Belgian Nuclear Research Center (SCK-CEN) and the China Institute of Atomic Energy (CIEA).

The study was done by modeling a reduced version of the full core including all active parts of the core and just some reflector rings and, after that, vacuum boundary conditions were applied. The Monte Carlo code OpenMC [4] was used for obtaining the reference solution of the simplified model (which will be described later), and also as a macroscopic cross-sections (XS) generator for the further use in the deterministic codes. The neutron transport code INSTANT [5] and the domestic code AZNHEX [1,2] were used together with the sets of generated XS in order to account for scattering effects moving from total diffusion to different P_n transport solutions. Also OpenMC was executed as in its Monte Carlo Multi-Group (MCMG) mode of operation.

2. DESCRIPTION OF THE CEFR CORE

The China Experimental Fast Reactor (CEFR) is a 65 MWth pool-type sodium-cooled fast reactor constructed and operated by the China Institute of Atomic Energy (CIAE). It is the first

fast reactor of China, which reached criticality for the first time in 2010 [6].

2.1. Core Description

The main characteristics of the CEFR core are shown in Table I. A total of 72 fuel subassemblies (SAs) are required to reach criticality. The reactor core also has 8 control rods SAs, 1 neutron source, 338 stainless steel SAs (reflectors), and 230 boron SAs shielding.

Table I. Main parameters of the CEFR nuclear core

Parameter	Value
Thermal/electric power, MWth/MWe	65/20
Designed life, year	30
Maximum burn-up, MWd/t	60000
Maximum neutron flux, cm-2 s-1	3.2E+15
Refueling period, days	80
Diameter/height of main vessel, m	8.0/12.2
Covering gas pressure, MPa	0.005
Core inlet/outlet temperature (full power), °C	360/530
Equivalent diameter/height of active core (fuel region), cm	60/45
SA lattice pitch (installation temperature), mm	61.0
Enrichment of U-235 of fuel, %	64.4
Number of fuels SAs	79
Total mass of UO2/U in fuel, kg	417/367
Total mass of UO2/U in blanket, kg	356/313
Total mass of B4C in control SAs, kg	6.9
Total mass of B4C in boron shielding SAs, kg	552

The fuel rods have a total height of 259.2 cm, with the active region being of 45 cm. Above and below of the active region, are placed blanket zones. Figure 1 shows a cross-section of the CEFR core, indicating the position of the element type [3]. In the core, there are 5 types of subassemblies: Fuel, mockup, three types of Control Subassemblies, four types of Steel Shielding Subassemblies, and Boron Shielding.

Figures 2 and 3 show the axial layouts of every subassembly inside the core. For a more detailed description of the geometry description and material definition, the reader is encouraged to go to reference [3].

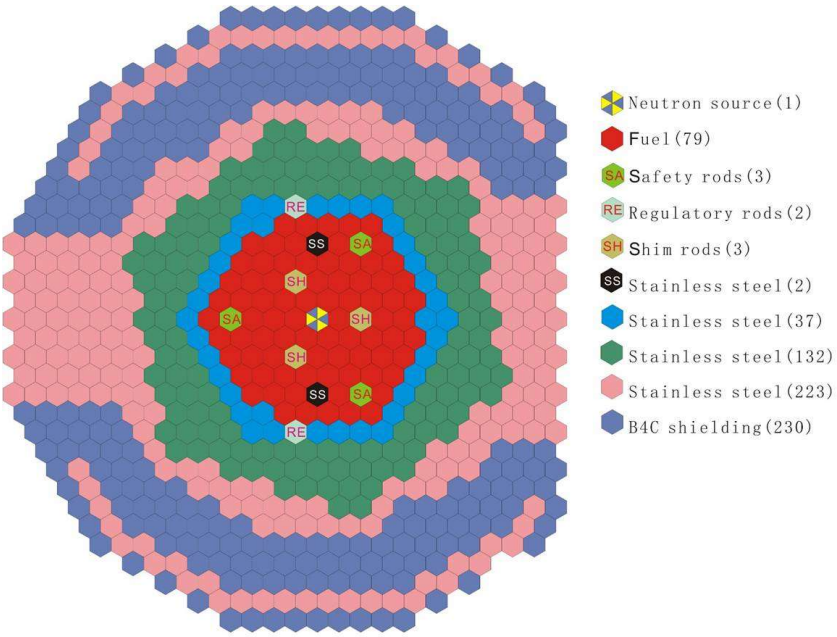


Figure 1. CEFR Core Layout

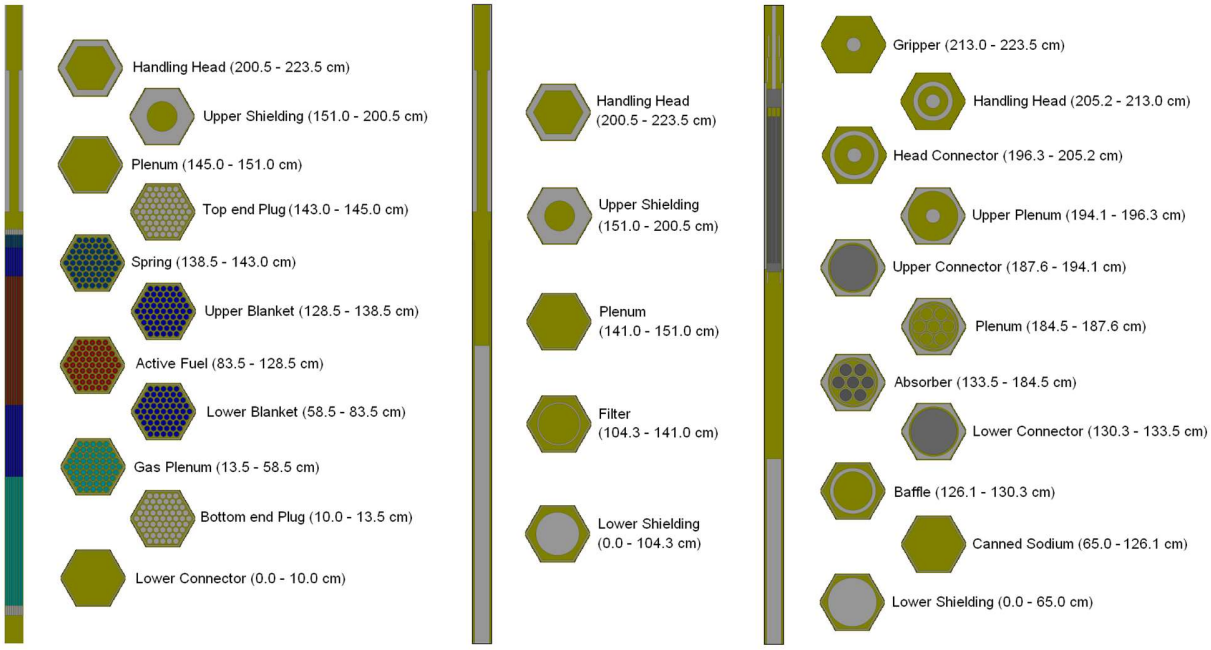


Figure 2. The Axial Layout of the Fuel (left), Mock-up Fuel (center) and Safety Regulating and Shim Control (right) Subassemblies.

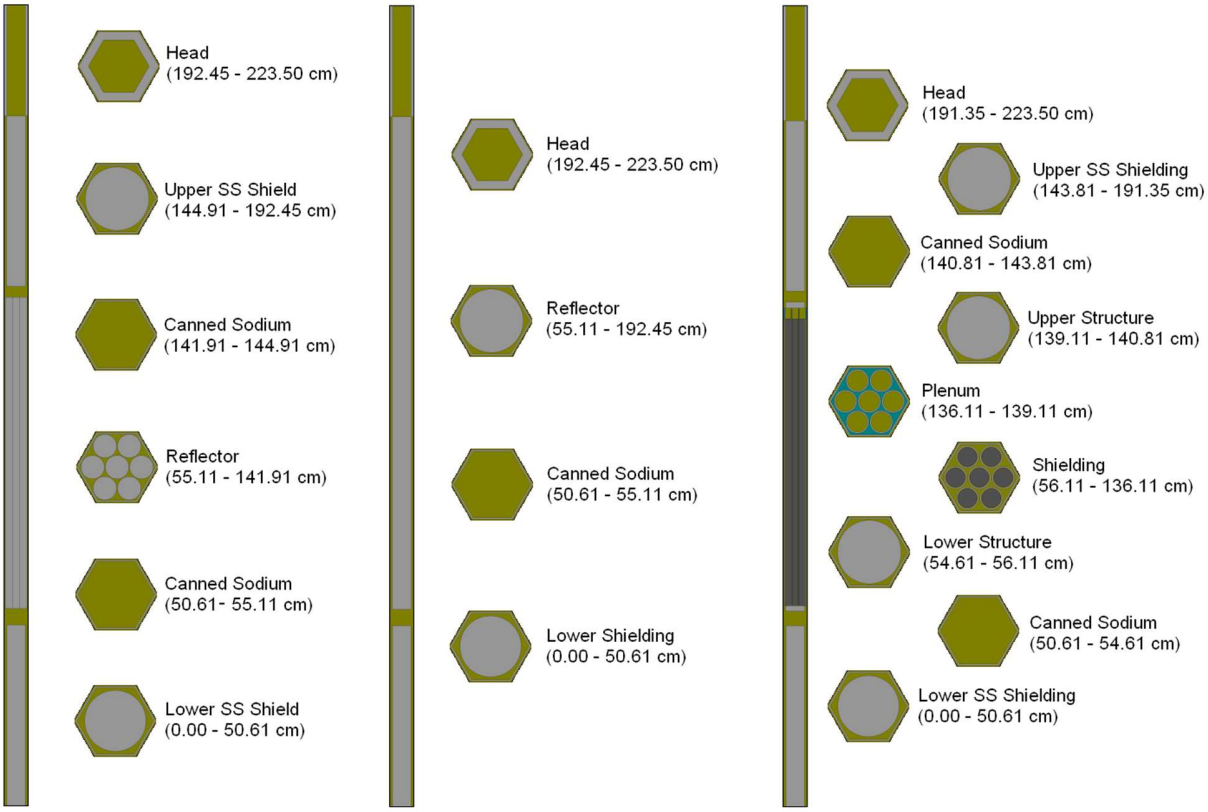


Figure 3. The Axial layout of the SS Shielding Type I-II (left), Type III-IV (center) and Boron Shielding (right) Subassemblies.

2.2. Criticality Exercise

As mentioned previously, the CIAE proposed a benchmark in which a set of exercises were carried out. The first exercise (approach to criticality) consisted in the fuel assemblies loading into the coreby steps until 24, 40, 46, 55, 61, 65, 68, 69, 70 and 71 Fuel SAs were loaded with the core at 250 °C.

Once the Fuel SA number 72 is inserted the core becomes supercritical anda second part of the exercise takes place in which one of the control SAs isinserted at various positions (190 mm, 170 mm, 151 mm and 70 mm of distancemeasured from the bottom of the fuel zone to the bottom of the control zone) until the core reaches criticality.

Figure 4 shows every step of fuel loading (from left to right and top tobottom) and the subassembly space (bottom right map) where the Control SA is inserted.

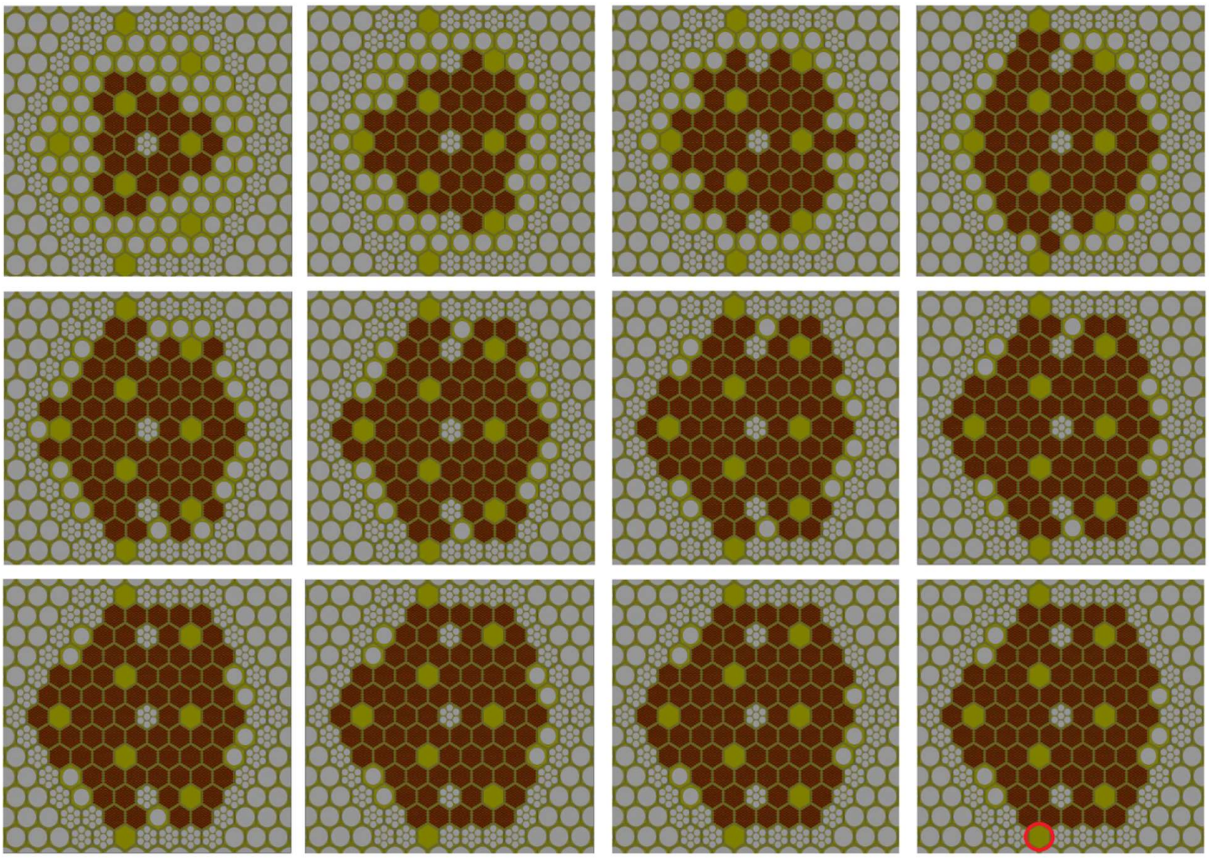


Figure 4.The Layout of the Core under Different Fuel Loading Stages (from left to right and top to bottom 24, 40, 46, 55, 61, 65, 68, 69, 70 and 71 Fuel SA inserted) and Position where Control SA is Inserted (bottom-right)

Based on this exercise, a simplified model was proposed for the study presented here. Figure 5 shows the model that was used, in which just one reflector ring is present, and vacuum boundary conditions were used for getting a subcritical state leading to a total radial and axial neutron leakage without the possibility of neutron re-entrance to the core.

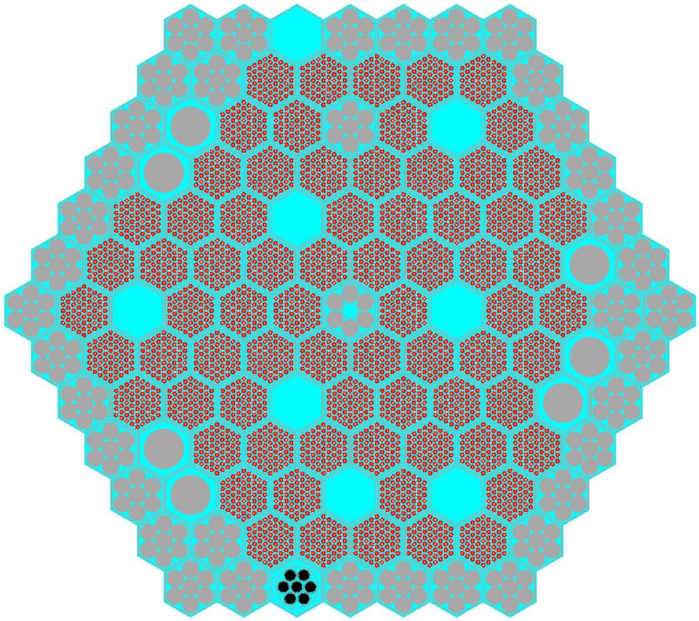


Figure 5. A Simplified Model of the CEFR Core used for Comparison

3. DESCRIPTION AND IMPLEMENTATION OF THE COMPUTATIONAL CODES

The computational codes used in this exercise were OpenMC [4], INSTANT [5], and AZNHEX [7]. The Monte Carlo code OpenMC was used for cross-section generation in order to crerate the respective nodal models for deterministic codes, as well as for obtaining the reference solution by means of a MGMC nodal calculation. Besides k_{eff} value, the radial and axial power distribution are also obtained for a complete study. The selected nuclear data library for this exercise corresponded to the ENDF/B-VII.1.

Although a full heterogeneous model of the proposed core was modeled with OpenMC, the deterministic XS were homogenized dividing every SA into 20 axial regions of the same volume. Therefore, the models in the deterministic codes consist of SAs made of 20 axial zones, each with its own XS set.

The codes benchmarking process will go as follows:

- Core simulation on OpenMC with heterogeneous geometry and continuous energy using ENDF/B-VII.1 XS Data library.
- Extraction of macroscopic XS for 20 energy groups (see Table II) for every region in the core: 127 subassemblies divided axially into 20 nodes.
- Use of the 20 Energy group XS in OpenMC (multigroup option, with P_0 and P_7 for scattering), INSTANT, and AZNHEX also with P_0 scattering matrices.
- A comparison of both the k_{eff} and the power distribution is made for the three codes using the 20 group XS.

Table II. Upper limits for the 20 energy groups used in for XS generation

Group	Upper limit (MeV)	Group	Upper limit (MeV)	Group	Upper limit (MeV)
1	1.9600E+01	8	4.0900E-02	15	1.2300E-03

2	1.0000E+00	9	2.4800E-02	16	7.4900E-04
3	4.9800E-01	10	1.5000E-02	17	4.5400E-04
4	3.0200E-01	11	9.1200E-03	18	3.0400E-04
5	1.8300E-01	12	5.5300E-03	19	1.4900E-04
6	1.1100E-01	13	3.3500E-03	20	9.1700E-05
7	6.7400E-02	14	2.0300E-03		

3.1. The AZNHEX Code

AZNHEX is a 3D neutron diffusion code that is part of the Mexican project AZTLAN platform [7], which consists of the development of domestic software for nuclear reactors analysis. Essential improvements have been made in the most recent version of the code (such as parallelization), reducing the running time considerably. The Verification and Validation (V&V) process of the AZNHEX code started with some academic exercises [1] however, to represent more realistic scenarios, the AZNHEX development team decided to participate in different benchmarks to demonstrate the sound capabilities of the code [2].

The AZNHEX code was developed for the design and analysis of reactor cores with hexagonal-z geometry elements such as VVER and Fast reactors. This code solves the neutron diffusion time-dependent equation in 3D geometry using the RTN-0 (Raviart-Thomas-Nédelec of index zero) nodal approximation method. A Gordon-Hall transfinite interpolation is applied first to each one of the four quadrants of the hexagonal geometry, as can be seen in Figure 6, to transform it in a cube [7].

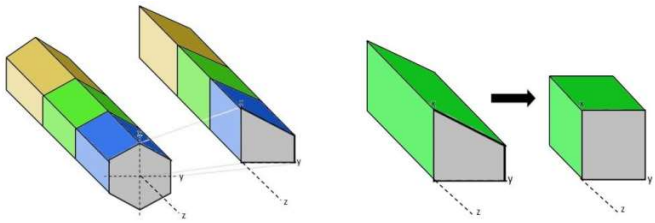


Figure 6. Gordon-Hall Transformation for a Hexagonal Prism

3.2. The INSTANT Code

PHISICS [5] (Parallel and Highly Innovative Simulation for INL Code System) is a package toolkit designed to provide modern analysis for reactor physics research. Originally developed at Idaho National Laboratory, its neutron transport solver known as INSTANT (Intelligent Nodal and Semi-structured Treatment for Advanced Neutron Transport) has been employed during this work as a deterministic core simulator. INSTANT code was Fed with the same multi-group macroscopic cross-sections as from the homogenized OpenMC model, the intention is to validate its capabilities in predicting spatial power distributions using an eigenvalue calculation versus the MGMC model of OpenMC.

The INSTANT solution taken into account in this work follows the discretization of the neutron transport equation-based in the Variational Nodal Method [8]. In space, this corresponds to a hybrid finite element method while in angle, it corresponds to a spherical harmonic's expansion. Once the discretization takes place, and a matrix system is formed, the GMRES (Generalized Minimal Residuals) is employed for its solution using an efficient memory usage (although it offers a slower solution compared to other Krylov-subspace solvers).

3.3. The OpenMC Code

OpenMC is a community-developed Monte Carlo neutron and photon transport simulation code, which is capable of performing fixed source, k-eigenvalue and subcritical multiplication calculations. The code was originally developed at MIT by members of the Computational Reactor Physics Group [4].

The elements of the CEFR core in OpenMC are represented as individual universes (i.e., fuel assemblies, control rod banks, mock-up assemblies, among others). To each universe, associated cells represent the nodal analysis of the core in which, during an eigenvalue calculation, the different macroscopic cross-sections are tallied. Each universe, which represents an assembly of the core, was axially divided in 20 equidistant nodes of 11 cm, regarding the radial characterization of the multi-group constants they are homogenized at the assembly/channel level.

For this work, OpenMC employs the angular flux (rather than the scalar flux) varying in energy and space for energy collapsing and spatial averaging in the computation of macroscopic reaction rates. An excellent reference that explains in detail such a procedure can be found in [9].Although in this work, the entire angular domain has been integrated over for the creation of multi-group cross-sections, the implantation in OpenMC is generalizable and, in principle, would also allow the tabulation of angular dependent parameters.

4. RESULTS AND DISCUSSION

As a first exercise, OpenMC has been used in a multi-group calculation mode in which the generated homogeneous XS (also with OpenMC) are used to form a nodal model to be executed via OpenMC in MCMG mode. In Table III, the reference value (heterogeneous model with continuous energy) is presented and compared with the MCMG calculation k_{eff} results as a function of the scattering matrix order (0 and 7).

Table III. k_{eff} values for reference and different scattering matrices order for OpenMC calculation as continuous energy (reference) and multigroup calculation

Reference	P_7	Relative error |ref – P_7|	P_0	Relative error |ref – P_0|
0.85075 ± 3 pcm	0.85770 ± 3 pcm	695 pcm	0.93690 ± 3 pcm	8615 pcm

From Table II it can be seen that by comparing the heterogeneous original continous energy Monte Carlo model, with respect to the MCMG P_7 one, a deviation of 695 pcm is obtained. On

the other hand, the effect of assuming a full isotropic system when it comes to the scattering reactions gives rise to a difference of 7920 pcm when compared to P_7.

The effect of anisotropy correction in scattering matrices is 7920 pcm ($|P_7 - P_0|$). For the sake of comparison against the diffusion solver AZNHEX, the P_0 scattering matrix (isotropic matrix) is used in the next AZNHEX results while for INSTANT, due to its numerical solver, the P_0 scattering matrix is employed but the degree of anisotropy in the forward-flux calculation cannot be P_0 but, instead, needed to be P_1 (i.e. linear anisotropy). Therefore, Table IV shows the results of the k_{eff} value obtained with OpenMC, INSTANT, and AZNHEX using the P_0 scattering matrix.

Table IV. k_{eff} value obtained for the criticality exercise

Code	k_{eff}value	Difference (pcm) |OpenMC-Code|
OpenMC	0.93690	---
INSTANT	0.90650	3040
AZNHEX	0.90080	3610

From Table IV, the differences comparing OpenMC in its MCMG form versus the two deterministic codes are over 3000 pcm; such differences arise due to the differences in solution approach (i.e. stochastic vs. deterministic). Focusing in the deterministic codes, the values obtained with AZNHEX and INSTANT are in the same order but exist a deviation of 570 pcm between the two results (as mentioned above, INSTANT employs the P_0 scattering matrix but must solve the forward-flux by means of at least the P_1 term). Thus, a fair comparison between INSTANT and AZNHEX is, unfortunately, not possible to be performed. Other sources of discrepancies (which should be minimum compared to the degree of anisotropy while computing the forward-flux) are due to the different numerical approximations used in each of the deterministic codes; while INSTANT is a neutron transport solver, AZNHEX is a neutron diffusion one.

In the case of the diffusion code AZNHEX, which has proved good accuracy in bigger fast reactor cores [2], this exercise proved that it cannot properly represent the real conditions in the system, due to the small core configuration with high leakage and high scattering effects (i.e. a representation up to a nodal P_7 in scattering terms was needed to get close to the original heterogeneous case). In the case of INSTANT, which it is a deterministic neutron transport solver who can expand the angular flux in terms of Legendre polynomials it presents better performance for the fact of being a neutron transport solver even with P_0 scattering matrix data.

The k_{eff} value calculated with INSTANT and shown in Table IV was computed employing a P_1 angular flux approximation. In order to analyze the effect of having isotropic scattering but with different forward-flux angular terms, two more calculations were performed with the P_N transport code INSTANT; the calculations were done employing a P_3 and P_5 angular flux approximation, where the k_{eff} values obtained were, respectively, of 0.93332 and 0.93556. These results indicate an absolute difference of 358 pcm and 134 pcm for P_3 and P_5 with respect to the OpenMC MCMG effective multiplication factor.

Although there are some significant differences in the integral k_{eff} values, in the axial and radial profiles there is a very good agreement among all codes.

The radial and axial power distribution obtained with OpenMC, INSTANT, and AZNHEX are shown respectively in Figures 7 and 8. In the case of radial power distribution, a path was chosen in a way that all control rods were avoided (shown in the same Figure 7).

For the axial power profile (Figure 8), the plotted points correspond only to the axial levels of the active length. Finally, in Figure 9, the relative error between INSTANT (P_1) and AZNHEX is presented in a radial distribution where higher differences can be shown close to border and to control rods where the neutron flux gradient is of importance.

The good agreement in the power distributions among all cases gives reasonable confidence in the use of AZNHEX, although it is clear that for such small cores with high power density, the diffusion solvers are far from getting good criticality results.

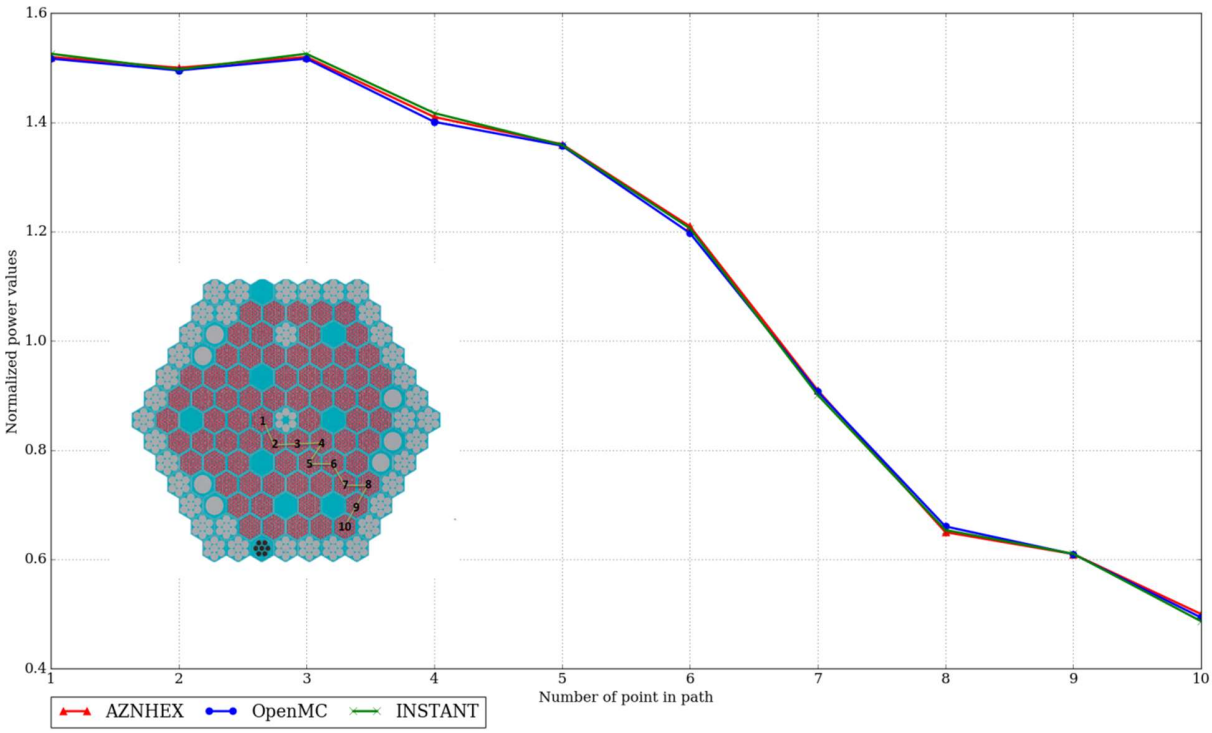


Figure 7 . Normalized radial power profile for the OpenMC, INSTANT and AZNHEX simulations

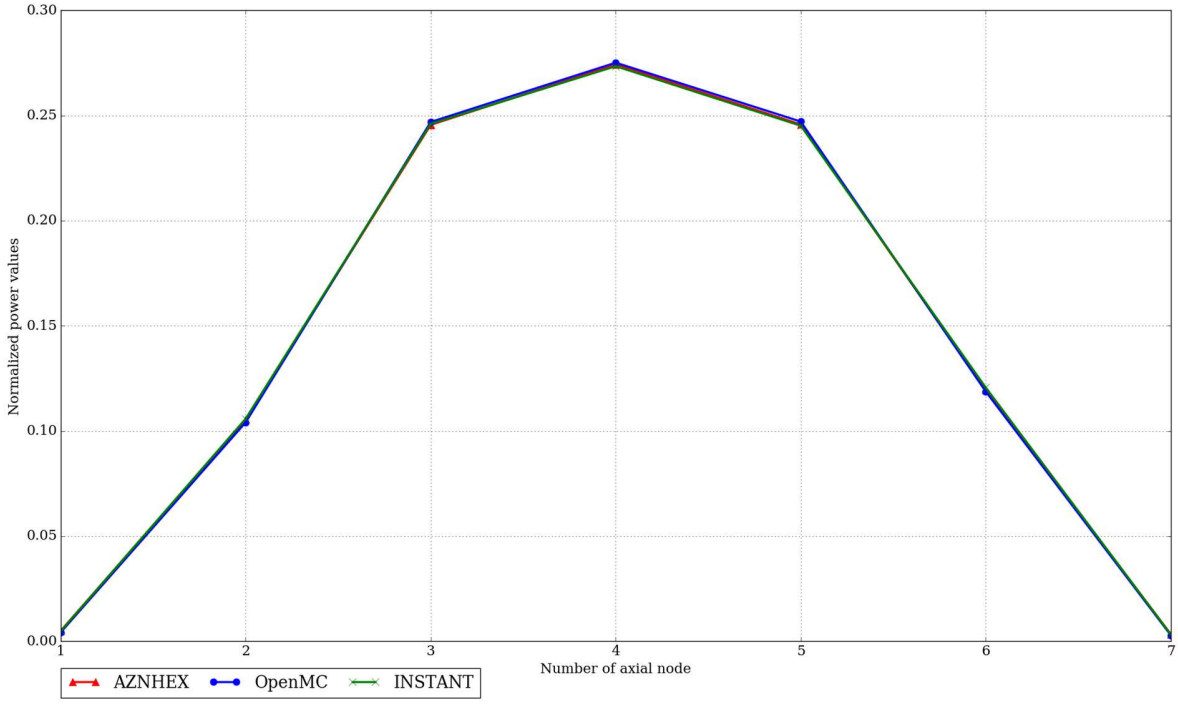


Figure 8. Normalized axial power profile for the OpenMC, INSTANT and AZNHEX simulations

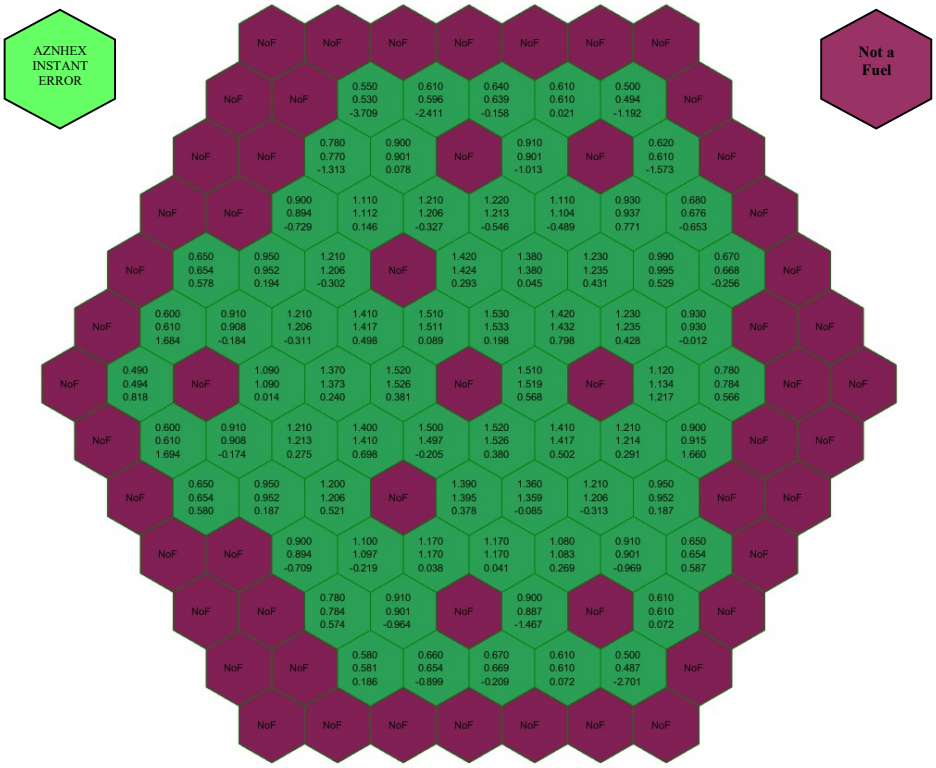


Figure 9.The relative error between INSTANT and AZNHEX for the radial power distribution of the whole core

5. CONCLUSIONS

A study on the effect of anisotropy in the CEFR core was presented fully exploiting the capabilities of the OpenMC code as a generator of reference solutions and as a generator of multigroup homogenized XS.

In the integral value comparison (k_{eff}) there are significant differences related to homogenization and diffusion limitations. Where the angular flux at the boundaries cannot be properly reproduced by the diffusion solver, the leakage rate can be underestimated. Nevertheless, a useful comparison between AZNHEX and INSTANT deterministic codes was achieved once the same calculation conditions were used. Even though high discrepancies where found in the integral calculations, the results on the normalized power profiles among the three codes show very good agreement.

It must be stressed the fact that the anisotropic corrections in scattering matrix play an important role in these type of exercises, and especially in such small cores with fast neutrons in which also the mean free path of the neutrons is significant and thus, the scattering and leakage terms must be taken into account carefully.

In the particular case of AZNHEX code, based on the results of this study and the impact on the angular dependence of scattering, a new version of the AZNHEX code for dealing with such small fast neutron cores is under development in order to include an SP_N approach as well a S_N transport solver, together with parallelization. These features will help to have a better performance in case of high leakage and significant scattering cores.

ACKNOWLEDGMENTS

To the sectorial fund of Energy Sustainability, CONACYT-SENER for the financial support for the development of the strategic project No. 212602 (AZTLAN Platform).

REFERENCES

1. Juan Galicia-Aragón, et al."Initial verification of AZNHEX hexagonal-z neutron diffusion code with MCNP6 for two different study cases,"*Progress in Nuclear Energy*, **106**, pp.284-292 (2018).
2. Edmundo del-Valle-Gallegos, et al."Verification of the multi-group diffusion code AZNHEX using the OECD/NEA UAM Sodium Fast Reactor Benchmark," *Annals of Nuclear Energy,***118**, pp.592-602 (2018).
3. XingkaiHuo, *Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests*, 36, China Institute of Atomic Energy, Beijing, China (2019).
4. Paul K. Romano, et al."OpenMC: A State-of-the-Art Monte Carlo Code for Research and Development," *Annals of Nuclear Energy,***82**, pp.90-97 (2015).
5. C. Rabiti et. al., "Phisics: A New Reactor Physics Analysis Toolkit, " Transactions of the American Nuclear Society, Hollywood, FL, June 26th-30th 2011, Vol. 104, pp. 831-833 (2011).
6. Yang Xiao Yan, et al. "Loading Scheme Research on the First Criticality of China Experimental Fast Reactor,"*Atomic Energy Science and Technology*, **47**, pp.58-61 (2013).
7. A. M Gómez Torres, et al. "AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors,"*Proceedings of ICAPP,* Nice, France,May 03-06, (2015).

8. E. Lewis et. al., "Variational Nodal Formulation for the spherical harmonics equation," Journal of Nucl. Sci. and Eng., 122, (1996).
9. William Boyd. et al. “Multigroup Cross-Section Generation with the OpenMC Monte Carlo Particle Transport Code,”*Nuclear Technology,***205**(7), pp.928-944 (2019).

Cálculo de los Valores de Barras de Control del Reactor Chino Experimental CEFR empleando el Código Serpent

Juan Galicia-Aragón, Roberto López-Solís, Armando Gómez-Torres*
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ)
Carretera México-Toluca s/n, La Marquesa, C.P. 52750 Ocoyoacac, Méx., México
jgaliciaa87@gmail.com, roberto.lopez@inin.gob.mx, armando.gomez@inin.gob.mx

Edmundo del Valle-Gallegos
Instituto Politécnico Nacional (IPN)
Av. Luis Enrique Erro S/N, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Zacatenco, C.P. 07738
Gustavo A. Madero, Ciudad de México, México
evalle@ipn.mx

Xingkai Huo
Instituto de Energía Atómica de China (CIAE)
Xinzheng, Fangshan District P.O. Box 275 Beijing, 102413 China
huoxingkai06@163.com

Resumen

Como parte de las pruebas de arranque del reactor experimental CEFR, el Instituto de Energía Atómica de China (CIAE) propuso la creación de un ejercicio Benchmark para que, con base en las pruebas experimentales, diversas universidades e institutos de investigación alrededor del mundo, pudieran participar en la verificación y validación de los códigos neutrónicos. Los ejercicios contenidos en el Benchmark son: carga de combustible y aproximación a criticidad, valores de barras de control, reactividad por vacíos, reactividad por cambio de temperatura, reactividad por intercambio de elementos combustibles, activación de laminillas y reactividad por expansión térmica. El Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) participó en los cálculos realizando un modelo del núcleo del CEFR empleando el código de Monte Carlo Serpent, cuyo uso se ha extendido ampliamente en el área de cálculo de reactores debido a sus ventajas sobre otros códigos como la generación de secciones eficaces (XS). En este trabajo se presentan los resultados obtenidos del ejercicio número 2 del Benchmark correspondiente al cálculo del valor de barras de control y su comparación con los resultados experimentales. Se presenta también la descripción del CEFR y la metodología de cálculo empleada con Serpent para la realización de este ejercicio.

1. INTRODUCCIÓN

* Autor correspondiente: armando.gomez@inin.gob.mx

El Reactor Rápido Experimental Chino (CEFR) es el primer reactor de este tipo en China con una potencia térmica de 65 MWth. Es del tipo piscina y como refrigerante utiliza sodio. Alcanzó criticidad por primera vez en el año 2010. En las pruebas de arranque llevadas a cabo ese año, se realizaron cuatro series de experimentos que incluyen la carga de combustible y aproximación a criticidad, medición del valor de barras de control, medición de los coeficientes de reactividad y activación de laminillas. Estos experimentos no solo constituyeron una parte esencial de la puesta en marcha del reactor sino también, con los datos obtenidos, es posible validar el diseño del núcleo. Bajo la dirección y el apoyo de la Agencia Internacional de Energía Atómica (IAEA), el Instituto de Energía Atómica de China (CIAE) propuso un proyecto de investigación para elaborar un Benchmark basado en las pruebas de puesta en marcha del reactor [1]. Distintas universidades e institutos de investigación en el mundo participan en los cálculos neutrónicos empleando códigos estocásticos y/o determinísticos para tal fin. Los resultados finales de cada participante se validan comparándolos con los datos experimentales.

El Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) participa en los cálculos para el Benchmark centrándose en dos objetivos principales: 1) Utilizar el código Serpent [2] para realizar los ejercicios, principalmente por la ventaja que ofrece de generar secciones eficaces (XS) macroscópicas en los diferentes materiales que conforman el reactor para que puedan usarse en un código determinístico y 2) utilizar ese conjunto de XS para el código AZNHEX perteneciente a la plataforma AZTLAN [3], para realizar su verificación y validación (V&V) a partir de casos reales y no académicos como se hizo en las primeras versiones del código [4].

Entre los ejercicios del Benchmark se encuentra el de cálculo del valor de barras de control, que es de suma importancia en cuanto a la seguridad de cualquier reactor nuclear. La parte experimental contempla la obtención de los valores diferencial e integral de todas las barras, además de que se toma en cuenta el cálculo del valor de barras tanto de manera individual como en conjunto asumiendo, por ejemplo, que una barra queda atascada impidiendo su caída para contribuir en el apagado del reactor. Los resultados obtenidos con Serpent para este ejercicio se muestran en este trabajo al igual que su comparación con los datos experimentales. Los efectos de temperatura y de expansión térmica son considerados en el modelo del núcleo, con el fin de tener una representación más acertada de las condiciones reales de operación del reactor.

2. DESCRIPCIÓN DEL NÚCLEO DEL CEFR

Los elementos que conforman el núcleo del CEFR se pueden apreciar en la Figura 1. En el caso de los 79 ensambles combustibles, estas tienen una altura total de 259.2 cm, cuentan con un enriquecimiento del 64.4% y su sección activa es de 45 cm [1].

Además de los ensambles combustibles, se tienen 8 ensambles que componen a las barras de control, 338 ensambles de acero inoxidable que sirven como reflectores y 230 ensambles de boro que cumplen la función de blindaje. También se tiene una fuente de neutrones de ^{252}Cf que está ubicada en el centro del núcleo tal como se puede apreciar en la Figura 1 y cuyo propósito es mejorar el flujo de neutrones cuando se tiene una condición de subcriticidad en el reactor.

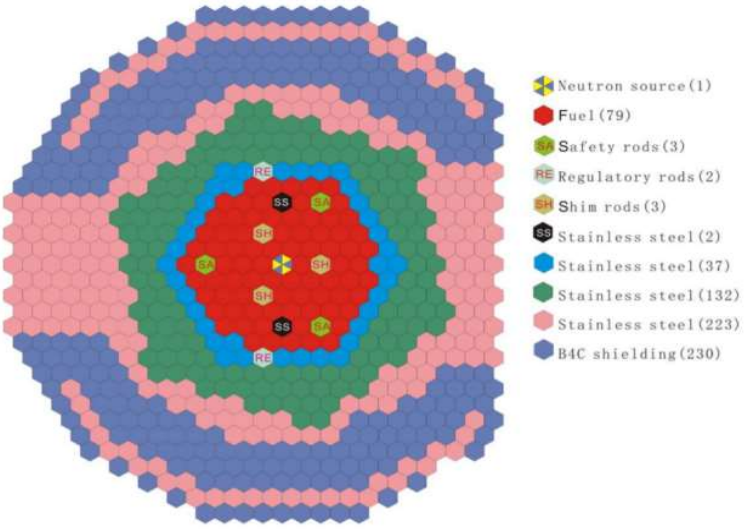


Figura 1. Vista del núcleo del CEFR

En las Figuras 2 y 3 se muestra una vista axial de todos los tipos de ensambles que se tienen en el núcleo a una temperatura de 20 °C. Se aprecia que se tienen unos elementos denominados "mock-ups" los cuales en sí, no contienen combustible y solo se encuentran presentes en el núcleo en la etapa de carga de combustible y aproximación a criticidad. Estos ensambles "mock-up" son los que se van reemplazando por ensambles de combustible (ejercicio 1 del benchmark).

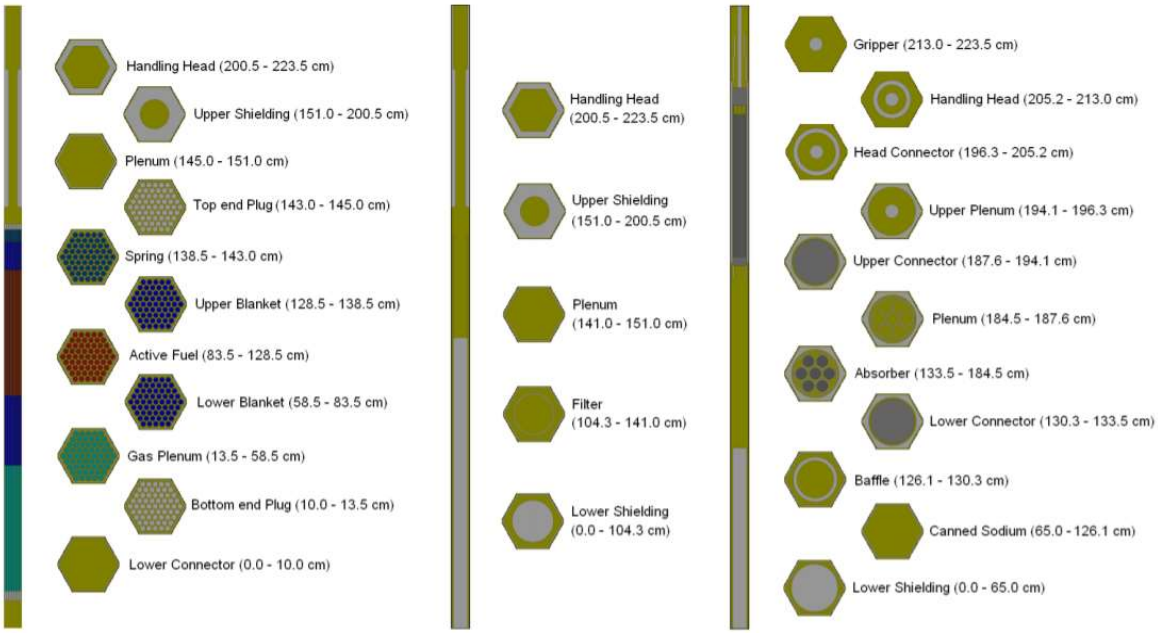


Figura 2. Vista axial de los ensambles combustibles (izquierda), ensambles mock-up (centro) y ensambles de las barras de control fina, reguladora y de seguridad (derecha)

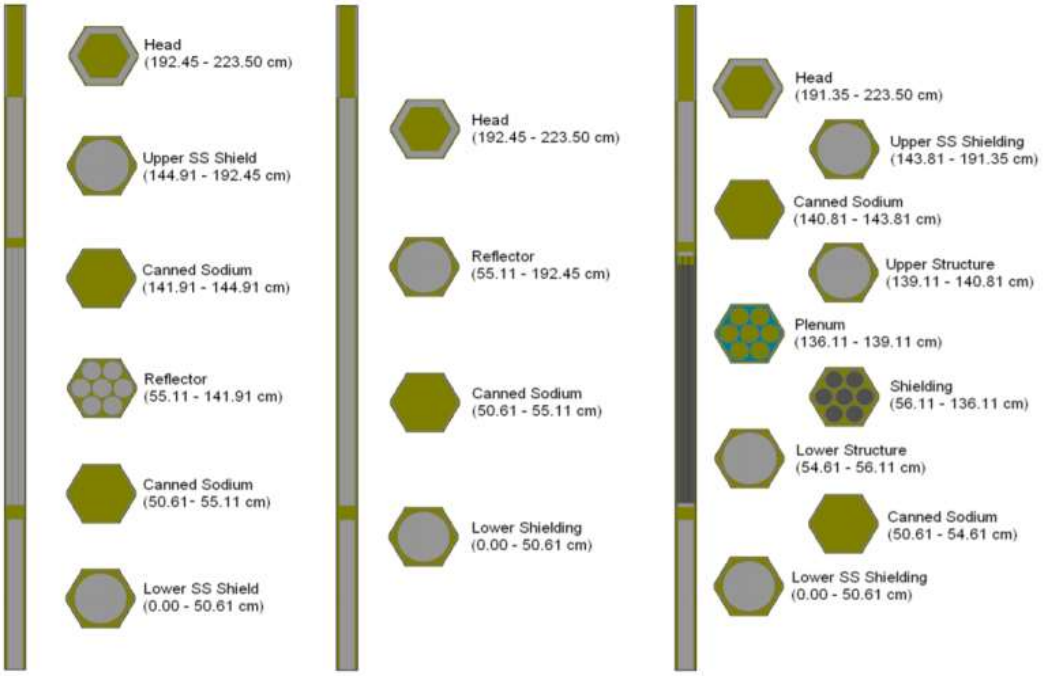


Figura 3. Vista axial de los ensambles de acero tipo I y II (izquierda), ensambles de acero tipo III y IV (centro) y ensambles de boro para blindaje (derecha)

3. SIMULACIÓN DEL CEFR CON SERPENT

3.1 Desarrollo de una herramienta para la construcción de inputs

Dado al número de tests involucrados en el benchmark se llegó a la conclusión de que se requería una herramienta que facilitara la redacción de inputs. Para lograr esto, el grupo de AZTLAN Platform encargado del ejercicio Benchmark CEFR desarrolló un Script en lenguaje C. Finalmente los tiempos de escritura de inputs se redujeron de aproximadamente 4 horas haciéndolos a mano, a aproximadamente 2 segundos con el script.

En el documento del benchmark [1] se describe detalladamente la geometría de cada elemento en el núcleo y se da suficiente información para calcular las densidades atómicas de cada material presente así como el coeficiente de expansión lineal de cada material.

El input de Serpent consiste en las siguientes secciones:

- Preámbulo: Donde se definen el path de XS microscópicas a usar, las condiciones de frontera, la lista de universos para los cuales se solicitarán las XS macroscópicas y otras constantes, los grupos de energía en los que se colapsarán las XS, la potencia, el número de neutrones por ciclo y de ciclos activos e inactivos.
- Definición de geometrías de cada ensamble: Donde cada ensamble usado en el núcleo se define a nivel pin, arreglo y ensamble.

- Impresión del mapa de núcleo completo: Aquí se define el mapa completo del núcleo donde se incluyen todos los ensambles presentes, además de una celda que contiene al núcleo y que se considera el universo 0.
- Definición de materiales: En donde se define el contenido de cada material, puede utilizarse varias formas de definición como densidades atómicas, de masa, o proporciones molares; además la sección eficaz a usar dependerá de la temperatura de cada material.
- Impresión de gráficos (opcional): Donde se le indica Serpent si se quiere imprimir gráficos del núcleo, se define que plano se quiere imprimir y la resolución en pixeles hasta 5000x5000.

Hay principalmente 3 situaciones que hacen a un input único y que evita que se pueda tomar uno como base y hacer el resto sólo con pequeñas variaciones.

- El número de ensambles de combustible: dependiendo del problema el núcleo puede tener de 24 a 79 ensambles de combustible insertados, y esto varía con cada problema.
- Posiciones de barras de control: En general, en cada ejercicio las barras están insertadas a posiciones diferentes.
- La temperatura: la temperatura del combustible/refrigerante tiene un efecto en las secciones eficaces microscópicas a utilizar y en la geometría de todos los componentes del núcleo (si se considera expansión térmica), esto es particularmente un problema en el set de ejercicios de variación de temperatura.

Estas condiciones son los causantes de los problemas que se pretenden solucionar con la elaboración de inputs por medio de un script automatizado.

El programa, fue escrito en C y se puede dividir en los siguientes componentes (mismos que serán descritos más adelante):

- Datos de entrada
- Llamadas de funciones principales
- Módulos auxiliares

Los datos de entrada proporcionan la información característica del caso para el que se desea generar un input, estos datos son:

- `nameOut`: Nombre de archivo de salida.
- `XSPath`: Path de la biblioteca de secciones eficaces microscópicas.
- `alfa`: Coeficiente de expansión lineal.
- `temp_fuel`: Temperatura del combustible.
- `temp_Na`: Temperatura del refrigerante.
- `temp_everythingElse`: Temperatura de material estructural.
- `stories`: Número de neutrones por ciclo.
- `actives`: Número de ciclos activos.
- `inactives`: Número de ciclos inactivos.
- `power`: Potencia en Watts.
- `fuelAssem`: Número de ensambles de combustible en el núcleo.

- `RE1, RE2, SH1 SH2, SH3, SA1, SA2, SA3`: Posición de las barras de control.
- `EneGroup`: Número de grupos de energía para los cuales se general las secciones eficaces macroscópicas.

Las llamadas a funciones principales, se encuentran en la función `main()` y son las siguientes:

- `printPreamble()`: Imprime toda la información previa (data path de las XS, cortes de energía para generación de constantes, ciclos activos e inactivos, etc) a la definición del primer ensamble, a toda esta información se le llama preámbulo.
- `printDummyUniv()`: Imprime los elementos de nivel pin o ensamble que están rellenos de helio, sodio y vacío, estos elementos se utilizan en la definición de geometrías más complejas.
- `printFuel(),printMockUpFuel(),printControlRod(),printReflectorA(),printReflectorB(),printShield()`: son las funciones que mandan llamar a los módulos de primer nivel necesarios para imprimir al archivo de salida las definiciones de geometrías según cada tipo de ensamble que se manda llamar.
- `printCEFRMap()`: Imprime el mapa del núcleo que contiene cada posición de cada ensamble en el núcleo, así sus condiciones de reflexión, se define aquí el universo 0 que es el que contiene a todo el núcleo.
- `printMaterials()`: Imprime la definición de todos los materiales presentes en el núcleo y todos los isótopos presentes en cada uno, aquí se considera la temperatura de los materiales para ajustar que XS se debe usar así como la densidad del material que compense el cambio de volumen por expansión térmica.
- `printMaps()`: Imprime las llamadas a la tarjeta "plot" para generar las figuras a diferentes alturas, por defecto se imprimen un número de imágenes determinado por el usuario en el plano XY (z=valor), así como uno el plano x=0 y y=0.

Los módulos auxiliares son llamados por una o más funciones principales y están relacionados con imprimir una parte específica de una geometría que está presente en uno o más tipos de ensamble (geometrías que consisten en paredes coaxiales, arreglos de pines de un número definido de elementos, etc) así como el cálculo de factores de corrección para tomar en cuenta la expansión térmica (cálculo de expansión radial, axial o cambio de densidad).

3.2 Implementación del módulo de construcción de inputs

El modelo en 3D del CEFR se construyó a partir de las especificaciones incluidas en el Benchmark como son: el tipo de geometría de los elementos, sus dimensiones, la composición isotópica de los combustibles, el tipo de materiales empleados, etc. Para simplificar los cálculos de expansión térmica, se consideró que todos los materiales cuentan con el mismo coeficiente de expansión lineal de $1.8\text{x}10^{-5}/^{o}\text{C}$, que corresponde al acero inoxidable [1] y que está presente en todos los ensambles. La densidad del sodio, a diferencia del resto de los materiales, se calculó utilizando la siguiente ecuación [1]:

$$\rho = 950.0483 - 0.2298T - 14.6045\text{x}10^{-6}T^2 + 5.6377\text{x}10^{-9}T^3 \quad (1)$$

, donde T es la temperatura expresada en ºC y ρ la densidad en kg/m^3. Las divisiones axiales en todos los elementos que conforman el núcleo del reactor se realizaron tomando en cuenta 10 zonas axiales del mismo tamaño para los ensambles combustibles y 5 para el resto de los ensambles, respetando la altura total de cada elemento. Esta división se la hace en automático el script. Se empleó esta metodología exclusivamente para obtener las XS en cada nodo y así poder realizar un modelo en AZNHEX más simplificado. Se muestra a continuación a modo de ejemplo lo realizado en los archivos de entrada de Serpent para las divisiones axiales en los elementos combustibles.

```
F1 F101 F102 F103 F104 F105 F106 F107 F108 F109 F110   % Ensamble combustible 1
F2 F201 F202 F203 F204 F205 F206 F207 F208 F209 F210   % Ensamble combustible 2
F3 F301 F302 F303 F304 F305 F306 F307 F308 F309 F310   % Ensamble combustible 3
F4 F401 F402 F403 F404 F405 F406 F407 F408 F409 F410   % Ensamble combustible 4
F5 F501 F502 F503 F504 F505 F506 F507 F508 F509 F510   % Ensamble combustible 5
```

El identificador para los ensambles combustibles se designó con la letra F (Fuel) y un número adelante, que corresponde al número de ensamble. Lo mismo para los blindajes, cuya letra designada fue la S (Shielding). La división axial es la misma para todos los ensambles cambiando únicamente el primer número para identificar el ensamble correspondiente.

Para la generación de las XS, se consideraron 7 grupos de energía [5] los cuales vienen definidos en la Tabla 1. La consideración de este número de grupos supone una reducción en el tiempo de cómputo para AZNHEX.

Tabla 1. Estructura de los 7 grupos de energía usados para la extracción de las XS

Grupo	Energía (eV)	Grupo	Energía (eV)
1	1.96403×10^{7}	5	2.03468×10^{3}
2	2.23130×10^{6}	6	2.26033×10^{1}
3	4.97871×10^{5}	7	5.4000×10^{-1}
4	6.73795×10^{4}		

Para extraer las XS se consideró también la división por anillos en el modelo tal como se muestra en la Figura 4, de tal modo que se tuvieran valores promediados de las XS para un mismo tipo de material en un anillo en particular. La Figura 5 muestra como el núcleo completo con 79 ensambles de combustible es definido en el script, de manera similar se define para 24, 40, 46, 55, 61, 65, 68, 69, 70, 71 y 72 ensambles de combustible insertados.

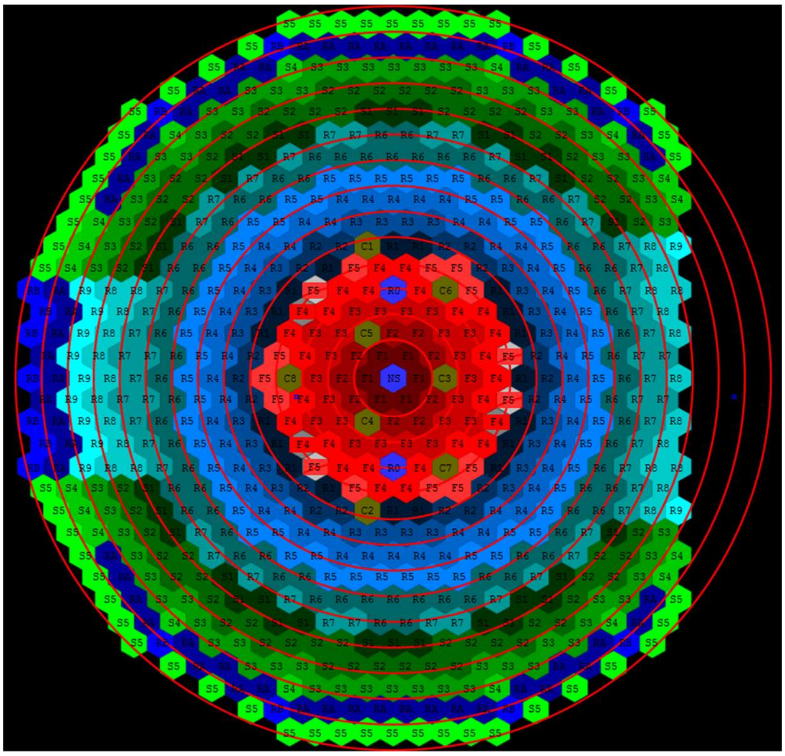


Figura 4. División por anillos en el modelo de Serpent

```
void printMap79FA(char nameOut[], double expansion)
{ FILE *output;
  output = fopen(nameOut, "a"); //

  fprintf(output, "\n\n%%  Universe  100  -->  Whole  Core  Lattice");
  fprintf(output, "\nlat 100 3 0.0 0.0 35 35  %f", 6.10*expansion);
  fprintf(output, "\n  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n   92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n    92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RB  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RB  S5  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n     92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  RA  S4  S3  S3  S3  S3  S3  S3  S3  S4  RA  RA  S5  92  92  92");
  fprintf(output, "\n      92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  RA  S3  S3  S3  S2  S2  S2  S2  S2  S2  S3  S3  S3  RA  RA  S5  92  92");
  fprintf(output, "\n       92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RB  RA  S3  S3  S2  S2  S2  S2  S1  S1  S1  S2  S2  S2  S2  S3  S3  RA  RB  S5  92");
  fprintf(output, "\n        92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  S4  S3  S2  S2  S1  S1  R7  R7  R6  R6  R7  R7  S1  S1  S2  S2  S3  S4  RA  S5  92");
  fprintf(output, "\n         92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  S3  S3  S2  S1  S1  R7  R6  R6  R6  R6  R6  R6  R6  R7  S1  S1  S2  S3  S3  RA  S5  92");
  fprintf(output, "\n          92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  S3  S2  S2  S1  R7  R6  R6  R5  R5  R5  R5  R5  R5  R6  R6  R7  S1  S2  S2  S3  S4  92  92");
  fprintf(output, "\n           92  92  92  92  92  92  92  92  92  S5  RA  S3  S2  S2  R7  R6  R6  R5  R5  R4  R4  R4  R4  R4  R5  R5  R6  R6  R7  S2  S2  S3  S4  92  92");
  fprintf(output, "\n            92  92  92  92  92  92  92  92  S5  S4  S3  S2  S1  R7  R6  R5  R5  R4  R4  R3  R3  R3  R3  R4  R4  R5  R5  R6  R7  S1  S2  S3  92  92  92");
  fprintf(output, "\n             92  92  92  92  92  92  92  S5  S4  S3  S2  S1  R6  R6  R5  R4  R4  R2  R2  C1  R1  R1  R2  R2  R4  R4  R5  R6  R6  R7  R8  R9  92  92  92");
  fprintf(output, "\n              92  92  92  92  92  92  S5  S4  S3  S2  S1  R6  R6  R5  R4  R3  R2  R1  F5  F4  F4  F5  F5  R2  R3  R4  R5  R6  R6  R7  R8  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n               92  92  92  92  92  RB  RA  R9  R8  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F5  F4  F4  R0  F4  C6  F5  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  R8  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                92  92  92  92  92  RB  RA  R9  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F4  F4  F3  F3  F3  F3  F4  F4  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                 92  92  92  92  RB  RA  R9  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F4  F3  F3  C5  F2  F2  F3  F3  F4  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                  92  92  92  92  RA  R9  R8  R7  R7  R6  R5  R4  R2  F5  F4  F3  F2  F1  F1  F2  F3  F4  F5  R2  R4  R5  R6  R7  R7  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                   92  92  92  RB  RA  R9  R8  R7  R6  R5  R4  R2  F5  C8  F3  F2  F1  NS  F1  C3  F3  F4  R1  R2  R4  R5  R6  R7  R8  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                    92  92  92  RA  R9  R8  R7  R7  R6  R5  R4  R2  F5  F4  F3  F2  F1  F1  F2  F3  F4  F5  R2  R4  R5  R6  R7  R7  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                     92  92  RB  RA  R9  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F4  F3  F3  C4  F2  F2  F3  F3  F4  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                      92  92  RB  RA  R9  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F4  F4  F3  F3  F3  F3  F4  F4  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                       92  RB  RA  R9  R8  R8  R7  R6  R5  R4  R3  R1  F5  F4  F4  R0  F4  C7  F5  R1  R3  R4  R5  R6  R7  R8  R8  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                        92  S5  S4  S3  S2  S1  R6  R6  R5  R4  R3  R2  R1  F5  F4  F4  F5  F5  R2  R3  R4  R5  R6  R6  R7  R8  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                         92  S5  S4  S3  S2  S1  R6  R6  R5  R4  R4  R2  R2  C2  R1  R1  R2  R2  R4  R4  R5  R6  R6  R7  R8  R9  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                          92  S5  S4  S3  S2  S1  R7  R6  R5  R5  R4  R4  R3  R3  R3  R3  R4  R4  R5  R5  R6  R7  S1  S2  S3  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                           92  S5  RA  S3  S2  S2  R7  R6  R6  R5  R5  R4  R4  R4  R4  R4  R5  R5  R6  R6  R7  S2  S2  S3  S4  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                            92  S5  RA  S3  S2  S2  S1  R7  R6  R6  R5  R5  R5  R5  R5  R5  R6  R6  R7  S1  S2  S2  S3  S4  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                             92  S5  RA  S3  S3  S2  S1  S1  R7  R6  R6  R6  R6  R6  R6  R6  R7  S1  S1  S2  S3  S3  RA  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                              92  S5  RA  S4  S3  S2  S2  S1  S1  R7  R7  R6  R6  R7  R7  S1  S1  S2  S2  S3  S4  RA  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                               92  S5  RB  RA  S3  S3  S2  S2  S2  S2  S1  S1  S1  S2  S2  S2  S2  S3  S3  RA  RB  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                                92  92  S5  RA  RA  S3  S3  S3  S2  S2  S2  S2  S2  S2  S3  S3  S3  RA  RA  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                                 92  92  92  S5  RA  RA  S4  S3  S3  S3  S3  S3  S3  S3  S4  RA  RA  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                                  92  92  92  92  S5  RB  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RA  RB  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                                   92  92  92  92  92  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  S5  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n                                    92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92  92");
  fprintf(output, "\n\nsurf Z00 hexxc 0.0 0.0 %f", 89.5*expansion);
  fprintf(output, "\nsurf Z01 pz %f", 0.0*expansion);
  fprintf(output, "\nsurf Z02 pz %f", 219.7*expansion);
  fprintf(output, "\ncell Z21 0 outside          -Z01");
  fprintf(output, "\ncell Z22 0 fill 100 -Z00 -Z02 Z01");
  fprintf(output, "\ncell Z23 0 outside   Z00 -Z02 Z01");
  fprintf(output, "\ncell Z24 0 outside        Z02");
  fclose(output);
}
```

Figura 5. Mapa del núcleo del CEFR

4. DESCRIPCIÓN DEL EJERCICIO DE VALOR DE BARRA DE CONTROL

Este ejercicio en particular se dividió en tres partes, las cuales se describen a continuación:

1) La primera parte del ejercicio es opcional para los participantes y consiste en calcular los valores de k_{eff} cuando todas las barras de control se encuentran completamente extraídas (caso inicial) y cuando alguna o varias de las barras se insertan totalmente. La k_{eff} obtenida en el caso inicial es fija y a partir de este dato, se van calculando los valores de barra que se piden en esta parte.
2) En esta segunda parte se piden hacer cálculos similares a la primera parte, con la diferencia de que la posición de las barras de control es diferente para cada caso, es decir, no están todas las barras completamente extraídas al inicio o insertadas al final. Además, para cada inserción de barra, el valor inicial corresponde al que se tenía antes de la inserción.
3) En la tercera parte, cada una de las barras se va insertando en pasos de 50 mm hasta quedar insertadas en su totalidad y en cada paso, se va calculando el valor de la k_{eff} correspondiente. Con los resultados de las k_{eff} se procede a obtener los valores diferenciales e integrales de las barras de control.

La totalidad de este experimento, de acuerdo con lo especificado en el benchmark, se llevó a cabo en condiciones en frío, es decir, a una temperatura de 250 °C, excepto para el sodio, cuya temperatura medida fue de 245 °C. Estas condiciones también fueron establecidas en el modelo realizado para tener una mejor estimación en los resultados finales.

5. RESULTADOS

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para cada parte del ejercicio del cálculo del valor de las barras de control.

5.1. Resultados de la Parte 1

Ya que se trata de un ejercicio opcional, no se tienen datos experimentales para comparar con lo calculado numéricamente, sin embargo, los resultados que se obtuvieron con Serpent se pudieron comparar con los resultados promediados de todos los participantes que utilizaron también códigos estocásticos. La Tabla 1 muestra los resultados finales de la primera parte del ejercicio.

Tabla 1. Valor de barras de control para la parte 1 del ejercicio

Barras	Calculo Serpent			Promedio Todos	Diferencia	
Insertadas	keff	SD(pcm)	Valor Barra (pcm)	Valor Barra (pcm)	pcm	%
Ninguna	1.03067	6.6				
RE1	1.02926	6.8	-133	-141	8	5.59
RE2	1.02927	6.7	-132	-147	15	10.29
2*RE	1.02766	6.6	-284	-291	7	2.48
SH1	1.01183	6.6	-1807	-1816	10	0.53

SH2	1.01218	6.9	-1772	-1782	10	0.55
SH3	1.01217	6.7	-1773	-1781	8	0.45
3*SH	0.974979	6.6	-5542	-5549	7	0.12
SA1	1.02088	6.4	-930	-943	12	1.30
SA2	1.02077	6.7	-941	-940	-1	-0.14
SA3	1.02043	6.2	-974	-976	2	0.23
3*SH+2*RE	0.971988	6.3	-5858	-5853	-5	-0.08
SH2+SH3+2*RE	0.991013	6.3	-3883	-3916	34	0.87
3*SA	0.999871	6.6	-2989	-2992	3	0.10
SA1+SA2	1.01074	6.1	-1913	-1834	-79	-4.29
2*RE+3*SH+3*SA	0.943162	6.9	-9002	-8969	-33	-0.37
2*RE+SH2+SH3+3*SA	0.961519	6.6	-6978	-6990	12	0.18

Tal como se aprecia en la tabla anterior, los resultados obtenidos con Serpent muestran una diferencia mínima comparados con los promediados de los participantes, teniendo la mayor discrepancia en el antepenúltimo caso con 79 pcm de diferencia. En la diferencia porcentual se aprecia un valor de 10 % para el segundo caso siendo el más alto, pero sin representar una diferencia excesiva entre ambos valores. Además, cabe subrayar que los resultados obtenidos por el resto de los participantes incluyen valores promediados de la fase de cálculos ciegos. Estos valores, en algunos casos se ven alterados por resultados reportados por algunos participantes con modelos numéricos de baja precisión.

5.2. Resultados de la Parte 2

En la Tabla II se muestran los resultados obtenidos para la parte 2 del ejercicio y su comparación con lo obtenido experimentalmente.

Tabla II. Valor de barras de control para la parte 2 del ejercicio

Caso	Barra o grupo		Calculo Serpent (ININ)			Medición Experimental		Diferencia	
			k-eff	SD (pcm)	Valor (pcm)	Valor (pcm)	SD (pcm)	pcm	%
Barras Reguladoras	RE1	Antes	1.00202	6.5	144	150	9	-6	-4.25
		Después	1.00058	6.6					
	RE2	Antes	1.00213	7	157	149	9	8	5.09
		Después	1.00056	6.5					
Barras Finas	SH1	Antes	1.00099	6.6	1925	2019	250	-94	-4.67
		Después	0.98207	6.6					
	SH2	Antes	1.00148	6.8	1862	1839	225	23	1.23
		Después	0.98315	6.2					
	SH3	Antes	1.00137	6.3	1864	1839	226	25	1.36

		Después	0.98302	6.7					
Barras de Seguridad	SA1	Antes	1.00199	6.7	909	945	100	-36	-3.86
		Después	0.99295	7.1					
	SA2	Antes	1.00176	6.6	877	911	100	-34	-3.77
		Después	0.99304	6.1					
	SA3	Antes	1.00197	6.8	968	946	98	22	2.31
		Después	0.99235	6.6					
1er Sistema de Apagado	3*SH+2*RE	Antes	1.00191	6.8	3056	2877	335	179	6.21
		Después	0.97215	6.4					
1er Sistema con SH1 atorada	SH2+SH3+2*RE	Antes	1.00111	6.4	1002	881	76	121	13.73
		Después	0.99117	6.8					
2do Sistema de Apagado	3*SA	Antes	1.00205	6.5	2897	2981	395	-84	-2.83
		Después	0.97379	6.8					
2do Sistema con SA3 atorada	SA1+SA2	Antes	1.00183	6.6	1816	1950	226	-134	-6.87
		Después	0.98393	6.7					
Todas Insertadas	2*RE+3*SH+3*SA	Antes	1.002	6.7	6080	6079	989	1	0.02
		Después	0.94446	6.6					
Todas insertadas con SH1 atorada	2*RE+SH2+SH3+3*SA	Antes	1.001	6.4	3944	3899	551	45	1.15
		Después	0.96298	6.7					

De acuerdo a los resultados obtenidos, se puede apreciar de la Tabla II que los valores numéricos cuentan con una diferencia mínima con respecto a los experimentales, siendo el caso más irregular el correspondiente al primer sistema de apagado donde se tiene una diferencia de 179 pcm; sin embargo, el valor calculado se comparó con el obtenido por otros participantes y cuentan con una gran similitud con el reportado por el ININ, por lo que se puede concluir que este caso esta simulado correctamente y probablemente exista alguna definición incorrecta en cómo se debía representar este caso en particular, o en como lo interpretaron los participantes.

5.3. Resultados de la Parte 3

Los valores de k_{eff} obtenidos en cada paso de inserción de las barras de control se muestran en la Tabla III. Se puede apreciar claramente la disminución de la k_{eff} en cada inserción, siendo más notorio este efecto cuando se insertan las barras finas y de seguridad ya que, a diferencia de las barras reguladoras, cuentan con un enriquecimiento de ^{10}B teniendo mayor capacidad de absorción de neutrones.

Tabla III. Valores de k_{eff} para cada paso de inserción de barras de control

Caso	Posiciones (mm)	RE1		RE2		SH1		SH2		SH3		SA1		SA2		SA3	
		keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)	keff	SD (pcm)
1	500	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4	1.03059	4.4

2	450	1.03044	4.1	1.03045	4.3	1.02974	9.4	1.02989	9.3	1.02984	9.4	1.03021	9.3	1.03000	9.2	1.03006	9.2
3	400	1.03036	4.4	1.03031	4.0	1.02848	9.2	1.02857	9.2	1.02858	9.3	1.02937	9.2	1.02938	9.1	1.02948	9.2
4	350	1.03018	4.1	1.03025	4.0	1.02686	9.2	1.02657	9.3	1.02676	9.3	1.02853	9.3	1.02826	9.3	1.02827	9.2
5	300	1.03007	4.4	1.03007	4.2	1.02437	9.3	1.02451	9.1	1.02440	9.1	1.02743	9.3	1.02710	9.4	1.02715	9.3
6	250	1.02976	4.0	1.02991	4.2	1.02186	9.3	1.02201	9.2	1.02185	9.1	1.02595	9.0	1.02581	9.1	1.02584	9.5
7	200	1.02954	4.3	1.02964	4.0	1.01902	9.3	1.01926	9.3	1.01938	9.3	1.02452	9.2	1.02437	9.3	1.02439	9.2
8	150	1.02941	4.4	1.02942	4.3	1.01664	9.5	1.01682	9.2	1.01671	9.3	1.02324	9.2	1.02339	9.3	1.02293	9.3
9	100	1.02932	4.3	1.02931	4.1	1.01428	9.3	1.01458	9.3	1.01475	9.2	1.02203	9.5	1.02218	9.4	1.02168	9.3
10	50	1.02906	4.1	1.02901	4.0	1.01285	9.3	1.01298	9.1	1.01311	9.3	1.02136	9.1	1.02143	9.3	1.02088	9.4
11	0	1.02902	4.2	1.02906	4.1	1.01172	9.3	1.01222	9.3	1.01193	9.2	1.02075	9.3	1.02078	9.3	1.02034	9.1

Las Figuras 6, 7 y 8 muestran los valores integrales normalizados de las barras reguladoras, finas y de seguridad respectivamente. La comparación con lo obtenido experimentalmente se muestra únicamente para las barras reguladoras y finas (Figura 6 y 7) ya que solo se cuenta con esos datos experimentales.

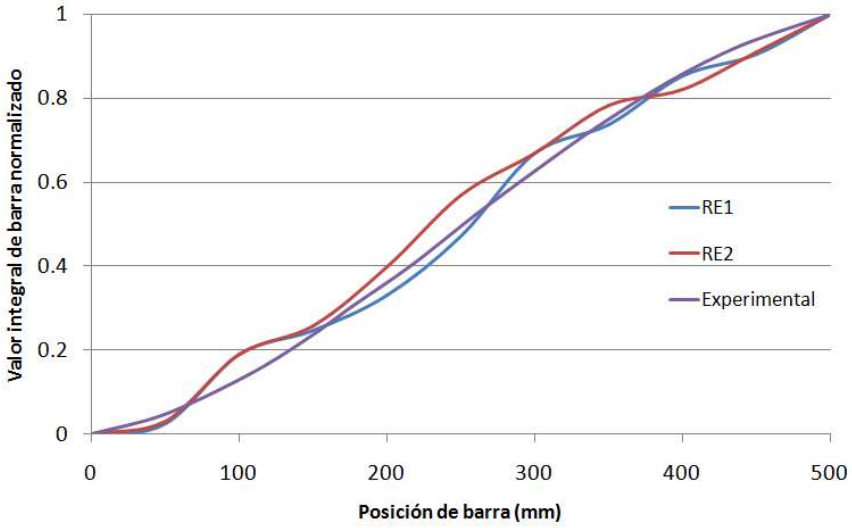


Figura 6. Valores integrales normalizados para las barras reguladoras

Se puede apreciar una tendencia irregular en el caso de los valores de barras calculados numéricamente (RE1 y RE2) debido a la naturaleza estocástica del código Serpent y que al ser las que tienen ^{10}B en proporciones naturales, el efecto de cada paso de inserción sea tan bajo que pueda estar en el mismo orden de su error estadístico, sin embargo, el comportamiento es el esperado y se aprecian errores mínimos en los resultados numéricos respecto a los experimentales.

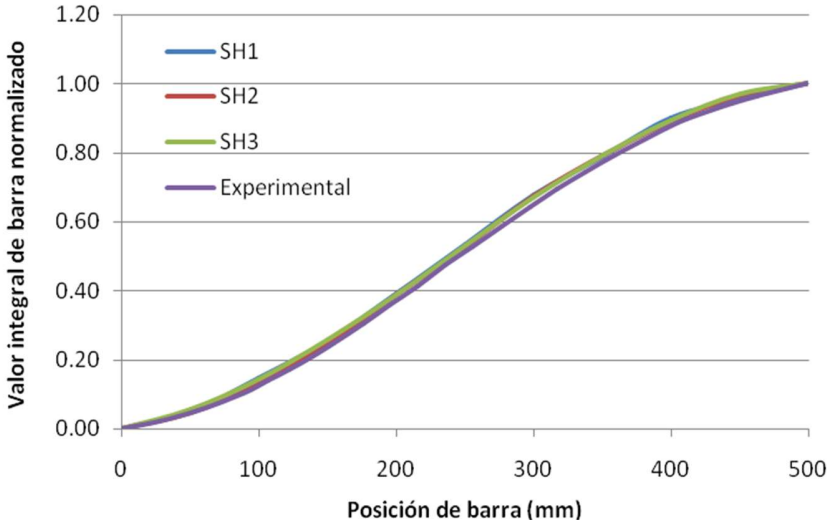


Figura 7. Valores integrales normalizados para las barras finas

De la Figura 7 se aprecia que los valores numéricos son muy similares a los experimentales, además de tener un perfil más regular comparado con el que se obtuvo para las barras reguladoras.

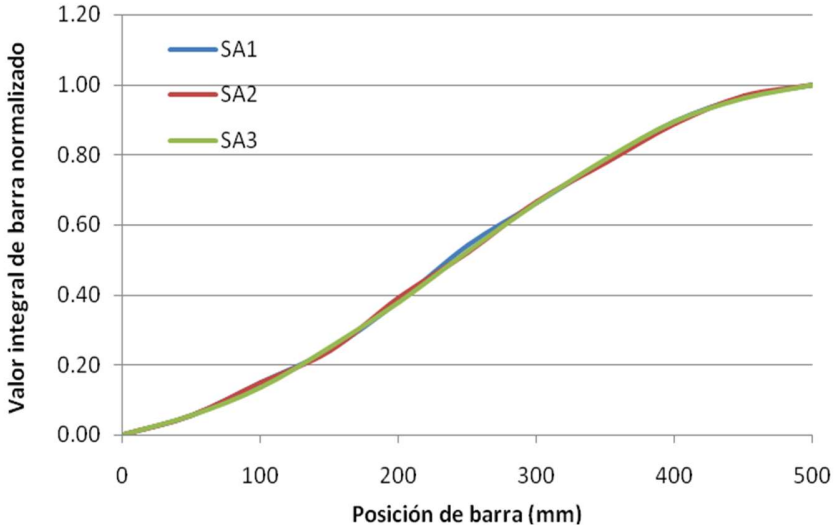


Figura 8. Valores integrales normalizados para las barras de seguridad

El comportamiento de las tres barras de seguridad que se muestra en la figura anterior, son consistentes entre si teniendo diferencias mínimas entre ellas. Al igual que las barras finas, se puede observar en este caso una tendencia en la curva muy regular para las tres barras.

4. CONCLUSIONES

Con los resultados obtenidos, se puede concluir que el modelo del CEFR realizado con Serpent es muy preciso y confiable para utilizar en caso de que se requieran realizar cálculos neutrónicos extras. La metodología empleada para realizar el modelo en Serpent y poder extraer las XS de cada material, ha resultado ser la adecuada pues se ha simplificado en gran manera la elaboración de los archivos de entrada de AZNHEX, además de que, dada la versatilidad del código, se pueden generar grupos de energía con cualquier malla energética de acuerdo con los requerimientos de los códigos determinísticos que los usen.

Los resultados de la parte 1 se compararon con los obtenidos por otros participantes ya que no se tenían resultados experimentales. Esta parte, que era opcional, fue de utilidad para tener una comparación inicial y asegurar que nuestros cálculos tuvieran concordancia descartando así cualquier posible error que tuviera el modelo. Se pude observar que los resultados del ININ tienen una gran similitud con los promediados de todos los participantes por lo que se concluye que el modelo está bien realizado. En la parte 2 se observó que los cálculos numéricos presentaban errores mínimos respecto a los datos experimentales y con las gráficas resultantes de la parte 3 para los valores integrales de las barras de control, se pudo concluir que los resultados de Serpent son muy cercanos a los valores experimentales, lo que permite concluir que el modelo se ha verificado y validado correctamente. El comportamiento que presentan las gráficas fue el esperado y aunque las barras reguladoras presentan irregularidades, en ambas se puede ver que presentan una curva con la tendencia esperada por lo que es probable que se pueda tener un mejor comportamiento aumentando el número de historias en los cálculos con Serpent lo que mejoraría la estadística y se acercaría más a los datos experimentales.

AGRADECIMIENTOS

El ININ agradece al Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética SENER–CONACYT por el apoyo recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform).

REFERENCIAS

1. X. Huo, et.al, “Neutronics Benchmark of CEFR Start-up Tests – Tech. Rep.”, Institute of Atomic Energy, Beijing, China (2019).
2. Jaakko Leppänen, Maria Pusa, Tuomas Viitanen, Ville Valtavirta, Toni Kaltiaisenaho, “The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013”, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. **82**, p. 142-150 (2015).
3. Gómez Torres, A. M., et.al, “AZTLAN: Mexican Platform for Analysis and Design of Nuclear Reactors”, *Proceedings of ICAPP 2015*, Nice, Francia, 03 al 06 de Mayo (2015).
4. Juan Galicia-Aragón,, et.al, “Initial Verification of AZNHEX hexagonal-z neutrón diffusion code with MCNP6 for two different study cases”, *Progress in Nuclear Energy*, Vol. **106**, p. 284-292 (2018).
5. G. Palmiotti, M. Assawaroongruengchot, M. Salvatores, M. Herman, P. Oblozinsky, C. Mattoon, M. Pigni, “Nuclear Data Target Accuracies for Generation-IV Systems Based on the Use of New Covariance Data”, *Journal of the Korean Physical Society,* Vol. **59** No. **2**, p. 1264-1267 (2011).

Diseño y análisis neutrónico: reactor a base de uranio-torio

Enrique Vera Romero; José Alfredo Soto Álvarez; Teodoro Córdova Fraga
Universidad de Guanajuato, Campus León, División de Ciencias e Ingenierías
Lomas del Bosque #103, Lomas del Campestre, 37150 León, Gto
verare2012@licifug.ugto.mx; jasa@fisica.ugto.mx; theo@fisica.ugto.mx

Resumen

Cuando pensamos en reactores nucleares, lo principal que asociamos es el combustible, por lo que el uranio es usualmente el más común al tomar en cuenta los distintos tipos de estos mismos. debido a los desafíos que se van presentando día a día en el ámbito de energía nuclear, buscando así, las condiciones óptimas para el uso de esta misma esperando obtener resultados deseados tales como una producción de energía a largo plazo sostenido, que se produzcan los mínimos residuos y estos mismos que contengan baja toxicidad, entre otras más, para lograr esto, en este estudio, se busca la implementación de uno de los combustibles el cual se considera como de los componentes que en el futuro de la energía nuclear es prometedor, esto es el uso del Torio, por lo que, este trabajo de investigación esta orientado en la línea de la implementación de configuraciones en la parte del combustible en un reactor, el cual tiene como principal combustible Uranio, y el Torio como secundario, debido a que este al ser un material considerado fértil, se convierte en uranio provocando así que este fisione y finalmente libere energía. El método por el cual se realiza dicha configuración es por medio de simulaciones, implementando el uso del software de Transporte de Partículas Monte Carlo (MCNP), con esto, se obtuvieron diversos prototipos usando distintas configuraciones en las geometrías correspondientes a la parte activa del núcleo del reactor, así como a sus partes complementarias relacionadas a este. Las simulaciones realizadas fueron diseñadas para lograr obtener una evaluación de la incorporación del torio a la matriz de combustible para ver cómo es que se comporta la criticidad durante un periodo mino de 550 días, así como el análisis del inventario de algunos actínidos de interés como el U-233, todo esto realizando el análisis neutrónico correspondiente.

1. INTRODUCCIÓN

Hoy en día, se observa una demanda ascendente de una nueva capacidad de generación de energía en todo el mundo, tanto para reemplazar las antiguas unidades de combustibles fósiles, especialmente las de carbón, que emiten una fuerte cantidad de dióxido de carbono, así como para cubrir la creciente necesidad de electricidad en muchos países. Por ejemplo, en 2017, el 65% de la electricidad fue generada a partir de la quema de combustibles fósiles. A pesar del fuerte apoyo y el crecimiento de las fuentes de electricidad renovables intermitentes en los últimos años, la contribución de los combustibles fósiles, a la generación de energía, se ha mantenido prácticamente sin cambios en los últimos 10 años aproximadamente (66,5% en 2005).[1]
Por lo tanto, de acuerdo a factores de la actualidad, como la capacidad económica y el crecimiento de la población, entre otros más, se necesita establecer un generador de electricidad capaz de ser

seguro y confiable. Una de las tecnologías de generación de energía más fiables y sostenibles es la energía nuclear. Esta fuente, permite la generación de electricidad económica, independientemente de las condiciones climáticas y económicas.[2]

Recientemente, se ha renovado considerablemente el interés por buscar diferentes opciones de combustible nuclear, ya que los accidentes nucleares más recientes como el ocurrido en Japón, ha cambiado negativamente la percepción de la gente sobre los reactores de combustible basados en uranio, lo que ha provocado una mayor demanda de fuentes de energía alternativas más seguras. Estos problemas han reavivado la necesidad de una alternativa de combustible nuclear viable y más segura, que reduciría a un mínimo soportable los retos que plantea el combustible nuclear a base de uranio.[3]

Una manera con la que se puede lograr esto, podría ser la aplicación del torio natural, que consiste esencialmente en un isótopo, el 232Th. El torio es un material fértil que, al capturar un neutrón, puede sufrir una serie de procesos de desintegración nuclear que conducen al 233U que este ya es fisil.[4]

Sin embargo, desde los primeros días en el desarrollo de la energía nuclear, el torio fue considerado un combustible potencial, que posiblemente podría complementar o incluso reemplazar a el uranio, que en ese momento se consideraba escaso, por lo que se hicieron algunas recomendaciones para que "se trabaje más en el desarrollo nuclear del torio debido a su mayor disponibilidad”. También se sugirió experimentos para desarrollar reactores que convertirían el torio a 233U. Pero, en los años que siguieron, se descubrió que el suministro de uranio natural no era tan limitado como se proyectaba. Además, el torio carece de un isótopo fisionable: es imposible comenzar una reacción en cadena de fisión puramente con torio extraído, y, por lo tanto, cualquier sistema nuclear que dependa del torio dependería inicialmente de la generación anterior de materia fisionable (extraída del uranio o criada en sistemas de uranio). Frente a estos dos factores, el interés por el torio disminuyó o quedó en suspenso.[5]

En el caso del uranio, la situación era completamente diferente; El uranio natural, que contiene 0,71% de 235U fisionable, proporcionó el combustible para los reactores moderados con agua pesada y carbono que no requirieron ningún enriquecimiento de 235U. Además, también existía la capacidad de enriquecimiento necesaria para proporcionar el combustible de uranio enriquecido requerido para operar reactores de agua ligera (LWR). El plutonio generado en todos estos tipos de reactores alimentados con uranio proporcionó una ruta obvia para desarrollar reactores reproductores rápidos, que podrían usar el plutonio como combustible y generar, a partir de 238U, más plutonio del que consumieron. Durante los primeros días de la energía nuclear, el inicio del ciclo de combustible de uranio / plutonio fue, por lo tanto, la ruta obvia hacia la "independencia del combustible" para los principales países pioneros en desarrollo nuclear. Hoy en día, la disponibilidad de material fisionable (plutonio o uranio enriquecido) que surge del ciclo de combustible de uranio / plutonio ya bien establecido, hace que se busque la implementación de combustibles, como el del torio, se haga factible en principio, aunque los recursos económicos necesarios para dedicar importantes recursos industriales a ese fin, aún no están claramente establecidos.

Por lo tanto, es perfectamente exacto decir que el uso del torio se ha considerado como una opción para el combustible nuclear desde la llegada de la utilización de la energía nuclear. Sin embargo,

el torio no puede ser una alternativa real al uranio, al menos en la etapa inicial, porque no tiene algún isótopo fisionable. Sin embargo, genera el nucleido fisible 233U, por el proceso de captura de neutrones presente en un reactor nuclear. El 233U, es un excelente nucleido fisionable, con ventajas sobre el 235U o 239Pu utilizado en los reactores actuales. Este "atractivo neutrónico" de 233U, particularmente en los reactores de espectro térmico de neutrones, hace que el uso del torio sea científicamente interesante, a pesar de los múltiples desafíos que aún deben resolverse técnica e industrialmente.

2. CONFIGURACIÓN DEL REACTOR

2.1 configuración isotópica

En el presente trabajo, se realizó una configuración homogénea del núcleo del reactor, el cual está formado por dos elementos de combustible, uranio y torio (UO2-ThO2), donde el uranio 235 enriquecido al 10%, conforma el 70% del combustible, y el torio 232 por su parte, conforma el 30% del combustible, como encamisado se utilizó carburo de silicio, y como refrigerante y a la vez reflector se estableció H_2O, todos los elementos mencionados anteriormente conforman una mezcla homogénea que constituye al núcleo del reactor. en la Tabla I se muestra la composición isotópica mencionada anteriormente con su respectiva densidad atómica del diseño final del reactor. Por último, como reflector, cercando así el núcleo del reactor se implementó grafito con una densidad de masa igual a 1.6.

Tabla I. Composición isotópica del núcleo y material utilizado como reflector

Núcleo del reactor	
Elemento/Isotopo	**Densidad atómica (átomos/b-cm)**
U-234 (combustible)	3.40584E-07
U-235 (combustible)	0.000597515
U-238 (combustible)	0.005377298
Th-232 (combustible)	0.003064707
Si-28 (encamisado)	0.004162084
Si-29 (encamisado)	0.000197784
Si-30 (encamisado)	0.000121909
C (encamisado)	0.001166031
H (refrigerante)	0.014418646
O(refrigerante/combustible)	0.022025317
Mezcla	**Total = 0.051131633**
Reflector	
Material	**Densidad de masa (g/cc)**
grafito	1.6

2.2 Descripción del modelo geométrico

En la Figura 1, que se presenta a continuación, se muestra la simulación del modelo geométrico del reactor, mediante una vista lateral, el cual está conformado por dos cilindros concéntricos, los cuales, el núcleo del reactor, tiene como dimensiones 600.909 cm de altura por 600.935 cm de radio (diámetro igual a 1201.87 cm), el segundo cilindro, que rodea el núcleo, correspondiente a el reflector, constituido por grafito como ya se había mencionado anteriormente, tiene como dimensiones 780.909 cm de altura por 780.935 cm correspondientes al radio (diámetro igual a 1561.87 cm).

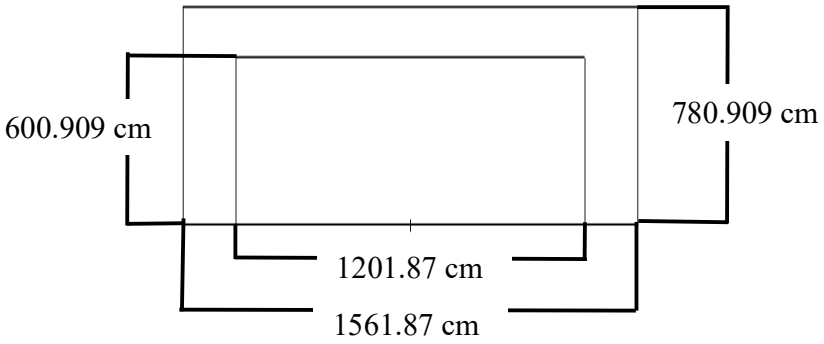


Figura 1. Vista lateral del modelo geométrico

Para realizar este tipo de estructura, se utilizaron las superficies definidas por macro cuerpos, en este caso, como se observa en la Figura 2, para generar el modelo geométrico presentado con anterioridad, se empleó el uso del macro cuerpo RCC (RIGHT CIRCULAR CYLINDER). Se eligió el uso de este tipo de estructuras debido a la versatilidad y facilidad de manejo que ofrece este tipo de estructuras a la hora de realizar simulaciones homogéneas.

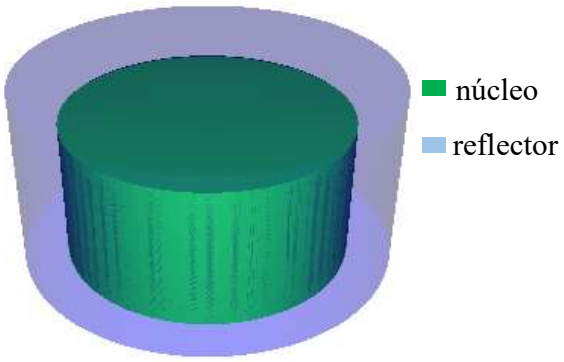


Figura 2. Vista 3D del modelo geométrico del reactor utilizando el macro cuerpo RCC

3. CALCULO Y ANÁLISIS DE QUEMADO DE COMBUSTIBLE

3.1 Criticidad

Se prosiguió a realizar el análisis de los resultados de interés obtenidos de la simulación, tales como se muestran en la Tabla II que se muestra a continuación, donde se muestran los pasos establecidos, su duración, la potencia establecida, la criticidad que se analizará, y el quemado de combustible.

Tabla II. *Keff* en función de tiempo de irradiación en los distintos pasos

paso	Duración (días)	Tiempo (días)	Potencia (MW)	*Keff*	$\bar{v}$	Quemado (GWd/MTU)
0	0	0	1000	**0.96881**	2.470	0
1	50	50	1000	**0.96718**	2.470	0.01287
2	50	100	1000	**0.96783**	2.471	0.02575
3	50	150	1000	**0.96650**	2.470	0.03862
4	50	200	1000	**0.96776**	2.471	0.05149
5	100	300	1000	**0.96797**	2.471	0.07724
6	100	400	1000	**0.96564**	2.471	0.1030
7	100	500	1000	**0.96936**	2.472	0.1287
8	50	550	1000	**0.96447**	2.472	0.1416

Ya que la criticidad es el objeto de interés en esta parte, se pasó a analizar gráficamente, donde se observa su comportamiento en la Figura 3, el cual, se mantiene prácticamente constante en el intervalo de 0.96.

Figura 3. Evolución del *Keff* en función del tiempo de irradiación

Cómo se logra apreciar en el gráfico de la evolución del Keff (reactivity coefficient k-effective) (Figura 3), en el lapso de entre 400 a 500 días trascurridos, se tiene un incremento de la criticidad, lo cual nos sugiere que se están presentado mayor generación de fisiones, esto debido al aumento de producción del uranio 233.

3.2 Inventario de masas producidas y consumidas

Por parte del combustible principal, uranio 235, se logra apreciar que se va quemando gradualmente conforme pasa el tiempo como se observa en la Figura 4.

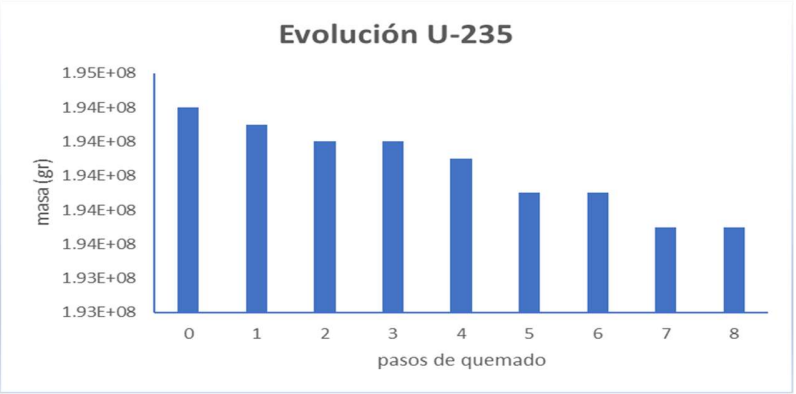


Figura 4. Comportamiento masico del Uranio 235 a lo largo de los distintos pasos

Un actínido formado de vital importancia gracias a la implementación del torio, es el uranio 233, el cual se aprecia en la Figura 5, se va produciendo progresivamente desde el paso 1.
Es de vital importancia, ya que el U233 es un isótopo fisil, que fisiona con neutrones térmicos al igual que el U235, sin embargo, no se da de forma natural el U233, solo mediante la transmutación del torio, y este abunda 3 veces más que el uranio en la naturaleza.

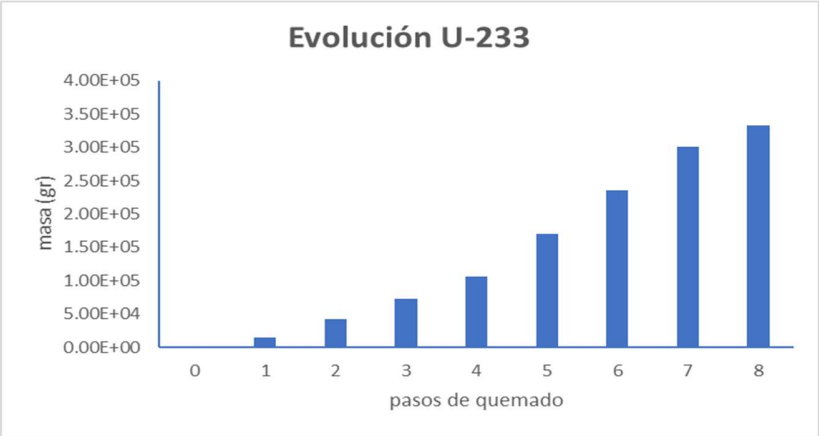


Figura 5. Comportamiento masico del Uranio 233 a lo largo de los distintos pasos

Otro actínido creado que puede alargar la duración del funcionamiento del reactor es el plutonio 239, el cual, como el caso del uranio 233, también se va generando desde el paso 1, como se observa en la Figura 6.

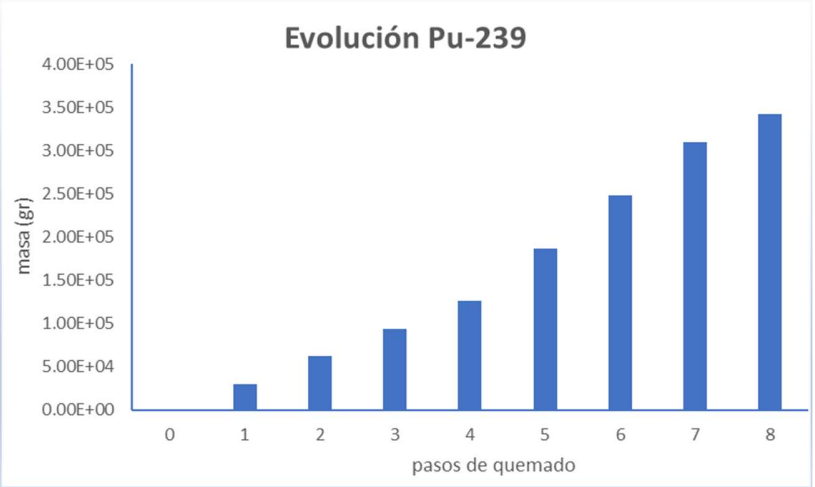


Figura 6. Comportamiento masico del Plutonio 239 a lo largo de los distintos pasos

Por último, se analiza la generación del xenón 135, el cual es un aspecto importante de analizar, ya que envenena el reactor al principio, por eso es importante darle seguimiento. En la Figura 7 se observa que el xenón 135 se estabiliza y el *keff*, por consecuente, y como se observó anteriormente en la Figura 2, no disminuye drásticamente en este tiempo de simulación.

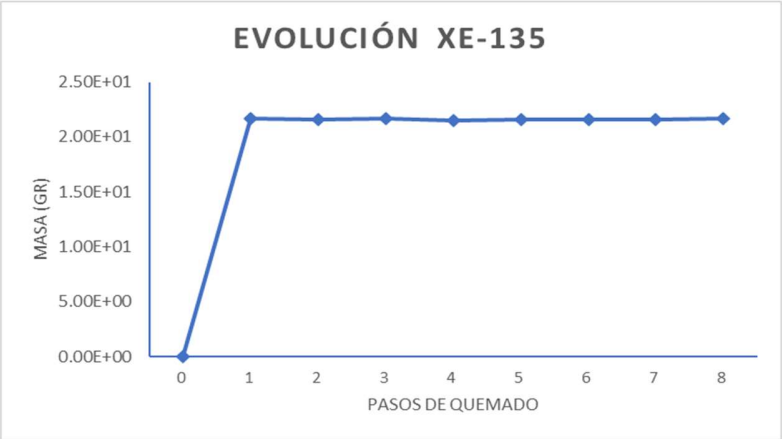


Figura 7. Comportamiento masico del Xenón 135 a lo largo de los distintos pasos

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo, se analizó el comportamiento de un reactor nuclear de configuración homogénea, implementando como combustible (UO2-ThO2), en el cual se analizaron ciertos puntos de interés, como el comportamiento de la criticidad a lo largo de los distintos pasos de quemado, la cual, prácticamente se mantiene constante y además, es cercana a 1, también se analizaron ciertos actínidos generados de interés, principalmente, debido a la implementación del torio, el Uranio 233, pero, también el generado debido al uranio, el plutonio 239, con lo cual, se puede establecer que el torio, es una opción viable para el complemento del combustible principal, en este caso uranio, con el fin de producción de energía a largo plazo, debido a los actínidos

producidos tales como se mencionó anteriormente, el uranio 233 y el plutonio 239, por lo que queda por seguir con esta investigación, es realizar geometrías aún más complejas, estructuradas y avanzadas, para lograr obtener una criticidad mayor a 1 y estudiar el comportamiento de los actínidos producidos gracias a la implementación del torio, y así, contribuir a la aceptación y utilización de este material en futuros reactores nucleares para con esto, tener una energía nuclear más amigable y segura.

AGRADECIMIENTOS

Primeramente, agradecer a la Universidad de Guanajuato por el apoyo que nos brinda a los estudiantes para lograr desarrollar nuestros proyectos de investigación, también agradecer al consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT) por su dedicación y esfuerzo, a mis asesores, el Dr. José Alfredo Soto Álvarez y el Dr. Teodoro Córdoba Fraga por su dedicación y su labor por trasmitir su conocimiento tanto de la materia como de su experiencia de vida.

REFERENCIAS

1. "página del World Nuclear Association", https://www.world-nuclear.org (2020).
2. Marcin Karol Rowinski, Timothy John White, Jiyun Zhao, "Small and Medium sized Reactors (SMR): A review of technology", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. **44**, p. 643-653 (2015).
3. Uguru Edwin Humphrey, Mayeen Uddin Khandake, "Viability of thorium-based nuclear fuel cycle for the next generation nuclear reactor: Issues and prospects", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. **97**, p. 259-275 (2018).
4. H. György, Sz. Czifrus, "The utilization of thorium in Generation IV reactors", *Progress in Nuclear Energy*, Vol. **93**, p. 306-317 (2016).
5. OECD, NEA, "*Introduction of Thorium in the nuclear fuel cycle*", *Nuclear ciencie*, Vol. **7224**, p. 13 (2015).

Calibración semi-empírica de un detector de germanio hiperpuro para mediciones *in situ* de radionúclidos naturales

Hernández Ramírez Daniel*, Ríos Martínez Carlos, Pinedo Vega José Luis, López Espinosa Anahid Zharazan, Vargas Hurtado Mauricio.
Unidad Académica de Estudios Nucleares, Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas".
Calle Cipres No.10, La Peñuela 98060 Zacatecas, Zac.
ninib44@hotmail.com

Resumen

La espectrometría gamma *in situ* con detectores de germanio hiperpuro es una técnica pasiva, no destructiva, que permite la identificación y la potencial cuantificación de los radionúclidos presentes en el medioambiente. Esta técnica requiere una calibración en energía para la parte cualitativa y una calibración en eficiencia para la parte cuantitativa, esta última calibración no es trivial, ya que cada detector tiene una respuesta única y particular para cada energía de los fotones gamma emitidos por radionúclidos en el medioambiente. Esta respuesta, en la geometría *in situ*, depende tanto de las características del detector como de la distribución vertical y horizontal de los emisores gamma. Se realizó una calibración eficiencia para el sistema de espectrometría *gamma in situ* GeRe-3522 de la Unidad Académica de Estudios Nucleares de la Universidad Autónoma de Zacatecas. La calibración consiste en calcular tres factores que describen la respuesta del detector, para una energía determinada, en la geometría *in situ*; la eficiencia a un haz paralelo de fotones en la línea central del detector, el flujo de fotones que arriban al detector por unidad de actividad en el suelo y el factor de corrección angular. Este último es el factor crítico de esta calibración, ya que depende de las características del detector como de la distribución de la fuente radiactiva, y se determina como la integral de 0 a $\pi/2$ radianes de la función de respuesta angular del detector, la cual se determinó en forma empírica. Al tener estos tres factores, para cada energía de los rayos gamma de interés, es posible determinar la actividad específica de los radionúclidos presentes en el medioambiente a partir de mediciones *in situ*.

1. INTRODUCCIÓN

El monitoreo de la concentración de radionúclidos naturales y antropogénicos en el medioambiente es importante debido a que su radiación puede tener severas implicaciones para la salud humana, conocer los niveles de radiactividad es de gran importancia para la evaluación de las interacciones y los efectos de la radiación en los humanos [1], por lo que es esencial contar con métodos exactos para determinar los niveles de actividad en el medioambiente, como preparativos para situaciones de emergencia y a una escala de tiempo mayor, para obtener un mapeo radioecológico.

Existe una diferencia importante entre el monitoreo medioambiental con propósitos radioecológicos y con propósitos de preparación para emergencias. El primero requiere incertidumbres de medición pequeñas con el objetivo de detectar pequeños cambios con el tiempo, y la necesidad de resultados rápidos posiblemente es de menor importancia. En la preparación para emergencias la velocidad para obtener resultados es esencial. Sin embargo, la necesidad de bajas incertidumbres puede no ser tan importante. Existe un compromiso, entre la velocidad y la simplicidad por un lado y, bajas incertidumbres por el otro. Es importante hacer notar que cada escenario en particular debe tener su propio conjunto de parámetros y demandas, el cual se gobierna con el compromiso que se debe hacer, y cual método de medición es el mejor y más adecuado para las condiciones de medición [2].

Los dos métodos más ampliamente usados para la determinación de los niveles de radiación en suelos son la espectrometría *in situ* de rayos gamma usando detectores de germanio hiperpuro y el muestreo en suelos [3]. En la actualidad los detectores de germanio hiperpuro (HPGe) son con frecuencia la mejor opción para las mediciones *in situ* debido a su resolución en energía superior. Este es uno de los métodos más exactos y efectivos para la medición de radionúclidos emisores gamma en suelos. Sin embargo, para obtener un factor de calibración exacto para la eficiencia de conteo es necesario conocer la eficiencia intrínseca del detector y la respuesta angular, así como la distribución en profundidad de la fuente radiactiva [4]. Cuando la eficiencia intrínseca y la respuesta angular es determinada en forma empírica y la fluencia de fotones es determinada analíticamente para una distribución en particular de la fuente radiactiva, los métodos de calibración se denominan semiempíricos [2].

La espectrometría *in situ* de rayos gamma es un poderoso método que puede identificar y potencialmente cuantificar radionúclidos directamente en el sitio de medición en forma rápida y en tiempo real [5]. Este es un método rápido que automáticamente integra la información sobre grandes áreas y, por lo tanto, proporciona valores promedio confiables. Sin embargo, la espectrometría *in situ* de rayos gamma es una técnica compleja que requiere equipamiento costoso y usuarios con experiencia. El cálculo de los factores de calibración necesarios introduce una gran incertidumbre ya que se hacen suposiciones sobre la distribución en profundidad de los radionúclidos y sobre la densidad de los suelos [3].

Aunque la respuesta de un detector a los fotones que inciden de forma normal provee una medida general de la sensibilidad para mediciones *in situ*, una calibración real y completa del detector para la mayoría de las aplicaciones implica la respuesta a otros ángulos de incidencia debido a que generalmente en las determinaciones medioambientales se miden grandes áreas en lugar de fuentes puntuales. En estas circunstancias los fotones pueden incidir por la pared lateral del detector, y posiblemente con trayectorias diferentes a los incidentes normalmente. Por esta razón, se deben tomar algunas consideraciones respecto a la forma del cristal, el tamaño del dewar y la orientación del detector en la medición de campo [6].

Cualitativamente, la respuesta angular de una fuente puntual alrededor del cristal es el resultado de la variación de tres factores: a) el ángulo sólido geométrico del detector; b) la distribución de la longitud de trayectoria a través del volumen sensible del detector; y c) la atenuación de los fotones entre la fuente y el detector [7]. Uno de los primeros métodos de calibración en eficiencia

para mediciones *in situ* fue desarrollado por Beck y que se encuentra plasmado en el reporte 53 del International Commission on Radiation Units and Measurements [6, 8, 9].

En este método se utiliza una ecuación para estimar la razón de conteo a la energía de interés por unidad concentración de actividad en un medio, $\frac{N}{A_S}$. La ecuación es:

$$\frac{N}{A_S} = \frac{N}{N_0} \times \frac{N_0}{\varphi} \times \frac{\varphi}{A_S} \tag{1}$$

Donde, $\frac{N}{N_0}$ es el factor de corrección angular para una fuente con una distribución dada en el medio determinado, $\frac{N_0}{\varphi}$ es la razón de conteo del pico de energía total por unidad de flujo (fotones por unidad de área por unidad de tiempo) para un haz paralelo de fotones que inciden normalmente a la cara del detector y $\frac{\varphi}{A_S}$, es el flujo total de fotones a la energía de interés que arriba al detector por unidad de actividad en el suelo.

La probabilidad de que un fotón incidente deposite completamente su energía dentro del volumen activo del detector depende del ángulo de incidencia con el detector y de la energía del fotón incidente. Para una sola energía, esta probabilidad es descrita por la función de respuesta angular del detector $\left(\frac{N(\theta)}{N_0}\right)$. El factor de corrección angular, $\frac{N}{N_0}$, es la integral de la función de respuesta angular de 0-π/2 rads para una fuente específica. El valor de $\frac{N(\theta)}{N_0}$ es medido ubicando fuentes puntuales a varios ángulos de la línea central del detector y haciendo mediciones corregidas por fondo de la razón de conteo a la energía de los picos de energía total del isótopo de interés.

El factor $\frac{N_0}{\varphi}$ es comúnmente conocido como la eficiencia del detector en la línea central. Esta representa la probabilidad de que el fotón incidente de forma normal sobre la cara del detector deposite toda su energía dentro del volumen activo del detector. Esta es calculada colocando fuentes puntuales de un rango de energías a una distancia lejana del detector de tal manera que los fotones se consideren que arriban de forma paralela al detector. La medición de la tasa de conteo a cada energía es ajustada a una curva y esta es usada para determinar $\frac{N_0}{\varphi}$ a cualquier energía. El valor de $\frac{\varphi}{A_S}$ no depende del detector y es determinado por examinación de tablas de valores previamente calculadas. Estos valores fueron calculados por Beck usando métodos Monte Carlo, métodos analíticos, y mediciones de laboratorio. Los resultados están disponibles para un rango de fuentes distribuidas exponencialmente en el suelo. La única variación en la composición del suelo que se toma en cuenta es la humedad. Solo una composición del suelo es usada para todos los cálculos [10].

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Con el objetivo de estimar la eficiencia para mediciones *in situ* de nuestro sistema de detección se midió la respuesta angular como la razón de conteo (área bajo el pico de energía total) de diferentes energías de la una fuente de europio-152 por unidad de razón de fluencia relativas a la

incidencia de fotones normal a la cara del detector ($\frac{N(\theta)}{N_0}$) para ángulos desde 0° hasta 90° en intervalos de 10°.

2.1. Materiales

2.1.1 Sistema de detección: el sistema de espectrometría gamma portátil GeRe-3522, está construido por componentes que contribuyen a la detección, procesamiento e identificación de los pulsos característicos proporcionados por los rayos gamma de los radioisótopos que interaccionan con el detector semiconductor. Cada uno de los componentes que conforman el Sistema GeRe-3522 se describen a continuación:

Cristal de Ge hiperpuro (3522): El detector tiene una eficiencia relativa de 35% respecto a un cristal de NaI(Tl) 3 X 3 pulgadas y una resolución (FWHM) de 2.2 keV, ambas para la energía de 1332.5 keV del ^{60}Co.

Preamplificador 2002 CSL: dispositivo electrónico de reducidas dimensiones adyacente al detector, el cual facilita la transmisión de los pulsos de detección a los siguientes equipos de procesado.

Dewar portátil: el detector de germanio hiperpuro de electrodo inverso, así como el preamplificador 2002 CSL adyacente a él, se encuentran montados en un dewar portátil, figura 1. El dewar portátil Big MAC (Multi Attitude Cryostat) tiene la ventaja de adoptar diferentes posiciones en las cuales se puede colocar el dewar sin que se pierda el LN_2, su tamaño es pequeño y compacto lo cual proporciona una versatilidad al momento de ser empleado en cualquier lugar, especialmente al hacer las mediciones *in situ*.

empleado cualquier lugar[21], especialmente al hacer las r

Figura 1. Detector de Germanio tipo-n, preamplificador y dewar

2.1.2 Gabinete NIM portátil modelo 100: proporciona energía eléctrica a los módulos:

Fuente de alto voltaje Canberra 3106D: proporciona el alto voltaje empleado para la polarización del detector, siendo en este caso -4000 V.

Amplificador espectroscópico modelo 2022 marca Camberra: La amplitud de la señal de salida del preamplificador sensible a carga está en el rango de los mV, la cual es amplificada a un rango de 0.1 – 10 V con el amplificador espectroscópico.

Figura 2. Gabinete NIM portátil modelo 100

2.1.3 ADC (Convertidor Analógico Digital) y MCA (Analizador Multicanal) en una tarjeta de adquisición Accuspec-A de 32 kB de memoria marca Camberra: el convertidor analógico digital mide la amplitud máxima del pulso analógico proveniente del amplificador y lo trasforma en un número digital, asignando al valor digital un canal específico en el analizador multicanal. El SEG-GeRe-3522 emplea un ADC Wilkinson, con una memoria para 8000 canales. En este tipo de ADC, el tiempo empleado para transformar la señal es proporcional a la energía (amplitud) del pulso. El ADC y MCA se encuentran confinados en una tarjeta interface ISA de adquisición (Adquisition Interface Board) AccuSpect-A.

2.2.4 Computadora para la adquisición de espectros: A través de éste equipo se visualizan las señales debidamente procesadas y registradas en el espectro. El software empleado para la adquisición y análisis de los espectros de rayos gamma es Genie-2000 [11], dicho software presenta funciones tales como el control del analizador multicanal, la exhibición y manipulación del espectro de rayos gamma, así como el análisis y reporte de dichos espectros.

2.2.5 Trípode del detector: el trípode del detector es empleado para analizar las mediciones de radiación en campo y en laboratorio. El trípode modelo 7413, cuenta con patas deslizables para ajustar la altura del soporte según sea necesario. Las puntas del trípode son puntiagudas para que sean enterradas en el suelo y de esta forma estabilizar el detector.

Figura 3. Sistema GeRe-3522

2.2.6 Sistema para posicionar la fuente radiactiva: se creó un sistema para posicionar la fuente de europio-152 que cuenta con tres ejes en geometría trigonal plana, cada uno de estos ejes coloca la fuente alrededor del detector en diferentes ángulos (0°, 10°, 20°, 30°, 40°, 50°, 60°, 70°, 80° y 90°) a una distancia constante de 45 cm al centro del cristal del detector.

Figura 4. Sistema para posicionar la fuente radiactiva en diferentes ángulos a una distancia fija del centro del detector

2.2.7 Fuente radiactiva de Europio-152: fuente certificada de rayos gamma de europio-152, suministrada por Medidores Industriales y Médicos S.A. de C.V., con una actividad de 1.036 µCi (38.33 kBq) al 15 de noviembre del 2015 a las 12:00 pm, con una incertidumbre total del 3%, con base de epóxido y cubierta de acrílico, con un diámetro activo de 5 mm formada a partir de una sal evaporada del metal.

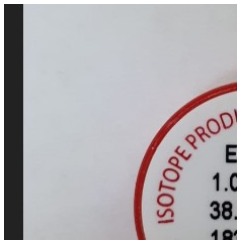


Figura 5. Fuente radiactiva de europio-152

2.2. Método

1.- Montaje del detector frío en el tripié sobre el dispositivo posicionador de la fuente radiactiva y conexiones.

2.- Adquisición de radiación de fondo por un periodo de 252,300 segundos, con un voltaje de 4000 Volts en polaridad negativa, ganancia gruesa de 10, ganancia fina de 0.61, tiempo de formación de pulsos de 4 μs.

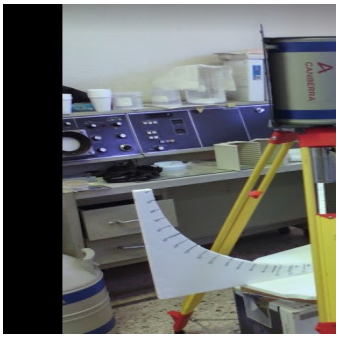


Figura 6. Montaje experimental para la adquisición de radiación de fondo natural

3.- Medición de la fuente de europio-152 a una distancia de 45 cm del centro del detector (a un ángulo polar de 0°) por un período de 7,200 segundos.

Figura 7. Medición de la respuesta frontal del detector

4.- Medición de la fuente de europio-152 a una distancia de 45 cm del centro del detector a los ángulos polares de 10°, 20°, 30°, 40°, 50°, 60°, 70°, 80° y 90°, en tres ejes de geometría trigonal plana por periodos de 7,200 segundos.

Figura 8. Medición de la respuesta angular

5.- Calibración de los espectros en energía. Esta calibración establece la relación existente entre el número del canal que se asigna en el multicanal y la energía de los fotones gamma. Para esto se seleccionaron 14 picos bien definidos que aparecen en el espectro de fondo.

Tabla I. Energía de los rayos gamma del europio-152 de mayor probabilidad de emisión

Energías de los rayos gamma del europio-152 (keV)	Probabilidad de emisión
121.781	0.2853
244.6974	0.0755
344.2785	0.2659
411.116	0.02237
443.956	0.03125
688.67	0.00856
778.9045	0.1293
867.38	0.0423
964.057	0.1451
1085.837	0.1011
1112.076	0.1367
1212.948	0.01415
1408.013	0.2087

6.- Análisis de los espectros y determinación de la respuesta del detector a cada pico de energía total de interés, que son los que no tienen interferencias con los picos de fondo y con altas probabilidades de emisión.

7.- Cálculo de la respuesta angular relativa a la respuesta frontal, como la razón entre la respuesta del detector, a cada energía, en los diferentes ángulos y la respuesta frontal.

3. RESULTADOS

En la figura 9 se muestra un espectro característico de las mediciones de la fuente de europio-152 con fondo y sin fondo, en la figura 10, donde se aprecia la presencia de varios picos de energía total de esta fuente, que fueron usados para hacer la determinación de la respuesta angular.

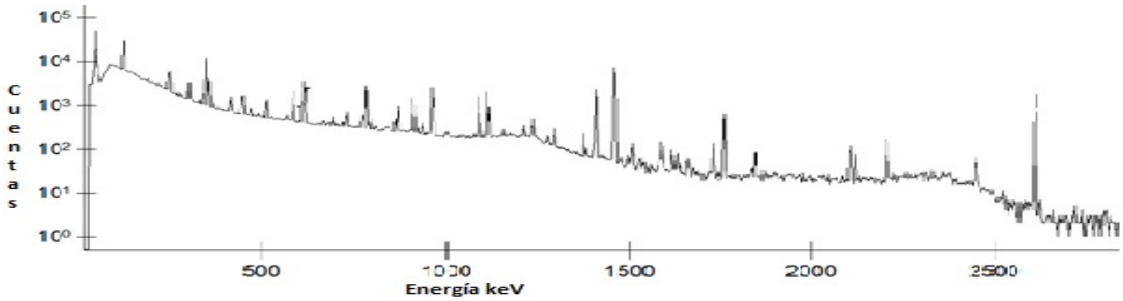


Figura 9. Espectro con fondo de la fuente de europio-152 en escala log

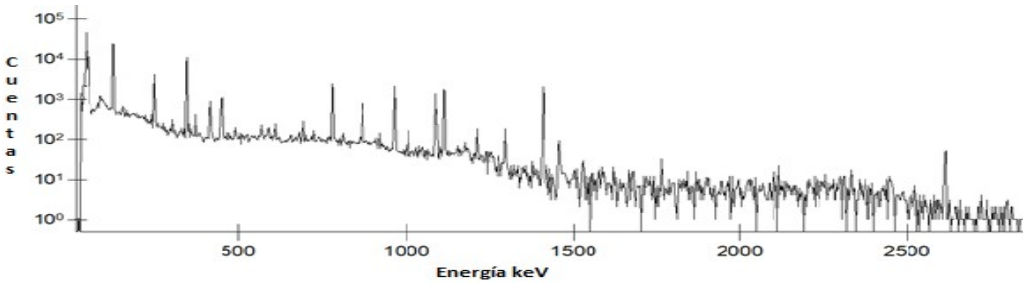


Figura 10. Espectro sin fondo de la fuente de europio-152 en escala log

En la figura 11 se muestra la respuesta angular (de 0° hasta 90°) relativa a la respuesta frontal (0°) para las energías de los rayos gamma seleccionados de la fuente de europio-152.

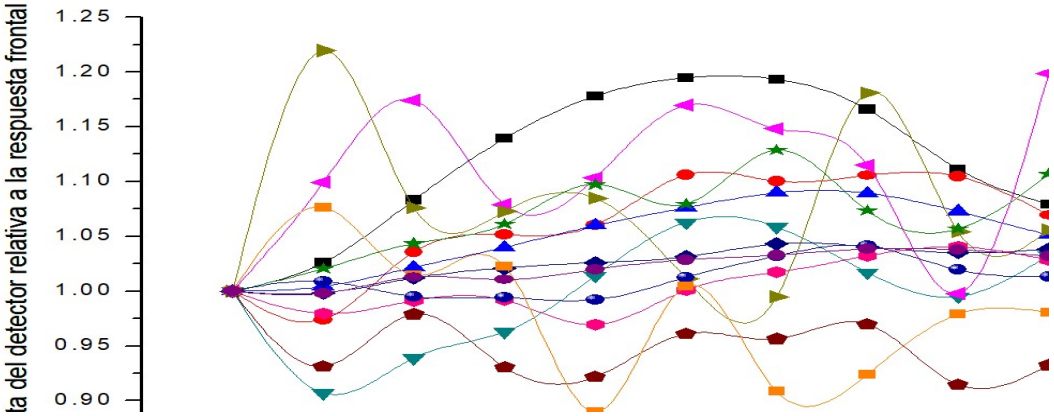


Figura 11. Respuesta angular del sistema GeRe-3522 para las energías del europio-152

En concordancia con el ICRU-53 el factor de calibración para las mediciones *in situ*, es decir la relación entre la razón de conteo en algún pico de energía total, $\dot{N}$ (s^{-1}) y la actividad por unidad masa A_s (Bq kg^{-1}), se puede expandir como en la ecuación 1.

Donde $\dot{N}_0$ es la razón de conteo en algún pico de energía (s^{-1}) para los fotones que inciden en forma normal a la cara del detector, y φ es la razón de fluencia de fotones sobre el detector (cm^{-2} s^{-1}). Aunque la actividad específica es expresada en términos de actividad por unidad de masa en la ecuación anterior, el resultado final se puede recalcular fácilmente en unidades de actividad por unidad de área o de volumen.

El primer término del lado derecho de la ecuación 1 representa un factor de corrección para la respuesta angular del detector, y el segundo término representa la respuesta frontal (0°) del detector a una energía determinada de fotones y el tercero la razón de fluencia de fotones primarios en aire por unidad de actividad en suelo. El uso de dos factores de corrección para la dependencia angular y de energía es el método prevaleciente para la calibración en mediciones *in situ* [3].

Respuesta del detector por unidad de fluencia en función de la energía del rayo gamma

La respuesta del detector por unidad de razón de fluencia de fotones gamma de energía E, que inciden en forma paralela en la cara frontal del detector, puede ser expresada como $\dot{N}_0/\varphi$ (cm^2) donde $\dot{N}_0$ es la razón de conteo del pico de energía total (s^{-1}) el cual se determina en forma empírica y φ es la razón de fluencia (cm^{-2} s^{-1}) de los fotones de energía E, está última dada por

$$\varphi = C(E)p(E)A(4\pi r^2)^{-1} \tag{2}$$

Donde C(E) es un factor numérico que toma en cuenta el efecto de atenuación de la fuente por el aire que se encuentra entre la fuente radiactiva y el detector, p(E) es la probabilidad de emisión de los fotones de energía E por desintegración ($s^{-1}Bq^{-1}$), A es la actividad de la fuente (Bq) y r es

la distancia de la fuente al detector (cm), que se recomienda que sea de 100 ó 200 cm, pero por cuestiones técnicas utilizamos una distancia de 45 cm.

La razón de conteo se determinó para diferentes picos de energía total que cubren sólo una parte del rango de energía de operación del equipo, se usó la fuente de europio-152 descrita en la sección de materiales.

Tabla II. Energías e información requerida para calcular la respuesta del detector por unidad de fluencia $\left(\dot{N}_0/\varphi\right)$

Energía (keV)	Probabilidad de emisión	Coeficiente de atenuación lineal (cm^{-1}) en aire seco a 1 atm. [12]	Factor de atenuación C (E)	Razón de fluencia φ ($cm^{-2}s^{-1}$)	Respuesta del detector por unidad de tiempo (s^{-1})	Respuesta del detector por unidad de fluencia (cm^2)
121.781	0.2853	1.75488E-04	0.9921	0.4148	12.0806	29.12
244.6974	0.0755	1.48868E-04	0.9933	0.1099	2.2365	20.35
344.2785	0.2659	1.3464E-04	0.9939	0.3873	6.2846	16.23
411.116	0.02237	1.26309E-04	0.9943	0.0326	0.4813	14.76
443.956	0.03125	1.22536E-04	0.9945	0.0455	0.5558	12.20
688.67	0.00856	1.00144E-04	0.9955	0.0125	0.1164	9.32
778.9045	0.1293	9.39485E-05	0.9957	0.1887	1.6585	8.79
867.38	0.0423	8.86859E-05	0.9960	0.0617	0.5226	8.47
964.057	0.1451	8.36981E-05	0.9962	0.2118	1.5690	7.41
1085.837	0.1011	7.83398E-05	0.9964	0.1476	0.9958	6.75
1112.076	0.1367	7.73001E-05	0.9965	0.1996	1.3560	6.79
1212.948	0.01415	7.36268E-05	0.9966	0.0207	0.1401	6.78

La respuesta por unidad de fluencia se graficó en función de la energía y se realizó una regresión utilizando una función potencial con la cual se interpolaron los valores de la respuesta por unidad de fluencia para las energías recomendadas por Fernando de la Torre [13] que están dentro del rango de energías de la determinación experimental y que corresponden a emisores gamma naturales.

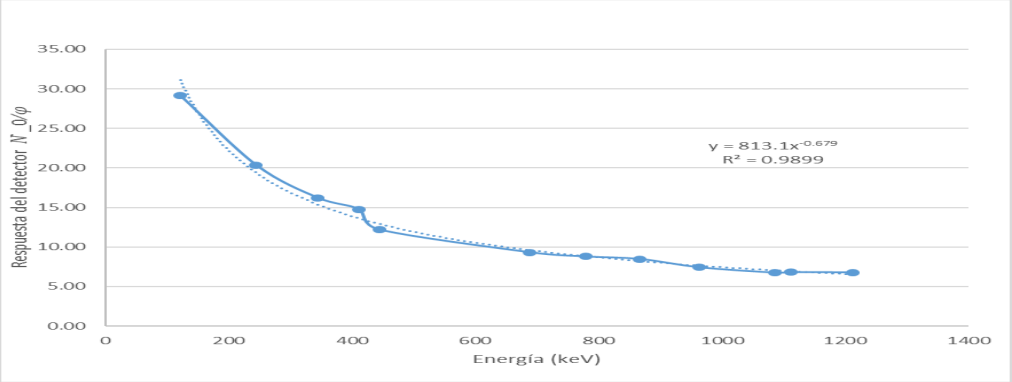


Figura 12. Respuesta del detector por unidad de fluencia en función de la energía de los fotones gamma y regresión de los datos a una función potencial

Tabla III. Respuesta por unidad de fluencia interpolada para las energías dentro del rango de estudio de los emisores naturales

Serie radiactiva	Radionúclido	Energía (keV)	Respuesta por unidad de fluencia interpolada $\left(\dot{N}_0/\varphi\right)$ (cm^2)
U-238	Pb-214	295.39	17.09
U-238	Pb-214	351.95	15.17
Th-232	Tl-208	583.33	10.77
U-238	Bi-214	609.61	10.45
Th-232	Tl-208	860.69	8.27
Th-232	Ac-228	911.42	7.95
Th-232	Ac-228	969.08	7.63

Factor de corrección angular de la respuesta del detector

Este factor toma en cuenta que la fluencia de los fotones emitidos por una fuente extendida no es normal a la cara del detector, que tiene una distribución en un rango determinado de ángulos. Este factor es dependiente de las características del detector y de la geometría de la fuente. Se calcula como el promedio ponderado de la respuesta normalizada de los picos de energía total entre la razón de fluencia de fotones en función del ángulo, $\frac{\dot{N}(\theta)}{\dot{N}_0}$, que es la respuesta angular, sobre la distribución de la razón de fluencia en cos θ, $\varphi_{\cos\theta}$

$$\frac{\dot{N}}{\dot{N}_0} = \frac{1}{\varphi}\int_{\cos\theta_1}^{\cos\theta_2} \varphi_{\cos\theta}\,\frac{\dot{N}(\theta)}{\dot{N}_0}\,d\cos\theta \qquad (3)$$

Los límites de integración de esta ecuación para la geometría de medición usada son 0° y 90°.

Distribución de los radionúclidos en el suelo

Para muchas aplicaciones de la espectrometría gamma *in situ*, una buena aproximación de la distribución de la muestra es la de un espacio semi infinito con una concentración homogénea de la fuente en el plano horizontal y que sólo varía con la profundidad del suelo. En la práctica un espacio semi infinito puede ser una gran área de suelo abierto (de un radio que puede ser de 10 a 70 m) donde existen pocas obstrucciones (naturales o antropogénicas). Para radionúclidos naturales (series del uranio, del torio y el potasio-40) se asume una concentración uniforme respecto a la profundidad [6] (que equivale a una distribución exponencial con masa de relajación por unidad de área infinita).

La distribución polar de la razón de fluencia de los fotones primarios en aire, de una fuente distribuida en un suelo está dada por:

$$\varphi_{\cos\theta} = \frac{p(E)}{2} A_{\alpha} \left[\frac{1}{\cos\theta + \beta\mu_s'/\rho}\right] exp\left(-\mu_a' h/\cos\theta\right) \quad (4)$$

Donde p(E) es la probabilidad de emisión ($s^{-1}Bq^{-1}$) de fotones con energía E por desintegración de la fuente, $-\mu_a'$ es el coeficiente de atenuación lineal del aire sin dispersión coherente (cm^{-1}), μ_s'es el coeficiente de atenuación lineal del suelo sin dispersión coherente (cm^{-1}), h es la distancia del detector al suelo (cm) y θ es el ángulo entre la normal y el plano del suelo y el elemento de volumen.

La ecuación 3 puede evaluarse numéricamente usando los datos experimentales para $\frac{N(\theta)}{N_0}$ y con los valores calculados de $\varphi_{\cos\theta}$ para las diferentes energías y geometrías de la fuente. Integrando $\varphi_{\cos\theta}$ sobre $\cos\theta$ se obtiene la fluencia total. Si la densidad no depende de la profundidad en el suelo la integración puede hacerse con procedimientos semi analíticos. Estos valores son válidos para los casos más generales de diferente densidad de suelo [6]. Los valores de fluencia primaria en aire, a una altura de 1 metro sobre el suelo por unidad de área para una distribución constante de la fuente radiactiva para el rango de energías de interés se muestran en la tabla IV.

Tabla IV. Fluencia primaria de fotones de una fuente distribuida en forma constante a una distancia de un metro del detector en el rango de energías de interés

Energía (keV)	Fluencia primaria de fotones ($\varphi_{\cos\theta}$)
100	1.72
150	1.77
200	1.82
300	1.9
500	2.01
662	2.05
1000	2.15
1461	2.24

Estos valores se graficaron y se les realizó una regresión logarítmica para obtener los valores de fluencia primaria de las energías de interés.

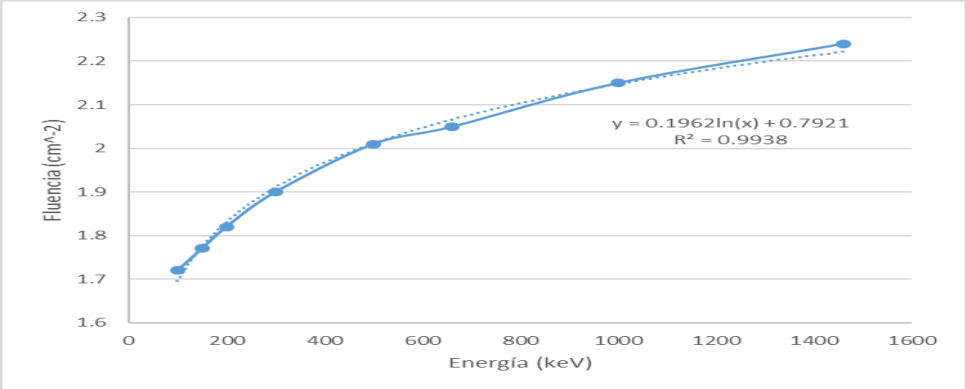


Figura 13. Fluencia de fotones primarios en función de la energía y regresión logarítmica de los datos

Tabla V. Fluencia primaria de fotones de una fuente distribuida en forma constante a una distancia de un metro del detector en el rango de energías de interés

Energía (keV)	Fluencia de fotones primarios $\varphi_{\cos\theta}$ (cm^{-2})
121.781	1.7692
244.6974	1.6694
344.2785	1.6554
411.116	1.5632
443.956	1.6735
688.67	1.6944
778.9045	1.5897
867.38	1.5846
964.057	1.5757
1085.837	1.6691
1112.076	1.5876
1212.948	1.6456
1408.013	1.6075

Factor de corrección angular

La respuesta angular relativa para esas mismas energías que se determinó experimentalmente y se ajustó a una función polinómica para después integrarse, por el método de cuadratura adaptativa [14], de 0° a 90° utilizando el programa MATLAB.

Tabla VI. Factor de corrección angular para las energías del europio-152

Energía (keV)	Factor de corrección angular $\left(\frac{N}{N_0}\right)$
121.781	0.9803
244.6974	1.1209
344.2785	1.1708
411.116	1.2622
443.956	1.1880
688.67	1.2242
778.9045	1.3200
867.38	1.3376
964.057	1.3583
1085.837	1.2962
1112.076	1.3657
1212.948	1.3280
1408.013	1.3776

Los valores de estas integrales y los valores de la fluencia de fotones primarios se usaron para calcular el factor de corrección angular de cada energía ($\frac{N}{N_0}$), la cual se graficó y se realizó regresión logarítmica y por interpolación se calcularon los valores para las energías de interés.

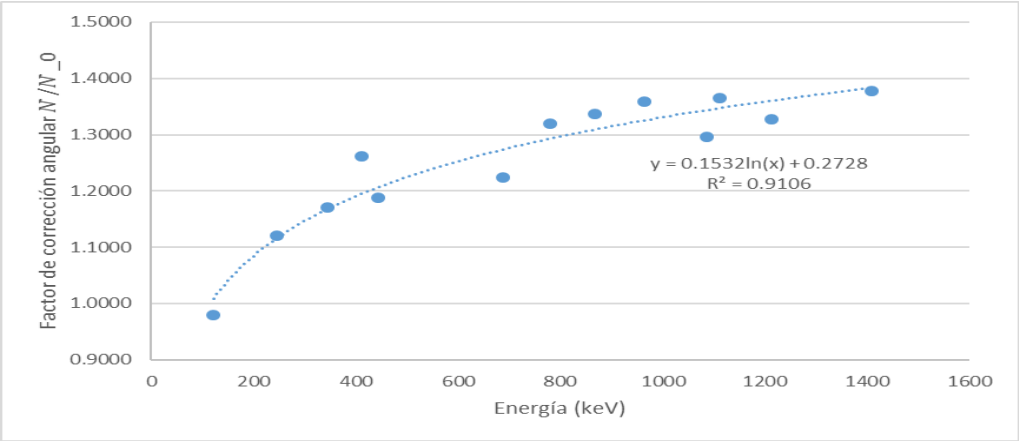


Figura 14. Factor de corrección angular para las energías del europio-152 y ajuste de los datos a una función logarítmica

Tabla VII. Factor de corrección angular para las energías de los emisores gamma naturales, obtenidos por interpolación.

Serie radiactiva	Radionúclido	Energía (keV)	Factor de corrección angular $\left(\frac{N}{N_0}\right)$
U-238	Pb-214	295.39	1.1442

U-238	Pb-214	351.95	1.1711
Th-232	Tl-208	583.33	1.2485
U-238	Bi-214	609.61	1.2552
Th-232	Tl-208	860.69	1.3081
Th-232	Ac-228	911.42	1.3169
Th-232	Ac-228	969.08	1.3263

Fluencia de fotones por unidad de actividad

Para fuentes homogéneas en suelos, la razón de fluencia de fotones a un metro de altura sobre el suelo se obtuvo del ICRU-53 [6]. Los factores de calibración obtenidos con la metodología propuesta se muestran en la tabla VIII.

Tabla VIII. Factores de calibración para mediciones *in situ*

Serie radiactiva	Radionúclido	Energía (keV)	Respuesta por unidad de fluencia interpolada $\dot{N}_0/\varphi$ (cm^2)	Factor de corrección angular $\frac{\dot{N}}{\dot{N}_0}$	Fluencia de fotones por unidad de actividad $\frac{\varphi}{A_m}$ $(cm^{-2}s^{-1}Bq^{-1}g)$
U-238	Pb-214	295.39	17.09	1.1442	0.828
U-238	Pb-214	351.95	15.17	1.1711	1.71
Th-232	Tl-208	583.33	10.77	1.2485	1.76
U-238	Bi-214	609.61	10.45	1.2552	2.75
Th-232	Tl-208	860.69	8.27	1.3081	0.313
Th-232	Ac-228	911.42	7.95	1.3169	2.060
Th-232	Ac-228	969.08	7.63	1.3263	1.282

4. CONCLUSIONES

Se determinaron factores de calibración que permiten convertir el área de los picos de energía total, de los espectros generados por el sistema de detección GeRe-3522 para la técnica *in situ*, en actividad específica de los correspondientes emisores gamma naturales, de acuerdo al ICRU-53. Para esto se determinó la respuesta angular del sistema, incluyendo la respuesta frontal, que es uno de los parámetros que caracterizan la respuesta de este sistema de detección en las mediciones *in situ*, ya que incluye la respuesta cuando la fluencia de rayos gamma no incide normalmente a la cara del detector. Estas mediciones implican la respuesta del detector a otros ángulos de incidencia debido a que en mediciones medioambientales se analizan grandes áreas en lugar de fuentes puntuales. Este parámetro, la respuesta angular, es por sí mismo interesante debido a que cada detector tiene una respuesta particular y específica que describe su comportamiento para cada ángulo de incidencia de los rayos gamma diferentes a la normal.

Aunque el rango de energías para las cuales se determinó la respuesta angular es bastante amplio (de 121.781 keV hasta 1408.013 keV), las energías están concentradas en la parte de baja energía de tal manera que la parte de alta energía queda con poca cobertura. Utilizando otras fuentes radiactivas fácilmente se podría cubrir esta parte de tal manera que se obtenga la respuesta angular para todo el rango de energías comúnmente analizadas por esta técnica.

El método usado para realizar esta calibración es restringido en el sentido de que solo puede ser aplicado a un número limitado de escenarios de medición y puede ser usado para estimar la respuesta a una fuente distribuida exponencialmente en el suelo. Como $\frac{\varphi}{A_s}$ se determina solo en base a valores previamente calculados, este puede usarse solo en situaciones donde las condiciones reales presentes en el sitio se asemejan a los usados para calcular los valores tabulados. Las propiedades del suelo pueden variar significativamente de lugar a lugar dentro de un área de muestreo. Además, el método asume que la fuente tiene una distribución exponencial hasta una profundidad infinita en el suelo. Muchas fuentes no muestran esta distribución en el suelo. La precisión de este método se estima que tiene un 10% de incertidumbre.

REFERENCIAS

1. Santo, A.S.E., F.G. Wasserman, and C.C. Conti, HPGe well detector calibration procedure by MCNP5 Monte Carlo computer code. *Annals of Nuclear Energy,* 2012. **46**: p. 213-217.
2. Boson, J., Improving accuracy of in situ gamma-ray spectrometry, in *Radiofysik*. 2008, Umeå. p. 47.
3. Boson, J., et al., In situ gamma-ray spectrometry for environmental monitoring: A semi empirical calibration method. *Radiation Protection Dosimetry,* 2006. **121**(3): p. 310-316.
4. Boson, J., et al., Improving Calibration of HPGe Detectors for In Situ Measurements – a Comparison of Semi-empirical and Monte Carlo Methods. 2008.
5. Tyler, A.N. and D. Copplestone, Preliminary results from the first national in situ gamma spectrometry survey of the United Kingdom. *Journal of Environmental Radioactivity*, 2007. **96**(1): p. 94-102.
6. Gehrke, R.J., Gamma-ray spectrometry in the environment: ICRU Report 53 (International Commission on Radiation Units and Measurements, *Inc., Washington, DC, USA, 1994). Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 1996. **372**(1–2): p. 333-334.
7. Nir-El, Y. and O. Sima, Angular response of a HPGe detector to gamma-rays in in situ measurements. *Applied Radiation and Isotopes*, 2001. **55**(1): p. 1-7.
8. Beck, H.L., J. DeCampo, and C. Gogolak, In situ Ge(Li) and NaI(Tl) gamma ray spectrometry, U.S.A.E. Commission, Editor. 1972, U.S. Atomic Energy Commission.
9. Jacob, P., et al., Report 53. *Journal of the International Commission on Radiation Units and Measurements*, 1994. **os27**(2): p. NP-NP.
10. UNSCEAR, *SOURCES AND EFFECTS OF IONIZING RADIATION,* United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation, UNSCEAR 2008, Report to the General Assembly., in 2008.

11. Genie-2000, *Genie 2000* Operations Manual. 2001: Camberra Industries.
12. J. H., H. and S. S. M. *NIST:* X-Ray Mass Attenuation Coefficients. 1989,1990,1996 june 30, 2017.
13. De la torre Aguilar, F., Conformación de una secuencia de análisis óptima para espectros de radiación gamma ambiental con el programa Genie 2000, in Unidad Académica de Estudios Nucleares. 2010, Universidad Autónoma de Zacatecas: Zacatecas, Zactecas, México. p. 76.
14. Gander, W. and W. Gautschi, Adaptive Quadrature—*Revisited*. Vol. 40. 2000. 84-101.

Capacidad de Retención de Mo(VI) en Óxidos Metálicos de TiO_2, SiO_2 y TiO_2-SiO_2

Nancy Moreno Gil[1,2], Verónica E. Badillo Almaraz[2], Iris Z. López Malpica[2], Carmen López Reyes[2]

[1]Facultad de Ciencias de la Conducta Universidad Autónoma del Estado de México
Filiberto Gómez S/N, Barrio de Tlacopa, 50010 Toluca de Lerdo, Edo. Mex.
[2]Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carr. México-Toluca S/N, La Marquesa Ocoyoacac, 52750 Edo. Méx.
nancymogil@gmail.com; veronica.badillo@inin.gob.mx

Resumen

En este trabajo de investigación se sintetizaron óxidos metálicos de titanio, silicio y titanio-silicio con distintas concentraciones (50:50 y 75:25) para su utilización como matrices adsorbentes en la preparación de generadores de $^{99}Mo/^{99m}Tc$ vía la producción del ^{99}Mo por activación neutrónica en el reactor Triga Mark III del ININ. La síntesis de los óxidos se llevó a cabo por el método sol-gel usando alcóxidos como precursores, la caracterización de los óxidos resultantes se realizó utilizando diferentes instrumentos analíticos. La superficie específica se determinó por adsorción de N_2 por el método BET (Bruner, Emmet y Teller), el análisis morfológico y el tamaño de las partículas se estudió por Microscopía Electrónica de Barrido (MEB). La capacidad de retención de Mo(VI) en los óxidos se determinó mediante el método de equilibrio de batch utilizando la técnica de trazadores radioactivos y mediante la saturación del sólido con iones MoO_4^{2-}. Los resultados indicaron que el TiO_2 muestra una mejor afinidad por el Mo(VI) y que la introducción de estos materiales en el desarrollo del sistema generador $^{99}Mo/^{99m}Tc$ vía la producción del ^{99}Mo por la ruta de activación neutrónica en el reactor Triga Mark III del ININ es, sin duda, un paso importante en la producción de ^{99m}Tc para utilizarse con fines médicos.

1. INTRODUCCIÓN

Más de 30 millones de estudios en todo el mundo se realizan anualmente utilizando radiofármacos a base tecnecio-99m (^{99m}Tc). En México, el 80 % de los estudios realizados en medicina nuclear requieren ^{99m}Tc. El ^{99m}Tc es el radionúclido más atractivo para la medicina nuclear debido a que posee las características nucleares, físicas y químicas idóneas para la exploración de órganos como el corazón, el cerebro, el hígado y para la detección de tumores que con otras técnicas no sería posible localizar. Tiene una vida media corta (6.02 h), emite un fotón γ de baja energía (140 KeV), no emite partículas β, es fácil de detectar, forma fácilmente complejos con un gran número de moléculas y el hecho de que su vida media física y biológica sean muy cortas, conduce a una eliminación muy rápida del cuerpo, después de un proceso de formación de imágenes [1]. El ^{99m}Tc es el producto hijo del molibdeno-99 (^{99}Mo) el cual puede producirse por irradiación del molibdeno-98 (^{98}Mo) con neutrones o por fisión del uranio-235 (^{235}U) en un reactor nuclear. La aplicación mundial de ^{99m}Tc en los procedimientos de medicina

nuclear es posible debido a la disponibilidad del sistema generador ^{99}Mo/^{99m}Tc. Comercialmente estos generadores están constituidos por un soporte de alúmina, de limitada capacidad de fijación en masa (2-20 mg/g-Mo), donde el ^{99}Mo de elevada actividad específica (~103 TBq/g), obtenido como un producto de fisión, es adsorbido y el ^{99m}Tc generado a partir del decaimiento del ^{99}Mo es eluído con una solución salina. Actualmente existe una creciente preocupación de que el suministro de ^{99m}Tc se vea amenazado por la escasez y el envejecimiento de los reactores nucleares donde se produce ^{99}Mo. Por lo que, es de importancia considerable explorar otras formas de producir el radionúclido padre ^{99}Mo con el propósito de contar con un suministro constante de ^{99m}Tc en forma sencilla, eficiente y a bajo costo y que pueda ser explotado por hospitales o centros de investigación en países cuya infraestructura nuclear es limitada, como es el caso de México. En los últimos años se han propuesto una serie de alternativas para la producción de ^{99}Mo como la reacción inducida por fotones ^{100}Mo (n, γ)^{99}Mo, la foto fisión de ^{238}U en un acelerador lineal o la producción directa de ^{99m}Tc en un ciclotrón. Sin embargo, estos métodos aún no se encuentran disponibles [2]. La activación neutrónica del ^{98}Mo en un reactor nuclear es una de las tecnologías disponibles a corto plazo. En México, el único reactor nuclear disponible para este tipo de aplicaciones se encuentra en el ININ (reactor TRIGA Mark III). Sin embargo, la producción de ^{99}Mo, por esta vía ofrece una actividad específica baja por lo que no puede ser utilizado en los generadores existentes a base de alúmina pues conduce a la producción de ^{99m}Tc con baja concentración radioactiva [3]. Para poder proporcionar esta tecnología de generadores de radionúclidos vía la activación neutrónica, se requiere el desarrollo de nuevos materiales con elevada capacidad de retención del radionúclido padre ^{99}Mo. Los nanomateriales en virtud de las enormes relaciones superficie/volumen, morfología, porosidad, composición química, área superficial, propiedades granulares y características de adsorción en medio acuoso, específicamente en NaCl 0.9% se pueden usar como adsorbentes de alta capacidad para la fabricación de generadores. A través de los años, se han estudiado varios adsorbentes alternativos con alta capacidad de retención del radionúclido padre ^{99}Mo. Tanase y sus colaboradores [4] estudiaron el comportamiento de retención en un adsorbente compuesto de circonio polimérico (PZC) e informaron que la cantidad de molibdeno adsorbido fue de 200 mg/g-PZC. La capacidad de retención de la alúmina fue determinada por Arino y Kramer [5] a varios valores de pH; obtuvieron 20 mg/g-Mo a pH inferior a 4.5 y 2 mg/g-Mo a un pH de 4.5-5. Takahashi [6] estudió el comportamiento de retención de la alúmina a una temperatura de 400°C con ácido clorhídrico diluido reportando un incremento de forma apreciable en su poder de adsorción. Qazi y Mushtaq [7] estudiaron el comportamiento de retención del ion molibdato en un óxido de titanio hidratado a temperatura ambiente (39 mgMo/g) y a alta temperatura (~100°C) (230 mgMo/g) a diferentes valores de pH entre 1 y 3. También se ha reportado el uso dióxido de manganeso hidratado [8], dióxido de titanio hidratado [9], óxido de cerio [10], hidrotalcita [11], hidroxiapatita [12], zirconio tetragonal [13] (t-ZrO_2), polímeros de titanio [14] (TiP) y alúmina monocristalina [15] (γ-Al_2O_3) como matrices adsorbentes en la fabricación de generadores de ^{99}Mo/^{99m}Tc. Sin embargo, los generadores clínicamente útiles aún no se han implementado utilizando las tecnologías anteriores.

El desarrollo de adsorbentes con alta capacidad que adsorban eficientemente el isótopo padre ^{99}Mo y no el isótopo hijo ^{99m}Tc en la preparación de generadores ^{99}Mo/^{99m}Tc sigue siendo un objetivo interesante. Por lo tanto, el propósito de este trabajo de investigación es demostrar el uso potencial de los óxidos metálicos de titanio, silicio y titanio-silicio como adsorbentes alternativos en la preparación de generadores ^{99}Mo/^{99m}Tc a partir de la producción de ^{99}Mo vía la

activación neutrónica ^{98}Mo (n, γ) ^{99}Mo en un reactor nuclear con la finalidad de obtener ^{99m}Tc para utilizarse con fines médicos.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. Síntesis de óxidos de titanio, silicio y titanio-silicio

Los óxidos de titanio (TiO_2), silicio (SiO_2) y titanio-silicio (TiO_2-SiO_2) con distintas proporciones (50:50 y 75:25) se prepararon por el método sol-gel utilizando alcóxidos como precursores como se informó en trabajos anteriores [16]. Para la preparación de TiO_2 y SiO_2 los precursores $Ti(OC_3H_7)_4$ (propóxido de titanio (IV)) y $Si(OC_2H_5)_4$ (tetraetilortosilicato), se hidrolizan primero a 293 K. Para este propósito, se disolvió una cantidad de alcóxido en $CH_3CH_2CH_2OH$ (n-propanol) y se agitó vigorosamente hasta que la solución se volvió homogénea. Luego, se añadió NH_4OH (hidróxido de amonio) y la solución se agitó durante 5 minutos más. Se aumentó la temperatura y después de 10 minutos a la temperatura de reflujo, se añadió agua desionizada gota a gota para completar la hidrólisis y se continuó el reflujo durante 1 hora a 363 K. La mezcla resultante se enfrió a temperatura ambiente. Los geles se envejecieron in situ durante 24 h y el líquido residual se eliminó por decantación. Finalmente los óxidos se obtuvieron una vez que el producto final se calentó en la estufa a 100ºC durante 24 horas. Se usó el mismo protocolo general para preparar los óxidos de TiO_2-SiO_2.

2.2. Caracterización estructural de los óxidos de titanio, silicio y titanio-silicio

La caracterización de los óxidos resultantes se realizó utilizando diferentes instrumentos analíticos. La superficie especifica se determinó por adsorción de N_2 por el método BET (Bruner, Emmet y Teller). El sólido se colocó en un porta muestras de cuarzo y se calentó a 105 ºC para desgasificarlo con un flujo de N_2/He al 30% (30 cc/min) durante 4 horas en un equipo multitareas RIG-100. El análisis morfológico y tamaño de partícula se estudió por Microscopía Electrónica de Barrido (MEB) en un microscopio electrónico de barrido JEOL-JSM 6610LV. La muestras se recubrieron con una capa conductora de oro durante un tiempo de exposición de 100s.

2.3. Producción de ^{99}Mo

El radionúclido padre ^{99}Mo se obtuvo al irradiar la sal de molibdeno natural $(NH_4)_6Mo_7O_{24}.4H_2O$ en una capsula de Al durante 4h con un flujo térmico de neutrones de ~ 1.6 x 10^{12} n·cm^{-2} s^{-1} en el reactor nuclear de investigación Triga Mark III del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares en México. Después de la irradiación el ^{99}Mo se disolvió en agua destilada y de esta disolución se tomó una alícuota para el marcado de las suspensiones. Las soluciones con diferentes concentraciones de Mo(VI) se obtuvieron diluyendo $Na_2MoO_4 \cdot 2H_2O$ en agua destilada.

2.4. Capacidad de retención

La afinidad y la capacidad de retención del molibdeno en los óxidos se determinó utilizando el método de equilibrio de *batch* en función de la concentración creciente de Mo (VI) y del pH de la

solución. Una masa de 0.1 g de los óxidos de titanio (TiO_2), silicio (SiO_2) y titanio-silicio (TiO_2-SiO_2) se colocaron en tubos de policarbonato de 50 mL y se dispersaron por agitación en un volumen de 25 mL de solución salina de NaCl al 0.9%. Posteriormente las suspensiones se sometieron a agitación continua a 8 rpm durante 24 h y una vez al equilibrio, se les agrego volúmenes crecientes de la solución $Na_2MoO_4{\cdot}2H_2O$ para obtener concentraciones de Mo (VI) diferentes en cada tubo hasta la saturación del sólido. El pH de la solución se mantuvo constante. Para el estudio en función del pH de la solución, se prepararon suspensiones a diferentes valores de pH; los valores de pH de las soluciones de trabajo se ajustaron agregando cantidades apropiadas de 1 M HCl y 1M NaOH y se midieron con un electrodo de pH combinado (Orion Co), se sometieron a agitación continua y una vez al equilibrio se marcaron con una solución que contenía el trazador radioactivo ^{99}Mo. Después las suspensiones se pusieron en agitación y las fases sólidas y líquidas se separararon por centrifugación. La actividad gamma de la fase líquida para el molibdeno se determinó utilizando un detector de estado sólido de Germanio Hiper-puro marca Canberra Modelo 7229P, acoplado a un analizador multicanal ACUSPECT-A (8k) midiendo las cuentas a un pico de 181.1 KeV correspondiente a ^{99}Mo en alícuotas de 1 mL. Finalmente, la capacidad de retención de los adsorbentes para el molibdeno se calculó utilizando las siguientes formulas:

$$Capacidad = \frac{\%\ \text{retención}}{100} \cdot C_0 \cdot \frac{V}{m} \tag{1}$$

Donde, la afinidad de los adsorbentes como % retención de molibdeno o coeficiente de distribución, Kd pudo obtenerse haciendo uso de las siguentes ecuaciones:

$$\%\ Mo = \frac{\overline{Mo}}{Mo} = \left(1 - \frac{A_f}{A_i}\right) \times 100 \tag{2}$$

$$Kd = \frac{\overline{Mo}}{Mo} = \left(\frac{A_f}{A_i} - 1\right) \cdot \frac{V}{m} \tag{3}$$

Donde (A_f) es la actividad acuosa al equilibrio, (A_i) es la actividad inicial involucrada, C_0 y C_e representan las concentraciones iniciales y de equilibrio del Mo respectivamente, V el volumen de solución y m la masa (g) del adsorbente.

3. RESULTADOS

3.1. Caracterización estructural de los óxidos de titanio, silicio y titanio-silicio

Para obtener información sobre la estructura de los adsorbentes propuestos en este trabajo de investigación, las muestras se sometieron análisis MEB y BET. Las micrografias MEB Figura 1 mostraron partículas aglomeradas bastante uniformes en tamaño y forma con tendencias morfológicas esféricas. El tamaño de las partículas encontradas varía en tamaño pero tienden a encontrarse en un rango de 0.233-0.717µm. El análisis de la superficie específica de los adsorbentes por el metodo BET mostró claramente que los materiales propuestos en este trabajo de investigación presentan superficies especificas relativamente altas Tabla I, característica particularmente deseable en los materiales utilizados como matrices adsorbentes para la

fabricación de generadores de radionúclidos $^{99}Mo/^{99m}Tc$. Por otra parte, se observó también que la adición de silicio al titanio tiene un efecto positivo sobre la superficie específica pues esta propiedad incremento notablemente en el óxido de titanio-silicio cuya proporción fue 50:50.

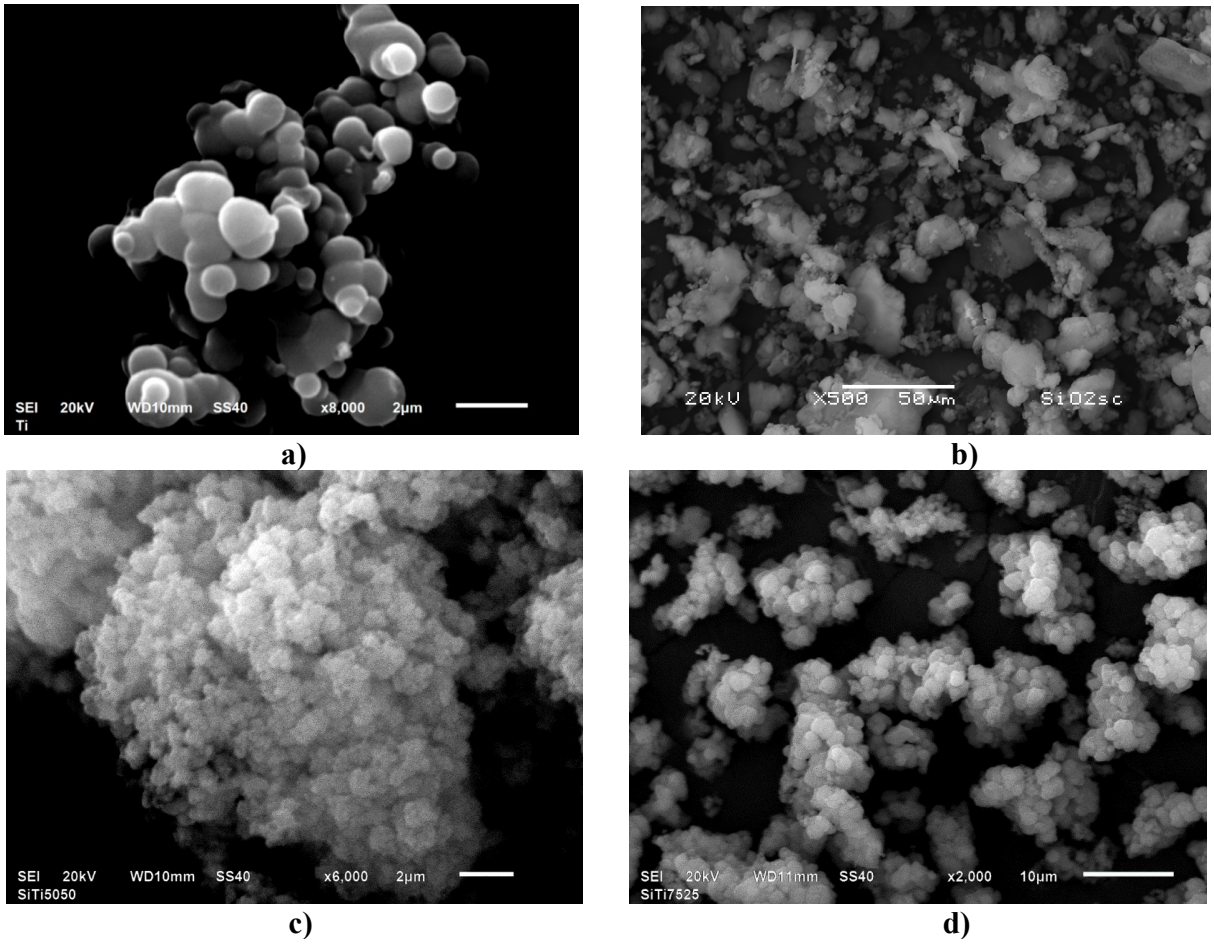


Figura 1. Micrografías MEB a) TiO_2, b) SiO_2, c) TiO_2-SiO_2 y d) TiO_2-SiO_2

Tabla I. Superficies específicas de TiO_2, SiO_2 y TiO_2-SiO_2

Óxidos	Superficie especifica (m^2/g)
TiO_2-SiO_2 (50:50)	812
TiO_2-SiO_2 (75:25)	644
TiO_2	421
SiO_2	151

3.2. Capacidad de retención

Otra característica importante a tomarse encuenta a la hora de evaluar la viabilidad de utilizar los óxidos de TiO_2, SiO_2 y TiO_2-SiO_2 como matrices adsorbentes en la fabricación de generadores de radionúclidos es la capacidad de retención. En las Figuras 2 y 3 se presentan los resultados de los experimentos de determinación de la afinidad y de la capacidad de retención de Mo(VI) en los óxidos de TiO_2-SiO_2 en función de la concentración. Se observa en los óxidos de titanio-silicio con proporción (75:25) una elevada afinidad por el molibdeno ~313 ml/g y una capacidad para retener los iones molibdato ~8 mg/g-Mo mayores a las que presenta el TiO_2-SiO_2 con proporción (50:50). Puede apreciarse también que el contenido de titanio presente en los óxidos juega un papel importante en la capacidad de estos materiales para retener los iones molibdato pues se observó un aumento en este parámetro a medida que se disminuía el contenido de silicio. Puede entonces deducirse que la proporción de TiO_2 presente en la muestra se relación de manera directa con la capacidad de retención y que la presencia del SiO_2 parece inhibir la adsorción de Mo(VI). Pues lo ideal sería que en el óxido con alta superficie especifica TiO_2-SiO_2 proporción 50:50 la capacidad de retención también fuera alta. Por lo tanto, fue necesario realizar un estudio de la capacidad de retención del molibdeno en cada uno de los óxidos que componen al óxido de TiO_2-SiO_2.

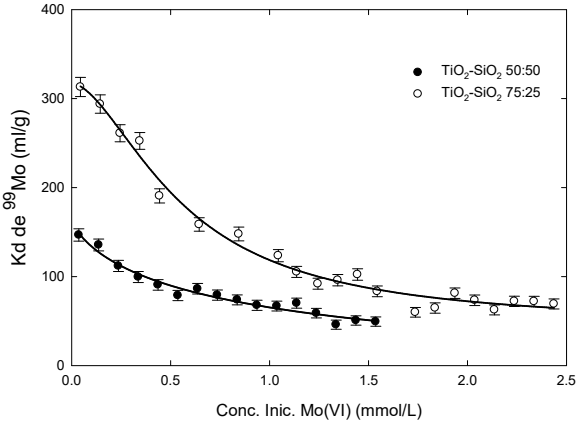


Figura 2. Coeficiente de distribución Kd de ^{99}Mo en función de la concentración para TiO_2-SiO_2

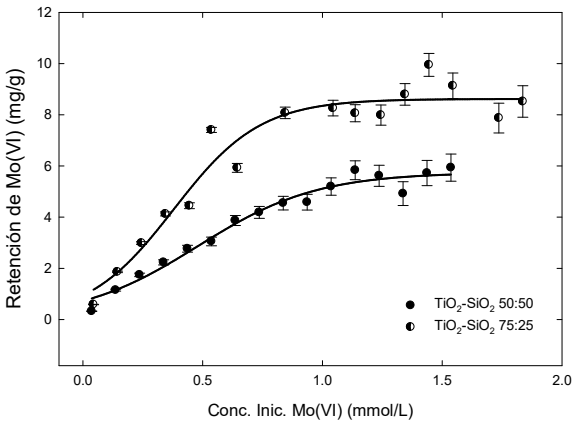


Figura 3. Capacidad de Retención de Mo (VI) en función de la concentración para TiO_2-SiO_2

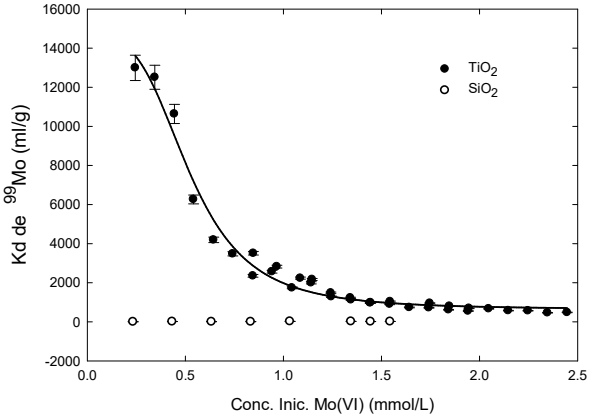


Figura 4. Coeficiente de distribución Kd de ^{99}Mo en función de la concentración para TiO_2 y SiO_2

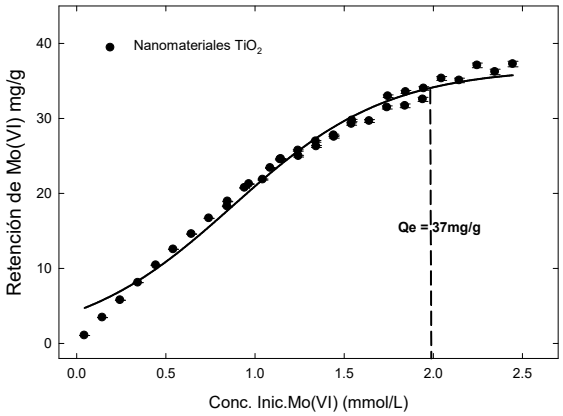


Figura 5. Capacidad de Retención de Mo (VI) en función de la concentración para TiO_2

En las Figuras 4 y 5 se presentan los resultados de los experimentos de determinación de la afinidad y de la capacidad de retención de Mo(VI) en los óxidos de TiO_2 y SiO_2 por separado en función de la concentración. El óxido de titanio presenta una elevada afinidad por el molibdeno ~1400 ml/g y una excelente capacidad para retener los iones molibdato ~37mg/g-Mo. Sin embargo, en lo que respecta, al SiO_2 se obtuvieron valores relativamente bajos lo que se atribuye a la baja superficie especifica que poseen estos óxidos. Puede entonces deducirse que el SiO_2 no es una alternativa para la retención de Mo (VI) en un alto grado.

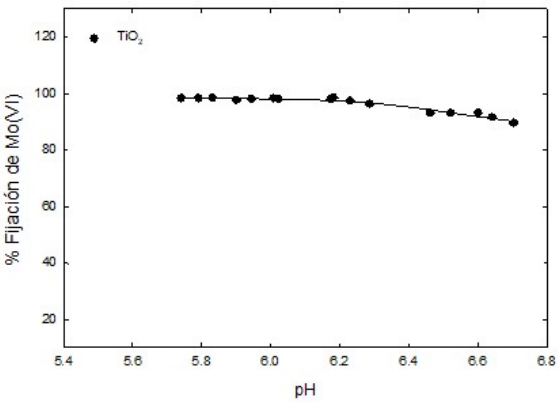


Figura 6. Porcentaje de retención de Mo(VI) en función del pH de la solución para TiO_2

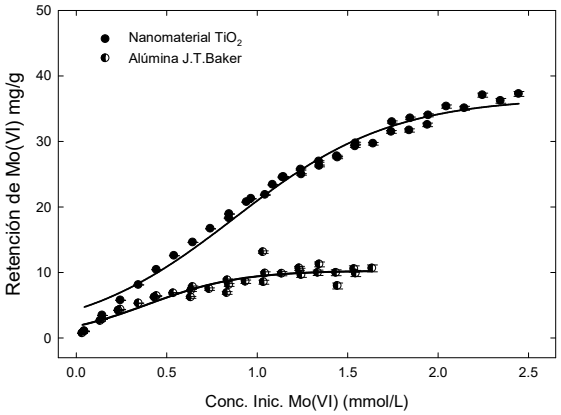


Figura 7. Capacidad de Retención de Mo (VI) en función de la concentración para alúmina y TiO_2

En la Figura 6 se presentan los resultados de la afinidad del Mo(VI) para el TiO_2 en función del pH de la solución. Se observa un porcentaje de retención de Mo(VI) constante a un intervalo de pH de 5.6-6.6 y valores de retención muy superiores, del 99%. Esto indica que no es necesario un tratamiento previo o posterior a la utilización de este nanomaterial ya que el pH de las solución de ^{99}Mo que se encuentra dentro de este intervalo es fisiológicamente aceptable y por lo tanto la administración del radiofármaco ^{99m}Tc no requeriría de una preparación previa o posterior a su uso.

Todos los valores de la capacidad de retención de los óxidos de TiO_2, SiO_2 y TiO_2-SiO_2 obtenidos para el Molibdeno en este trabajo de investigación fueron comparados con los estudios realizados en la alúmina comercial *J.T. Baker* que se muestran en la Figura 7. En los resultados obtenidos se observa que la capacidad de la alúmina para retener los iones molibdatos es de 10 mg/g-Mo, lo que concuerda con la cantidad reportada en la literatura y que es inferior a la cantidad que se obtuvo en este trabajo de investigación para el óxido de TiO_2 de 37mg/g-Mo. Con base a estos resultados experimentales obtenidos podemos concluir que el TiO_2 preparado en este trabajo de investigación posee una superficie específica mejorada, muestra una elevada afinidad por el molibdeno y es mucho mejor adsorbente que los óxidos mixtos TiO_2-SiO_2 y la alúmina. Puesto que los valores de la afinidad y la capacidad de retención que se obtuvieron en este óxido fuerón 3 veces más grandes comparados con los de la alúmina. Por lo tanto, se concluye que los óxidos de titanio son una opción atractiva para la preparación de generadores ^{99}Mo/^{99m}Tc por la ruta de producción del ^{99}Mo vía activación neutrónica en el reactor nuclear Triga Mark III del ININ.

4. CONCLUSIONES

En este trabajo de investigación se demostró que los óxidos metálicos de titanio como adsorbentes alternativos ofrecen capacidades de retención significativamente altas para la preparación de generadores de ^{99}Mo/^{99m}Tc clínicamente útiles. Las investigaciones actuales demuestran que el método sol-gel es adecuado para la preparación de los óxidos propuestos y que la alta superficie específica, la elevada afinidad y la alta capacidad que presentan son atributos poderosos que pueden ser explotados para la preparación de generadores ^{99}Mo/^{99m}Tc con baja actividad específica.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al equipo técnico del Reactor Nuclear Triga Mark III del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (México) y al Laboratorio de Análisis por Activación Neutrónica por su asistencia en la producción y la medición radioquímica del radionúclido padre ^{99}Mo.

REFERENCIAS

1. Mukiza J, Byamukama, Sezirahiga J, Ngbolua KN, Ndebwanimana V. A review on Technetium and Rhenium Based Radiopharmaceuticals for Diagnostic Imaging and Therapeutic Nuclear Medicine. *Rwanda Med J,* **75(1),** p. 14-22.
2. Making Medical Isotopes. Report of the Task Force on Alternatives for Medical Isotope Production. TRIUMF. University of British Columbia, p. 31-56.
3. Guérin B, Tremblay S, Rodrigue S, Rousseau JA, Dumulon V, Lecomte R, et al. Cyclotron Production of 99mTc: An Approach to the Medical Isotope Crisis. *J Nucl Med,* **51(4)**, p. 13N-16N.
4. Tanase M, Tatenuma K, Ishikawa K, Kurosawa K, Nishino M, Hasegawa Y. A ^{99m}Tc generator using a new inorganic polymer adsorbent for (n, γ) ^{99}Mo. *Appl. Radiat. Isot*, **48**, p. 607-611.
5. Arino H, Kramer HH. Fission Product ^{99m}Tc Generator. *Int J Appl Radiat Iso,* **26**, p. 301-303.
6. Takahashi S, Shikata E, Amano H. Studies on Fundamental Properties of Alumina Adsorbent for Radioisotope Production. *J Nucl Sci Technol,* **7**, p. 130-136.
7. Qazi QM, Mushtaq A. Preparation and evaluation of hydrous titanium oxide as a high affinity adsorbent for molybdenum (^{99}Mo) and its potential for use in ^{99m}Tc generators. *Radiochim Acta,* **99**, p. 231-235.
8. Gómez JS, Correa FG. ^{99m}Tc generator with hydrated MnO_2 as adsorbent of ^{99}Mo. J *Radioanal Nucl Chem*, **254**, p. 625–628.
9. Mushtaq A, Mansoor MS, Karim HMA, Khan MA. Hydrated titanium dioxide as an adsorbent for ^{99}Mo/^{99m}Tc generator. *J Radioanal Nucl Chem*, **147(2)**, p. 257–261.
10. Salehi H, Mollarazi E, Abbasi H, Zoghi M. A new ^{99m}Tc generator using cerium (IV) oxide as an adsorbent for ^{99}Mo. *J Phys Theor Chem,* 4(4), p. 245-249.
11. Serrano J, Bertin V, Bulbulian S. ^{99}Mo sorption by thermally treated hydrotalcites. *Langmuir,* **16**, p. 3355–3360.
12. Monroy F, Badillo VE, Flores JA, Cosgrove J, and Knapp FF. Hidroxyapatite based ^{99}Mo-^{99m}Tc and ^{188}W-^{188}Re Generator Systems. *Trends In Radiopharmaceuticals,* **1**, p. 333-347.
13. Chakravarty R, Shukla R, Ram R, Tyagi AK, Dash A, Venkatesh M. Practicality of tetragonal nano-zirconia as a prospective sorbent in the preparation of ^{99}Mo/^{99m}Tc generator for biomedical applications. *Chromatographia,***72**, p. 85–884.
14. Chakravarty R, Shukla R, Gandhi S, Ram R, Dash A, Venkatesh M, Tyagi AK. Polymer embedded nanocrystalline Titania sorbent for ^{99}Mo–^{99m}Tc generator. *J Nanosci Nanotechnol,* **8**, p. 4447–445.
15. Chakravarty R, Ram R, Dash A, Pillai MRA. Preparation of clinical-scale ^{99}Mo/^{99m}Tc column generator using neutron activated low specific activity ^{99}Mo and nanocrystalline γ-Al_2O_3 as column matrix. *Nucl Med Biol,* **39**, p. 916–922.
16. Pérez R, Gómez A, Arenas J, Rojas S, Mariscal R, Fierro JLG, Díaz G. SCR of NO by CH4 on Pt/ZrO2-TiO2 sol-gel catalysts. *Catal. Today*, **149**, p. 107-108.

XXXI Congreso anual de la Sociedad Nuclear Mexicana

28 JUN | 01 JUL 2020

ZACATECAS

30 años de Nucleoelectricidad en México

Convocatoria

La **Sociedad Nuclear Mexicana, A. C.** invita a investigadores y profesionales a presentar trabajos originales en su Congreso Anual, a celebrarse del **28 de junio al 1 de julio de 2020**, en la Ciudad de Zacatecas, Zac.

Tópicos

Física de Reactores Nucleares, Ciclo de Combustible Nuclear y No Proliferación

Transporte y difusión de neutrones, reactividad y su control, criticidad, determinación y/o medición de secciones eficaces, métodos numéricos en la física de reactores, administración de combustible, desechos radiactivos de alto y bajo nivel, reprocesamiento, reactores de investigación, ensambles subcríticos, combustibles MOX, salvaguardias, etc.

Termohidráulica y Seguridad de Reactores Nucleares

Análisis de transitorios, accidentes base de diseño, análisis de accidentes graves, estabilidad de reactores, análisis probabilístico de seguridad, límites térmicos, integridad estructural, análisis termomecánico de elementos combustibles, códigos computacionales, dinámica de fluidos computacional, sistemas activos y pasivos de seguridad, etc.

Operación, Mantenimiento, Materiales, Diseño y Licenciamiento de Centrales Nucleares

Envejecimiento, experiencia operacional, extensión de vida, inspección, seguridad física en instalaciones nucleares de potencia y de investigación, tecnologías nuevas en reactores nucleares, interface hombre-máquina, modularidad en la construcción, nuevos materiales para componentes y estructuras, corrosión, fractura y fatiga en la vasija del reactor o internos, diseños G-III, G-III+ y G-IV, Aspectos de regulación y licenciamiento, etc.

Física, Tecnología y Diseño en Fusión

Fundamentos de fusión nuclear, teoría, modelado y estabilidad de confinamiento magnético, interacción radiación-materia, divertores, limitadores, teoría y experimentos de fusión inercial, ingeniería, integración y diseño de una planta de fusión nuclear, innovación en conceptos de confinamiento, física y tecnología de materiales de fusión, propulsión con plasmas, etc.

Seguridad Radiológica, Aceleradores y Aplicaciones de Radiaciones Ionizantes

Aplicaciones industriales de radiaciones ionizantes y no ionizantes, aplicaciones médicas y en agricultura, instrumentación, reglamentación y normalización de la seguridad y protección radiológica, transporte de material radiactivo, gestión radiológica de desechos radiactivos e impacto radiológico ambiental, aceleradores de partículas y rayos X, tomografía, neutrografía, gammagrafía, espectrometría, resonancia magnética nuclear, química nuclear, etc.

Planificación Energética, Medio Ambiente, Aceptación Pública y Recursos Humanos

Impacto de la energía nuclear en el cambio climático, reducción de CO_2, impacto radiológico ambiental, energía nuclear y medio ambiente, opinión pública, economía nuclear, planeación energética, cierre y desmantelamiento de instalaciones nucleares, métodos para el cálculo de costos nivelados de generación, experiencia en programas de educación y entrenamiento, cultura de la seguridad y gestión del conocimiento nuclear, etc.

Fechas

Recepción de trabajos:
Marzo 15

Notificación de la decisión sobre el trabajo enviado:
Abril 12

Recepción de trabajos corregidos, en su caso:
Mayo 01

Notificación del dictamen final:
Mayo 17

Recepción de trabajos finales:
Mayo 24

Programa Técnico

Sonia Azucena Saucedo Anaya
Jorge Viais Juárez
Javier Ortiz Villafuerte

Más información

Registro, hotel, sede y fechas.
Instrucciones para los autores y formato oficial del evento para la presentación de trabajos:

congresossnm.org.mx

SNM
Sociedad Nuclear Mexicana