

# **Estudio de la funcionalización de secciones eficaces nodales en multigrupos para cálculos 3D neutrónicos-termohidráulicos de núcleos PWR**

Santiago Sánchez-Cervera<sup>1</sup>, César Hueso, José J. Herrero,  
Nuria García Herranz y Carolina Ahnert  
Departamento de Ingeniería Nuclear, Universidad Politécnica de Madrid  
José Gutiérrez Abascal nº2, 28006, Madrid. España

## **RESUMEN**

La tendencia más extendida actualmente para el análisis tridimensional de núcleos PWR se basa en la utilización de códigos de difusión en multigrupos. Uno de ellos es el código COBAYA3, desarrollado en el Departamento de Ingeniería Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid.

Estos códigos emplean como datos de entrada librerías de parámetros equivalentes homogeneizados (secciones eficaces y factores de discontinuidad), que dependen, entre otros, de las variables locales en el reactor (temperatura del combustible, temperatura del moderador, densidad del moderador y concentración de boro). Típicamente, esos parámetros se pre-generan para cada tipo de elemento con un código de transporte determinista.

Una librería tabulada con las secciones eficaces pre-generadas para todas las posibles combinaciones de las condiciones de operación del reactor conduce a requisitos elevados de almacenamiento. Para evitar este inconveniente se ha desarrollado un modelo que represente las secciones eficaces en función de las variables operacionales, de manera que, almacenando las dependencias con dichas variables, se pueden reproducir valores precisos de las secciones eficaces en los cálculos posteriores de difusión, en función de las condiciones reales de los elementos combustibles en el núcleo.

En esta ponencia se recoge todo el trabajo desarrollado para estudiar estas dependencias de los parámetros nodales con las variables locales. Tras especificar el espacio paramétrico de operación, se obtienen las constantes homogeneizadas mediante cálculos con el código de transporte determinista NEWT del sistema de códigos SCALE. A continuación, se estudia con el programa estadístico R su comportamiento y dependencia con las variables locales; y mediante técnicas de mínimos cuadrados se proponen diferentes polinomios de ajuste. Asimismo se estudian diferencias y similitudes con la funcionalización requerida a nivel de barra de combustible (trabajo que será presentado en otra ponencia) y el efecto de la condensación en diferentes números de grupos de energía.

Para evaluar esta librería parametrizada se realizan cálculos nodales con el código de difusión 3D COBAYA3 y se comparan los resultados con los obtenidos cuando se emplea una librería tabulada.

---

<sup>1</sup> [s.sanchezcervera@gmail.com](mailto:s.sanchezcervera@gmail.com)

## 1. INTRODUCCIÓN

El análisis neutrónico tridimensional de los reactores de agua a presión es fundamental para conocer de forma realista las distribuciones de potencia, valores de las barras, márgenes de parada, etc. Llevar a cabo cálculos de transporte del núcleo heterogéneo 3D permitiría determinar con precisión la distribución del flujo neutrónico, para lo cual podría recurrirse a códigos de Monte Carlo o a códigos deterministas. Sin embargo, la problemática para abordar el acoplamiento neutrónico/termo-hidráulico en los primeros, y el ingente tiempo de cálculo y requisitos computacionales de los segundos, hacen que sigan sin aplicarse actualmente métodos basados en la teoría del transporte neutrónico al cálculo 3D de núcleo completo, si bien es cierto que se están realizando importantes esfuerzos en los últimos años en esta línea.

La aproximación estándar sigue constituyendo en consecuencia la tendencia más habitual para análisis de núcleos de agua ligera y consta de dos etapas diferenciadas. En la primera, se emplea un código de transporte o código de *lattice* en multigrupos para realizar cálculos de celda o elemento aislado en dos dimensionales espaciales, y así obtener adecuados parámetros homogeneizados y condensados en pocos grupos de energía. La segunda etapa consiste en un cálculo 3D del núcleo completo mediante un código de difusión. Si la homogeneización se ha realizado en la escala de celda, se habla de códigos *pin-by-pin*, y si se realiza en la escala del elemento combustible, se habla de códigos nodales. En cualquier caso, para el cálculo global del reactor, es necesario pre-generar con el código *lattice* una tabla de parámetros homogeneizados o librería, a las distintas condiciones operativas esperables del reactor. Estas están representadas típicamente por el quemado medio del elemento y las variables locales de operación: temperatura del combustible, temperatura del moderador, densidad del moderador y concentración de boro.

Las librerías más sencillas son las librerías tabuladas, que almacenan los parámetros nodales para cada combinación de las variables de operación. En el posterior cálculo global del núcleo, el código interpolará entre los valores almacenados en la librería en función de las condiciones locales reales en cada nodo. Este tipo de librerías requieren almacenar un gran número de puntos, con todas las posibles combinaciones de las variables de estado para mantener una precisión adecuada, conduciendo a requisitos de almacenamiento elevados.

La idea de utilizar librerías parametrizadas es clásica en Física de Reactores y ya ha sido objeto de estudios en nuestro grupo previamente (1), por el ahorro de memoria y la flexibilidad adicional que presentan respecto a las tabuladas. El desarrollo de este tipo de librerías se ha retomado en el proyecto europeo NURISP (Nuclear Reactor Integrated Simulation Project) del 7º Programa Marco (2), con el objetivo de disponer de metodologías *best-estimate* para análisis de reactores basadas en códigos neutrónicos de difusión -con la correspondiente necesidad de generación de sus bases de datos-acoplados con códigos termohidráulicos.

En esta ponencia se presenta una metodología para la generación de librerías nodales parametrizadas con las variables locales. Este desarrollo responde a la necesidad de disponer de librerías que: *i*) cubran todo el espacio paramétrico de condiciones locales de operación, incluyendo transitorios; *ii*) combinen una buena precisión con requisitos computacionales aceptables para aplicaciones en la industria; *iii*) tengan flexibilidad

para incluir otros efectos aparte de las variables locales de operación.

Para los cálculos de transporte, se ha empleado el código determinista NEWT de SCALE (3) y para los cálculos nodales de difusión, el código ANDES implementado en COBAYA3 (4) (5).

## 2. DEFINICIÓN DEL ESPACIO PARAMÉTRICO Y CONFIGURACIONES GEOMÉTRICAS

En primer lugar es necesario definir para qué rango de condiciones de operación del reactor y para qué geometría de elemento combustible se desea generar la librería de secciones eficaces. En este trabajo, se han tomado las especificaciones correspondientes a informes del proyecto NURISP (6). Los valores de las variables locales o *data-points* se indican en la Tabla I. La geometría del elemento combustible considerado está representada en la Figura 1; está integrado por tres tipos diferentes de celdas, una celda de  $UO_2$  con 4.2 % de enriquecimiento, tubos guía y celdas IFBA, ubicadas en zonas que pueden tener gradientes de flujo acusados al principio del quemado, como las esquinas o las inmediaciones de los tubos guía.

Tabla I. Rangos de variación de las variables locales

| Variable                 | Densidad<br>( $g/cm^3$ ) | Conc. Boro<br>(ppm) | Temp. Moderador<br>(K) | Temp. Combustible<br>(K) |
|--------------------------|--------------------------|---------------------|------------------------|--------------------------|
| Valores de las variables | 0.400                    | 0                   | 525                    | 525                      |
|                          | 0.490                    | 500                 | 550                    | 600                      |
|                          | 0.580                    | 1000                | 580                    | 700                      |
|                          | 0.670                    | 1500                | 600                    | 800                      |
|                          | 0.760                    | 2000                | 617                    | 900                      |
|                          | 0.850                    | 2500                | --                     | 1000                     |
|                          | --                       | --                  | --                     | 1100                     |

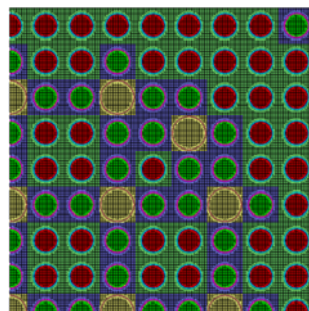


Figura 1. Representación de  $\frac{1}{4}$  del elemento combustible o nodo considerado

Con estas especificaciones, se crean los archivos de entrada para el código de transporte utilizado, el código determinista NEWT de SCALE6.0, y se llevan a cabo los cálculos para cada una de las combinaciones de variables de la Tabla I, empleando la librería ENDF/B-5 en 44 grupos de energía adecuada para LWR. Mediante un procedimiento denominado código de pre-proceso se ha automatizado la generación de *inputs* y la ejecución del código.

### 3. ESTUDIO DE LAS SECCIONES EFICACES HOMOGENEIZADAS

El código de transporte suministra los parámetros equivalentes (secciones eficaces y factores de discontinuidad) homogeneizados para el elemento combustible y condensados en pocos grupos de energía (2, 4 y 8). El siguiente paso consiste en estudiar con el programa estadístico R (7) la dependencia de cada parámetro con las variables de operación, para proponer un polinomio que lo aproxime. Para ello, se utilizan técnicas de mínimos cuadrados, que minimizan las diferencias entre el valor calculado por NEWT y el reproducido por el polinomio.

La metodología para elaborar los polinomios de ajuste se compone de varios pasos. En primer lugar, se realiza una representación gráfica de cada sección eficaz con respecto a cada una de las 4 variables de operación. A continuación se realiza un ajuste individual de la sección eficaz con cada variable, estudiando el tipo de dependencia. Posteriormente, se llevan a cabo los ajustes múltiples, es decir, con más de una variable. En estos casos hay que prestar especial atención a la posible presencia de los llamados efectos cruzados, que se producen cuando una variable varía por el hecho de que otra variable se modifique. Un ejemplo típico se produce entre la densidad del moderador y la concentración de boro: al modificarse la densidad del agua manteniendo el nivel de ppm de boro, se produce una concentración o dilución implícita que también afecta a los parámetros homogeneizados. Finalmente, se propone el polinomio que mejor aproxima cada sección eficaz y factor de discontinuidad.

Al llevar a cabo la parametrización se ha comprobado que:

- Las variables más influyentes en todas las secciones eficaces y en todos los grupos de energía son la densidad del moderador y la concentración de boro, en ese orden. Además el comportamiento respecto a la primera es de tipo cuadrático.
- En los grupos rápidos, las secciones eficaces son prácticamente independientes de la temperatura del moderador; mientras que en los grupos térmicos sí existe una dependencia respecto a la temperatura del moderador y no frente a la del combustible.
- Las secciones eficaces de dispersión dependen casi exclusivamente de la densidad del moderador. Además la tendencia suele ser casi siempre lineal. Este comportamiento tiene una excepción en las secciones eficaces de *up-scattering*, o dispersión de neutrones desde el grupo térmico al rápido. Éstas dependen en primer lugar de la temperatura del moderador, ya que a mayor energía cinética media de las moléculas del medio (mayor temperatura), más probabilidad tendrá un neutrón térmico de ganar energía en una colisión con un núcleo del medio y pasar a ser rápido.

Las Figuras 2, 3, 4 y 5 recogen las anteriores tendencias.

En la Figura 2.a se representa la sección eficaz de absorción del grupo 2 en dos grupos (es decir, el térmico) frente a la densidad del moderador para diferentes concentraciones de boro. Se puede comprobar que el comportamiento frente a la densidad es de tipo parabólico y cómo al aumentar la concentración de boro aumenta la sección eficaz de

absorción, al tratarse de un fuerte absorbente neutrónico. En la Figura 2.b se representa la misma sección eficaz pero del grupo rápido para diferentes temperaturas de combustible, observándose cómo la diferencia entre los valores es menor que en el caso anterior, lo que indica una menor influencia de la  $T_{\text{fuel}}$  que la concentración de boro sobre la absorción. Además se corrobora el efecto Doppler, ya que se observa que al aumentar la temperatura aumentan las absorciones.

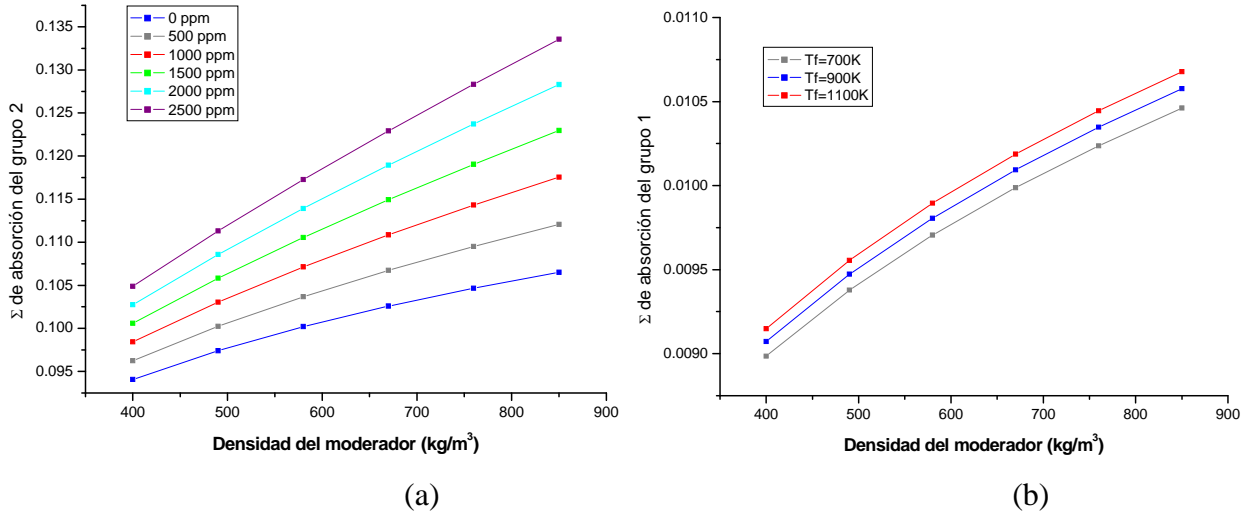


Figura 2. Sección eficaz de absorción térmica vs. densidad del moderador para distintas concentraciones de boro (a) y distintas temperaturas de combustible (b)

La Figura 3 representa la sección eficaz de absorción y la de fisión, ambas para el grupo rápido, frente a la densidad del moderador y para diferentes valores de  $T_{\text{mod}}$ . Se observa un solape entre las diferentes curvas, que indica el efecto despreciable de esta variable.

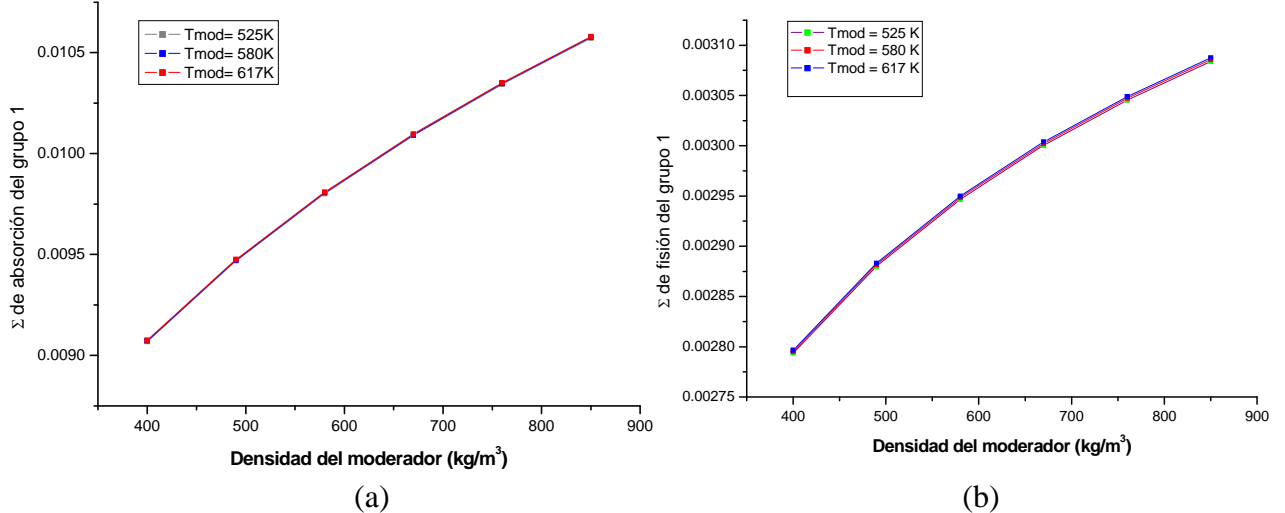


Figura 3. Secciones eficaces de absorción (a) y de fisión (b) rápidas vs. densidad del moderador para distintas temperaturas del moderador

En la Figura 4 se representa la sección eficaz de fisión del grupo térmico frente a la densidad de moderador para diferentes valores de la  $T_{\text{fuel}}$  y de la  $T_{\text{mod}}$ . Se puede comprobar cómo en este caso las líneas solapadas se corresponden con las de diferente valor de  $T_{\text{fuel}}$  mientras que con la  $T_{\text{mod}}$  sí se observa una tendencia de la sección eficaz a aumentar al disminuir la temperatura.

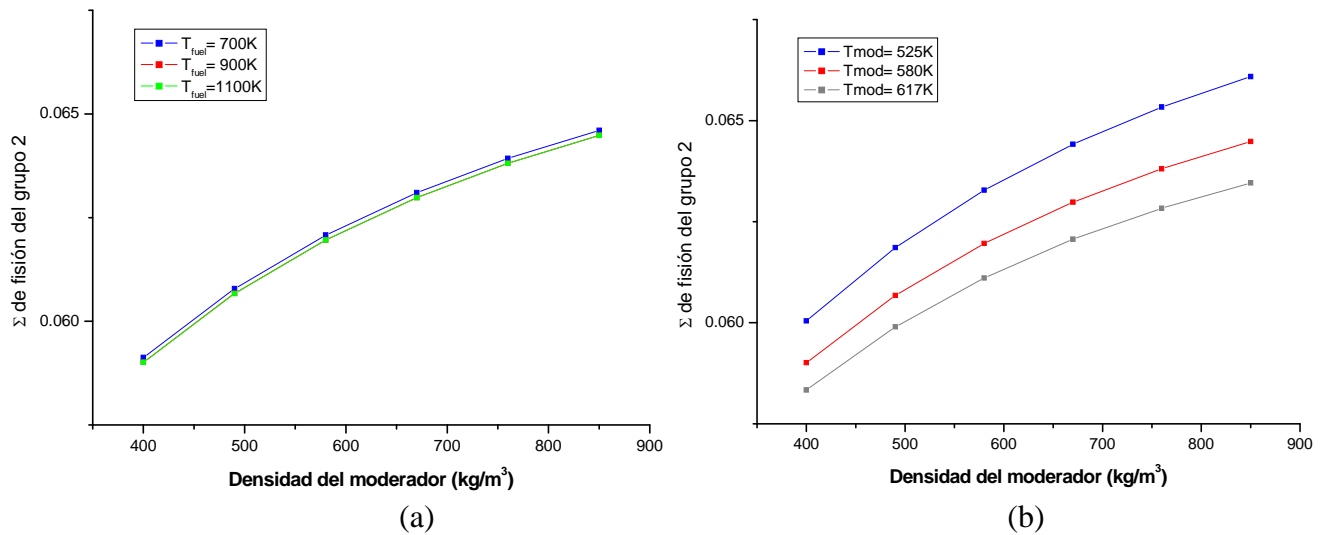


Figura 4. Sección eficaz de fisión rápida vs. densidad del moderador para distintas temperaturas del combustible (a) y del moderador (b)

Por último, en la Figura 5 se representan secciones eficaces de dispersión. En la primera de ellas se muestra la dependencia casi lineal con la densidad del moderador y la prácticamente independencia con la concentración de boro. La Fig. 5.b. muestra la gran influencia de la variable  $T_{mod}$  en la sección eficaz de dispersión de *up-scattering*.

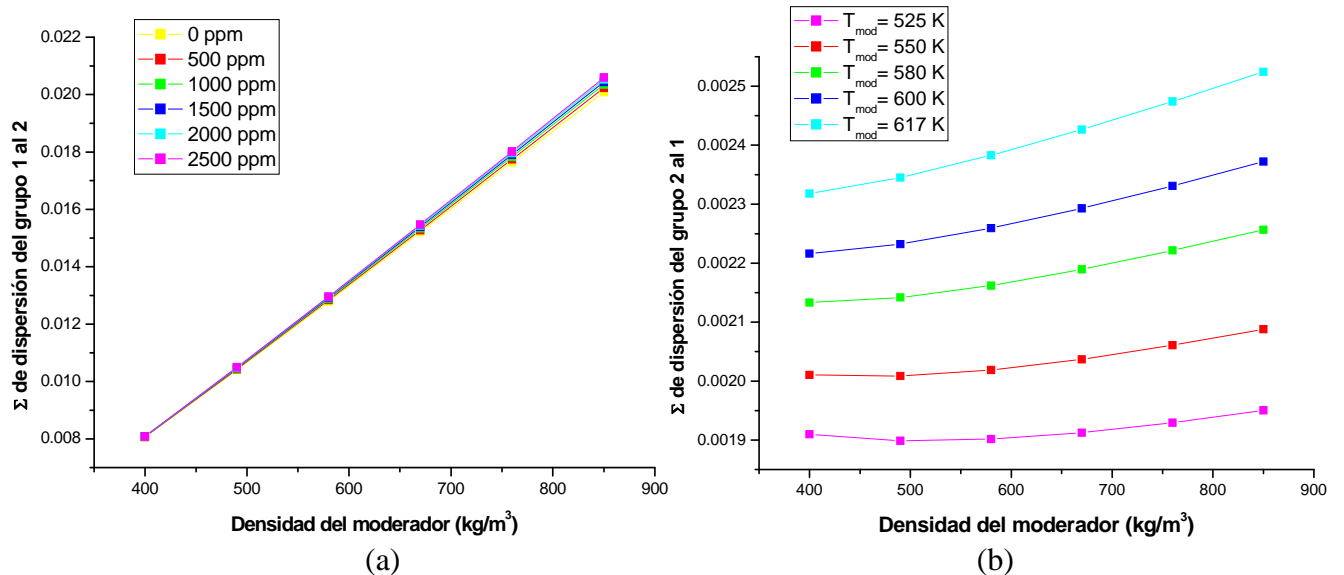


Figura 5. Secciones eficaces de dispersión del grupo rápido al térmico (a) y del térmico al rápido (b) vs. densidad del moderador para distintas concentraciones de boro y temperaturas del moderador

#### 4. VALIDACIÓN MEDIANTE CÁLCULOS NODALES

Una vez determinados los polinomios de ajuste de las secciones eficaces y factores de discontinuidad, se dispone de una librería parametrizada. La mejor manera de valorar la funcionalización obtenida es utilizar dicha librería en cálculos de difusión y comparar los resultados con los obtenidos cuando se utiliza una librería tabulada. Para ello se implementa la lectura de ambas librerías en el código de difusión COBAYA3.

Se realizarán cálculos 3D de elemento combustible en red regular infinita. Se realiza una división axial en 34 nodos. Para obtener el perfil axial de variables como la

temperatura, densidad, potencia, etc. Y se requiere un acoplamiento entre el código neutrónico COBAYA3 y un código termo-hidráulico, en este caso el código COBRA-TF (8). En el caso de emplear la librería tabulada, cuando las variables locales adquieran valores distintos de los recogidos en la tabla el programa realizará una interpolación lineal entre los valores más próximos.

Haciendo uso de la plataforma SALOME (9) desarrollada en el proyecto del 6º Programa Marco NURESIM (10), se pueden obtener representaciones gráficas de los perfiles de las variables, como las mostradas en la Figura 6. Así por ejemplo, se muestra el perfil de potencia –casi simétrico con su máximo bajo la zona central-, y el de temperatura del moderador –que va aumentando a medida que asciende el refrigerante y evacúa el calor generado en el combustible-.

En la Tabla II se comparan los resultados obtenidos en términos de reactividad ( $k$ -eff) cuando se emplean los dos tipos diferentes de librerías, la tabulada y la parametrizada. Los cálculos se han realizado en dos y ocho grupos de energía. Una consecuencia inmediata que se desprende de los valores de la tabla es que los resultados son mejores cuanto mayor es el número de grupos de energía en los que se realiza el cálculo nodal. Otros resultados correspondientes a distintas combinaciones de variables locales se muestran en la Tabla III para ocho grupos de energía.

En general, se comprueba las pequeñas diferencias entre el uso de ambos tipos de librería, en torno a las decenas de pcm en  $k$ -eff.

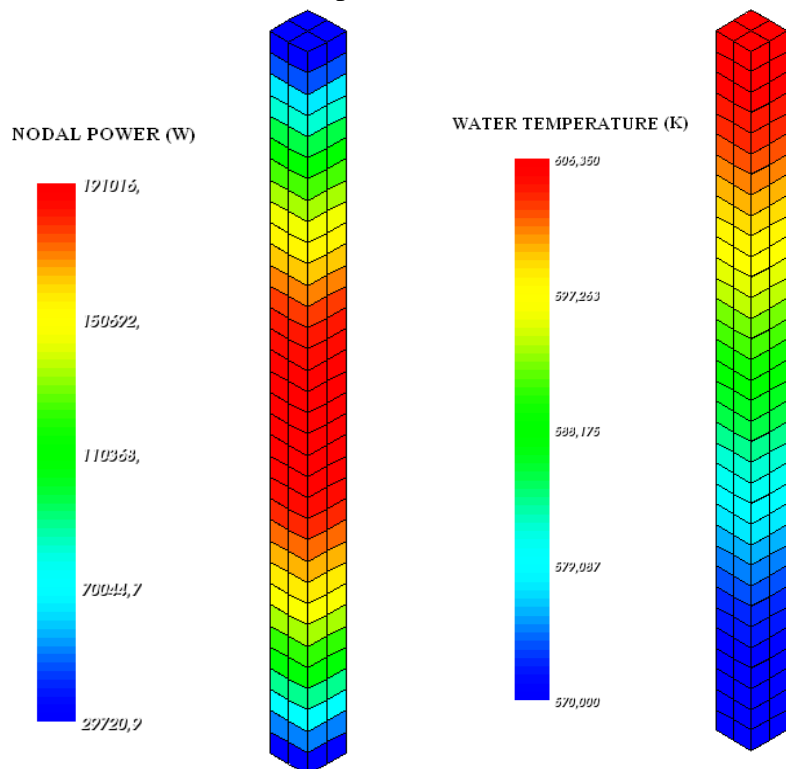


Figura 6. Perfiles axiales de potencia y temperatura del agua para un cálculo 3D de elemento

Tabla II. Reactividad obtenida con librerías tabuladas y parametrizadas

| Condiciones entrada<br>$T_{\text{fuel}}-T_{\text{mod}}-C_B-\rho$ | Nº de grupos | k (tabulada) | k (param) | $\Delta k$ (pcm) |
|--|--------------|--------------|-----------|------------------|
| 840-540-2010-770   | 2            | 1.0497       | 1.0512    | 152.4            |
|  | 8            | 1.0496       | 1.0498    | 13.506           |
| 1100-525-100-530   | 2            | 1.1357       | 1.1356    | -64.37           |
|  | 8            | 1.1352       | 1.1353    | 12.822           |
| 810-543-2300-821   | 2            | 1.0286       | 1.0298    | 118.5            |
|  | 8            | 1.0285       | 1.0284    | -4.888           |

Tabla III. Diferencias de reactividad entre la librería tabulada y parametrizada

| Condiciones entrada<br>$T_{\text{fuel}}-T_{\text{mod}}-C_B-\rho$ | k (tabulada) | k (param) | $\Delta k$ (pcm) |
|--|--------------|-----------|------------------|
| 870-531-750-590  | 1.1593       | 1.1591    | -18.833          |
| 937-555-600-700  | 1.1710       | 1.1708    | -19.595          |
| 820-553-1125-711   | 1.1233       | 1.1232    | -11.84           |
| 720-570-5-495  | 1.2247       | 1.2247    | -0.88            |
| 770-540-1930-783   | 1.0559       | 1.0560    | 13.54            |
| 1040-580-1000-590  | 1.1316       | 1.1315    | -8.56            |

## 5. CONCLUSIONES

Se han generado librerías de datos nucleares nodales parametrizadas y validadas mediante su empleo en cálculos nodales de difusión 3D acoplados con la termohidráulica, conviene concluir las ventajas e inconvenientes de este tipo de librerías frente a las tabuladas.

Como ventaja fundamental hay que resaltar que la librería parametrizada ofrece un excelente compromiso entre tamaño y precisión de los resultados obtenidos. La reducción en tamaño es muy significativa, pues en el caso de 8 grupos, mientras la librería tabulada ocupa una memoria de 2.2 MB, la parametrizada tan sólo 25 KB. Esta reducción de tamaño se manifiesta así mismo en tiempo de cálculo, que es ligeramente menor, ofreciendo, sin embargo, resultados muy semejantes. Asimismo, la funcionalización da una flexibilidad adicional a la hora de querer añadir una variable de estudio más o para incluir correcciones para tratar otros efectos (de tipo historia espectral o vecindad).

Como limitaciones hay que destacar que el proceso de generación es bastante más laborioso y largo en el caso de la funcionalización por los motivos obvios que implica el tener que estudiar los ajustes de cada sección eficaz en particular. Además el rango de validez está siendo objeto de un estudio en profundidad ya que para algunos cálculos, especialmente en 2 grupos de energía y con condiciones extremas de concentración de boro disuelta, los resultados obtenidos no son del todo satisfactorios.



## 6. REFERENCIAS

1. **Cabellos, Óscar.** *Efectos generalizados en las secciones eficaces y factores de discontinuidad para análisis avanzado de núcleos de agua a presión.* Universidad Politécnica de Madrid. 1998. Tesis doctoral.
2. **Chauliac, C.** *NUclear Reactor SIMulation Project NURISP. Informe Técnico, EC.* 2009.
3. **DeHart, M.D.** *NEWT: A New Transport Algorithm for Two-Dimensional Discrete Ordinates Analysis in Non-Orthogonal Geometries.* November 2006. Version 5.1 Vol II, Book 4, Sect. F21..
4. **Lozano, J.A., y otros.** The analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry: Development and performance analysis. *Annals of Nuclear Energy.* 2008. 35(12). 2365-2374.
5. **Aragónés, J.M, Ahnert, C. y García-Herranz, N.** *The analytic coarse-mesh finite difference method for multigroup and multidimensional diffusion calculations.* Nuclear Science and Engineering, 2007, Vol. 157(1), págs. 1-15.
6. **García-Herranz, N, Herrero, J.J y Lozano, J.A.** *PWR lattice benchmarking specifications.* Deliverable NURISP Project, January 2010.
7. **R Development Core Team.** *R: A Language and Environment for Statistical Computing.* Vienna, Austria : s.n., 2010. ISBN 3-900051-07-0.
8. **Glück, M.** *Validation of the sub-channel code COBRA-TF.* s.l. : Nuc. Eng. Design, 2008. 238, 2308-2316.
9. **OpenCascade SALOME Development Team, CEA.** [En línea] 2005-2010. <http://www.salomeplatform.org/>.
10. **Cacuci, D.G. et al.** *NURESIM: A European Platform for Nuclear Reactor Simulation. Proceeding of FISA 2006.* 2006.