

## **Descomposición espacial en subdominios para reactores de agua ligera a la escala de la barra de combustible**

Javier Jiménez<sup>a</sup>, José J. Herrero, Juan A. Lozano, Diana Cuervo,  
Nuria García-Herranz, Carolina Ahnert y J. M. Aragonés

*Departamento de Ingeniería Nuclear, Universidad Politécnica de Madrid (UPM)  
C/ José Gutiérrez Abascal, 2; 28006 Madrid*

### **1. INTRODUCCIÓN**

El objetivo de este trabajo es presentar las capacidades que se han desarrollado en el código COBAYA3 en los últimos años. Dichas capacidades incluyen la implementación del acoplamiento multiescala neutrónico-termohidráulico (Jiménez et al., 2007), el desarrollo de la descomposición espacial en subdominios mediante disecciones alternadas y su integración dentro del proyecto Europeo NURESIM (Cacuci et al., 2006).

Los métodos de cálculo utilizados para el análisis tridimensional de núcleo completo de reactores de agua ligera comprenden métodos nodales para neutrónica (Lozano et al., 2008) y de cálculo de canales medios para termohidráulica (Jiménez et al., 2008), acoplándose las ecuaciones a través de la potencia y la realimentación termohidráulica de las secciones eficaces. Además, es posible reconstruir la distribución de potencia detallada de un elemento combustible a partir de una solución nodal, pero no es posible todavía reconstruir el perfil de temperaturas y densidades dentro de cada elemento combustible a partir de la solución de canales.

En este trabajo se propone un método de resolución de la ecuación de difusión en multigrupos corregida por factores de discontinuidad para el cálculo del núcleo completo tridimensional en la escala de barras/subcanales de los elementos combustibles. Acoplada con códigos termohidráulicos de subcanales que permiten obtener una solución detallada de las propiedades termohidráulicas en cada barra del elemento combustible, disminuyendo de esta manera los errores en el cálculo de, por ejemplo, los factores de pico.

La magnitud de un problema de núcleo completo hace que su resolución sea impracticable en tiempos razonables en una estación de trabajo habitual. Por ello, se ha desarrollado una metodología de descomposición en subdominios por disecciones alternadas que permite abordar el cálculo al poder resolver cada subdominio en un procesador distinto simultáneamente. Para mejorar la convergencia del método es necesario acelerarlo con una solución nodal consistente con el cálculo en malla fina.

Esta metodología ha sido implementada en el código COBAYA3 (Herrero et al., 2007) utilizando el algoritmo analítico nodal de resolución de la ecuación de difusión ANDES (Aragonés et al., 2007) (Lozano et al., 2007) para acelerar la convergencia de la solución detallada, y los códigos COBRA-IIIc o COBRA-TF para calcular la termohidráulica del

---

<sup>a</sup> Primer autor, javier.jimenez@upm.es  
Tel: +34 91 336 3108; Fax: +34 91 336 3102

problema. Para asegurar la portabilidad del código fuente, se han utilizado las librerías matemáticas LAPACK y SPARSKIT donde se pueden encontrar varios tipos de métodos de Krylov para solucionar sistemas de matrices dispersas.

En su desarrollo, COBAYA3 ha sido orientado para poder conseguir el mayor grado de paralelización posible en la solución simultánea de los diferentes subdominios en distintos procesadores con una arquitectura de memoria distribuida. La librería de MPI (Message Passing Interface) utilizada para este propósito ha sido OpenMPI.

Además, como parte de las aportaciones realizadas por nuestro grupo investigador al proyecto NURESIM (Cuervo, 2008), COBAYA3 podrá ser utilizado integrado dentro de la plataforma SALOME con la capacidad de realizar cálculos acoplados con los códigos termohidráulicos actualmente incluidos, entre ellos FLICA4. El intercambio de información en la plataforma SALOME se realiza utilizando estructuras MED, un formato estándar en el cual se pueden almacenar tanto geometrías como campos de propiedades tridimensionales.

## 2. EL CÓDIGO COBAYA3

### 2.1 MÉTODO DE DIFUSIÓN POR DIFERENCIAS FINITAS EN MALLA FINA

Las ecuaciones de difusión en multigrupos son discretizadas en malla fina mediante diferencias finitas centradas. Los términos de corrientes entre dos celdas vecinas,  $p$  y  $n$ , se pueden expresar como:

$$J_{p,n}^g = \frac{2 \cdot D_p^g \cdot D_n^g}{D_p^g \cdot h_n \cdot idf_{p \rightarrow n}^g + D_n^g \cdot h_p \cdot idf_{n \rightarrow p}^g} \cdot (idf_{n \rightarrow p}^g \cdot \phi_p^g - idf_{p \rightarrow n}^g \cdot \phi_n^g)$$

El término  $idf$  es el factor de discontinuidad de la interfaz que corrige los efectos de transporte, discretización espacial y heterogeneidad (Aragón et al., 1986). Las corrientes de interfaz en la frontera se pueden expresar como:

$$J_{p,n}^g = \frac{\phi_p^g}{\frac{idf_{p \rightarrow n}^g}{J_{p,n}^g / \phi_{p,n}^g} \pm \frac{h_p}{2 \cdot D_p^g}}$$

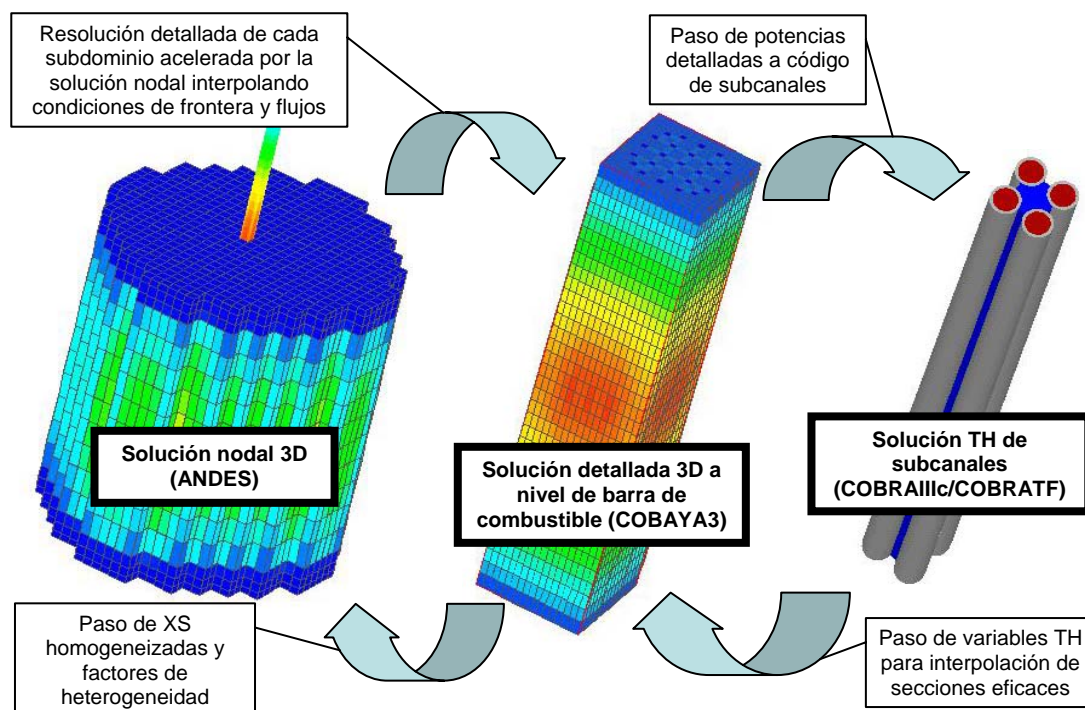
Se observa que la corriente se puede expresar en función del flujo de la celda y la relación corriente a flujo en la frontera, usándose esta última como condición de contorno a la hora de resolver el sistema de ecuaciones. Su principal ventaja es que esta relación es adimensional e independiente del nivel de normalización de la potencia. En general, el sistema lineal de ecuaciones es una matriz heptadiagonal donde la diagonal principal está compuesta por bloques matriciales de dimensiones iguales al número de grupos de energía que se estén utilizando.

En este caso, es necesario utilizar métodos de proyección en subespacios para resolver el sistema. Los métodos seleccionados son GMRES, BICGSTAB con un preconditionador de Jacobi, y GMRES con un preconditionador LU incompleto. La búsqueda iterativa del valor propio  $k$  en la ecuación estacionaria ha sido acelerada con una solución en un grupo de energía que a su vez incluye una aceleración de Wielandt, cuando no se utiliza la aceleración en un grupo se incluye la aceleración de Wielandt en la iteración de multigrupos.

## 2.2 ESQUEMA DE ACOPLAMIENTO EN COBAYA3

El acoplamiento neutrónico-termohidráulico es realizado a ambas escalas, nodal y local (ver Figura 1). Los códigos termohidráulicos empleados para realizar cálculos acoplados en ambas escalas son COBRA-IIIc/MIT-2 y COBRA-TF (versión conjunta con PennState University, EE.UU.). El código de subcanales COBRAIIIc/MIT-2 ha sido extensivamente utilizado en los anteriores acoplamientos desarrollados en la UPM para la simulación de núcleos PWR (Aragónés et al., 2004) (Cuervo et al., 2005); y recientemente el código de subcanales COBRA-TF ha sido introducido como una opción alternativa. Mientras que en COBRAIIIc/MIT-2 la solución de las ecuaciones de conservación en el fluido está basada en el modelo de mezcla homogénea; COBRA-TF modela un fluido bifásico, líquido y vapor, en tres campos, vapor continuo, líquido continuo y, para flujo anular, las gotas de líquido que se desplazan en el interior del núcleo de vapor por el canal (*entrainment*).

Respecto a la solución de las ecuaciones de transmisión de calor, COBRA-TF permite conducción radial, axial y azimutal en el interior de la pastilla de combustible, a diferencia de COBRAIIIc que sólo permite conducción radial. Además, COBRA-TF tiene disponible un modelo dinámico para el cálculo del coeficiente de transmisión de calor en el hueco. Aunque COBRA-TF ofrece un modelo físico más detallado del flujo bifásico, COBRAIIIc es preferible para cálculos monofásicos estacionarios y transitorios debido a que los tiempos de cálculo son bastante inferiores.

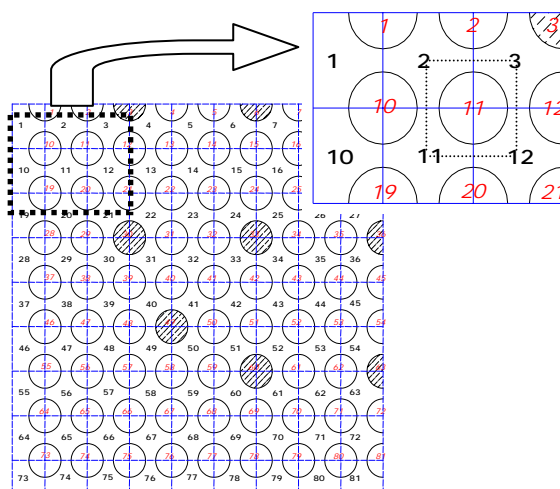


**Figura 1. Acoplamiento multifísica y multiescala en COBAYA3**

Las propiedades en los nodos-canales son consistentemente promediadas a partir de los resultados del cálculo acoplado en malla fina (local), celdas-subcanales. Todo el acoplamiento se realiza a través de estructuras de memoria compartidas entre ambos códigos (conocido como *tight coupling*). Las necesarias transformaciones de malla están incluidas en la parte neutrónica de COBAYA3, la cual requiere datos adicionales a la entrada para poder definir la malla termohidráulica, en caso de ser distinta de la neutrónica.

En la escala nodal, en cuanto a la dirección radial para reactores PWR con geometría cartesiana, el acoplamiento puede ser realizado utilizando 1 ó 4 canales termohidráulicos por

elemento combustible y cualquier número múltiplo de 4 (1, 4, 16, 64, ...) de nodos neutrónicos por elemento combustible. En estos casos, se evita la extrapolación en los campos de propiedades que son intercambiados ya que el acoplamiento se restringe a casos en los que las mallas se superpongan perfectamente.



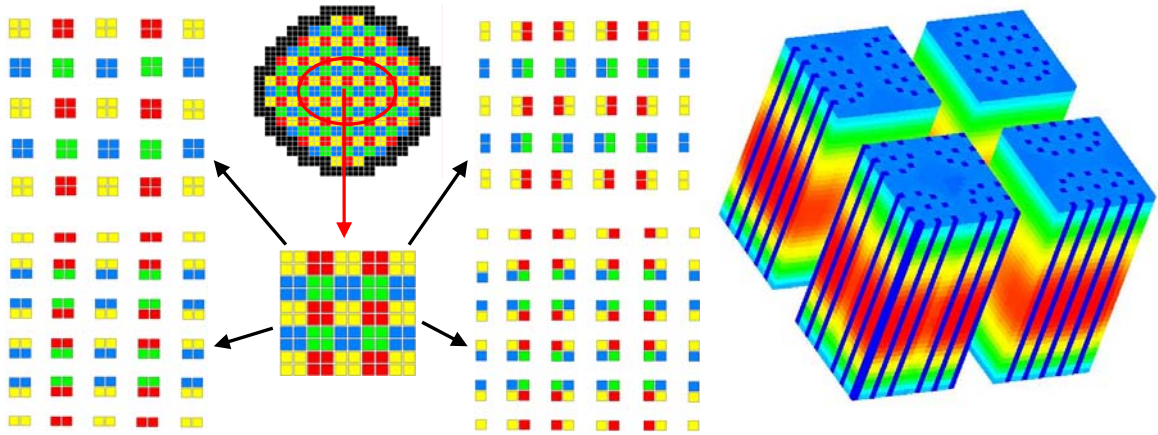
**Figura 2. Discretización del esquema de acoplamiento**

En la escala de celdas/subcanales, los cálculos acoplados comprenden elementos combustibles y configuraciones de *color-set*, empleándose típicamente 324 subcanales radialmente y 38 axialmente en la malla termohidráulica y 289 celdas radiales con 152 niveles axiales para la malla neutrónica, aunque ésta puede refinarse más. En la Figura 2 se puede apreciar la disposición de ambas mallas; cada celda neutróica equivale a una barra de combustible, repartiendo ésta su potencia a los cuatro subcanales vecinos. De manera inversa, la densidad usada para realizar la realimentación de las secciones eficaces es la resultante de promediar las densidades de los cuatro subcanales que mojan una barra combustible.

La forma en la que se ha implementado el acoplamiento ha permitido encapsular tanto las subrutinas de código que realizan la tarea, como las variables que deben ser intercambiadas, además de definir las interfaces a través de las cuales se pueden realizar cálculos acoplados con cualquier otro código termohidráulico. Esta última capacidad se ha desarrollado dentro del subproyecto de Multifísica del proyecto Europeo NURESIM (Zerkak, 2007).

### 3. DESCOMPOSICIÓN EN SUBDOMINIOS MEDIANTE DISECCIONES ALTERNADAS

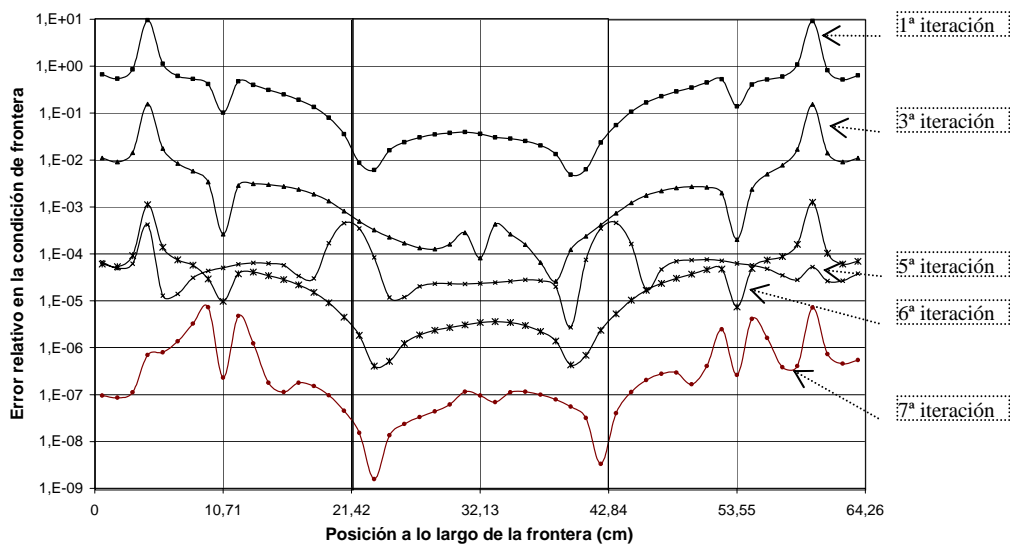
La descomposición en subdominios consiste en la separación de la geometría del núcleo completo en subgeometrías o subdominios formados por cuatro cuartos de elemento combustible en toda su longitud axial. Dichos cuartos pueden combinarse de cuatro maneras distintas, dando lugar a los cuatro tipos de disecciones posibles para una geometría cartesiana, como se puede apreciar en la Figura 3.



**Figura 3. Diferentes tipos de subdominios para cada una de las cuatro posibles disecciones**

Se comienza resolviendo todos los subdominios de un tipo de disección usando las relaciones corriente a flujo y los flujos cruzados de masa y energía como condiciones de contorno. Para cada subdominio, en los planos centrales, se recalculan las relaciones corriente a flujo para la neutrónica, y los términos inyección o sumidero de masa y energía para la termohidráulica, obteniendo valores actualizados que serán utilizados como condiciones de contorno para los subdominios del próximo tipo de disección que se vaya a utilizar.

La convergencia de las condiciones de frontera es muy efectiva en el proceso iterativo. En la Figura 4 se muestra la disminución del error relativo en uno de los planos centrales durante el proceso iterativo para un conjunto de 3 por 3 elementos combustibles. Pueden observarse las oscilaciones en el error en torno a las fronteras de los cuartos de elemento combustible que coinciden con las líneas verticales del gráfico.

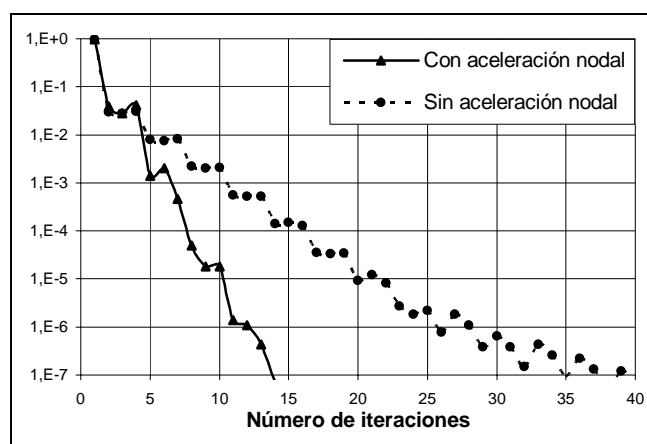


**Figura 4. Comportamiento de la convergencia en el error relativo entre sucesivas disecciones alternadas en un plano de interfaz entre elementos**

Sin embargo, cuando el problema a resolver es dimensionalmente grande comparado con la escala de los subdominios, no es posible reducir los errores de larga longitud de onda de manera efectiva usando solamente el esquema de disecciones alternadas, ya que la actualización de valores se transmite en longitudes del orden de la escala del elemento combustible en cada iteración.

Por este motivo, cada vez que se resuelve un tipo de disección, se calculan valores homogeneizados y coeficientes de heterogeneidad que corrigen el próximo cálculo nodal de núcleo completo utilizando el código ANDES para hacerlo consistente con la solución detallada. La solución nodal se refleja en la siguiente iteración en la malla fina mediante la modificación de las condiciones de contorno y la actualización de la distribución de la fuente de fisión del núcleo.

De esta forma se crea una secuencia en el proceso de solución en la que el cálculo va alternando entre malla fina ( $m$ ) – malla gruesa – malla fina ( $n$ ), donde  $m$  y  $n$  representan dos tipos de particiones diferentes del núcleo de los cuatro tipos de disecciones posibles. Ésto acelera la convergencia del sistema completo al acoplar zonas alejadas del núcleo entre sí en una sola iteración, transportando la información de un lado del núcleo al opuesto de manera más efectiva. En la Figura 5 se aprecia el efecto de incluir una aceleración nodal en el método de disecciones alternadas.



**Figura 5. Aceleración de la convergencia en la distribución de la fuente de fisión de todo el núcleo para una solución a la escala de la barra**

Una de las principales ventajas de esta técnica es que el método de solución puede ser fácilmente paralelizado ya que cada subdominio puede ser resuelto independientemente de la solución del resto de subdominios y el flujo de información puede ser procesado de una forma descentralizada teniendo lugar sólo entre procesadores vecinos, obteniendo de esta manera el mejor rendimiento en equipos con memoria distribuida.

El acoplamiento neutrónico-termohidráulico debe ser realizado entre ambas escalas, nodal y local, y la solución obtenida para el núcleo completo usando canales medios debe ser completamente consistente con la solución en subcanales detallados. Conseguir ésto requiere investigación adicional en los códigos multiescala termohidráulicos, mientras que el problema neutrónico ya ha sido resuelto satisfactoriamente.

## **4. CONCLUSIONES**

Se ha implementado en el código COBAYA3 la formulación en diferencias finitas en malla fina de la ecuación de difusión neutrónica en multigrupos tridimensional para reactores de agua ligera. Para ello, se ha desarrollado una técnica de descomposición en subdominios por disecciones alternadas para cálculos acoplados en la escala de la barra de combustible. Esta técnica permite obtener una gran eficiencia computacional al poder ser utilizada en estaciones con muchos procesadores, que empleen memoria distribuida, para cálculos en paralelo.

Se ha probado que las disecciones alternadas permiten obtener unas tasas de convergencia muy altas en la solución del sistema al ser acelerada de forma muy efectiva si se realiza un rebalance con una solución de difusión analítica en malla gruesa que, en nuestro caso, viene proporcionada por el código ANDES. La solución final del sistema, una vez que las disecciones han convergido, es la que se obtendría si se resolviera todo el problema acoplado de una sola vez.

La aplicación de esta metodología de acoplamiento neutrónico-termohidráulico permitirá realizar análisis detallados a la escala de la barra de combustible o nodales a la escala del elemento combustible, pudiéndose comparar la bondad de las aproximaciones típicamente utilizadas en los cálculos de malla gruesa en reactores de agua ligera, como el uso de canales medios y secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos de energía.

Finalmente, dichos cálculos permitirán reducir las incertidumbres en las magnitudes más importantes desde el punto de vista de la seguridad, como límites de ebullición nucleada o factores de pico.

## **AGRADECIMIENTOS**

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Comisión Europea bajo el sexto programa marco dentro del proyecto integrado NURESIM “European Platform for Nuclear Reactor Simulations”, con número de contrato 516560 (FI6O). El trabajo de los dos primeros autores forma parte del contenido de sus tesis doctorales y ha sido financiado por el Consejo de Seguridad Nuclear con una beca de la cátedra Federico Goded y por el Ministerio de Educación y Ciencia a través del programa FPU con la beca número AP2005-0667.

## REFERENCIAS

- Aragonés J.M., Ahnert C., “Linear-Discontinuous Finite-Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion Calculation”, Nucl. Sci. & Eng., 94, pp. 309-322, 1986.
- Aragonés J.M., Ahnert C., García-Herranz N., Cabellos O., Aragonés-Ahnert V., 2004, “Methods and Results for the MSLB NEA Benchmark using SIMTRAN and RELAP-5”, Nuclear Technology, 146, pp.29-40
- Aragonés J.M., Ahnert C., García-Herranz N., 2007, “The Analytic Coarse-Mesh Finite-Difference Method for Multigroup and Multidimensional Diffusion Calculations”, Nuc. Sci. & Eng., 157, pp. 1-15.
- Cacuci, D.G., Aragonés J.M., Bestion, D., Coddington, P., Dada, L., Chauliac, C., “NURESIM: A European Platform for Nuclear Reactor Simulation”, Proc. FISA 2006, Comisión Europea, Luxemburgo, 13-16 de Marzo, 2006.
- Cuervo D., Ahnert C., Aragonés J.M., 2005, “Analysis of the Influence of Subchannel Effects on the PWR Average Channel Calculation”, in Int. Topical Meeting on Nuclear Thermal-Hydraulics (NURETH-11), Am. Nucl. Soc., Aviñón, p. 396
- Cuervo D., Ahnert C., Aragonés J.M., García-Herranz N., Herrero J.J., Jiménez J. y Lozano J.A., “Participación Española en el desarrollo de la Plataforma Europea para Simulación de Reactores Nucleares (NURESIM)”, Publicado en la revista Nuclear España, 281, 23-26, Enero 2008, Editorial Senda.
- Herrero J.J., Ahnert C., Aragonés J.M., 2007, “3D Whole Core Fine Mesh Multigroup Diffusion calculations by Domain Decomposition through Alternate Dissections”, M&C/SNA-2007, Am. Nucl. Soc. Monterrey. California. EE.UU.
- Jiménez J., Avramova A., Cuervo D., Ivanov K., “Comparative analysis of neutronics /thermal-hydraulics multi-scale coupling for LWR analysis”, PHYSOR-2008, Interlaken, Suiza, 14-19 de Septiembre
- Jiménez J., Cuervo D., Aragonés J.M., 2007 “Multi-scale and Multi-physics coupling in COBAYA3”, NURETH-12, Pittsburg, EE.UU.
- Lozano, J.A., Aragonés, J.M., García-Herranz, N., 2007, “Development and Performance of the Analytic Nodal Diffusion Solver ANDES in Multigroups for 3D Rectangular Geometry”, M&C/SNA-2007, Am. Nucl. Soc. Monterey.
- Lozano J.A., Aragonés J.M., García-Herranz N., “Transient Analysis in the 3D Nodal Kinetics and Thermal-Hydraulics ANDES/COBRA coupled system”, PHYSOR-2008, Interlaken, Suiza, 14-19 de Septiembre
- Zerkak O., Coddington P., Royer E., Jimenez J.et al, 2007, “LWR Multi-physics developments and Applications within the framework of the NURESIM European Project”, M&C/SNA-2007, Am. Nucl. Soc. Monterey.