

Aplicación del código COBAYA3 al análisis multiescala con acoplamiento neutrónico-termohidráulico en reactores PWR

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

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

1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de la tecnología Nuclear ha permitido una visión cada vez más realista de los fenómenos que se producen en un reactor nuclear, y concretamente en los aspectos neutrónicos y termohidráulicos. Para ello es necesario, por un lado, el aumento del refinamiento de las mallas de cálculo utilizadas, que hasta el momento implicaban la homogeneización de grandes regiones del núcleo del reactor y, por otro, la resolución de forma acoplada de las ecuaciones correspondientes.

Como resultado del nivel de desarrollo en los códigos de simulación y en la tecnología disponible, es posible plantear el acoplamiento entre la neutrónica y la termohidráulica en un nivel más profundo y tener en cuenta las heterogeneidades en el elemento combustible tanto radial como axialmente.

En este trabajo se presenta la aplicación del sistema de códigos COBAYA3 al análisis de núcleos de reactores PWR. La metodología de la descomposición en subdominios mediante disecciones alternadas ha sido implementada en dicho sistema de códigos como parte del trabajo realizado por los dos primeros autores en sus Tesis doctorales. La descomposición en subdominios permite abordar el problema del cálculo del núcleo completo en la escala de barras combustibles y subcanales con un sistema de cálculo multiescala. El cálculo del núcleo completo en ese nivel de detalle permite considerar los efectos de la realimentación termohidráulica detallada sobre las secciones eficaces, resultando una mejor estimación de los límites de seguridad locales en las barras de combustible.

La metodología citada en el párrafo anterior ha sido aplicada en el *OECD/NEA MOX Core Transient Benchmark*, Los resultados obtenidos para las distintas configuraciones propuestas prueban la bondad de esta metodología para afrontar este tipo de problemas.

2. EL SISTEMA DE CÓDIGOS COBAYA3

El nuevo sistema de códigos COBAYA3 está basado en los códigos previamente desarrollados por el grupo de Física de Reactores para análisis tridimensionales neutrónicos y termohidráulicos en reactores PWR. El esquema avanzado de cálculo de COBAYA3

comprende los códigos neutrónicos ANDES y COBAYA3k y los códigos termohidráulicos COBRA-IIIc, COBRA-TF y FLICA4. Entre las nuevas metodologías que incluye para el cálculo de reactores, se encuentra la descomposición en subdominios mediante disecciones alternadas para la solución del núcleo completo con un nivel de detalle fijado en la barra combustible.

Durante los últimos años, varias publicaciones fruto del trabajo de investigación desarrollado en el sistema de códigos COBAYA3 pueden encontrarse en la literatura, algunas de ellas como las referencias [4], [11], [12] y [13] se centran en la bondad de los métodos de cálculo neutrónico implementados en los dos códigos ANDES y COBAYA3k así como las técnicas de acoplamiento con códigos termohidráulicos [1] y [9]. A continuación se presenta un resumen de las principales características de los códigos presentes en el sistema COBAYA3.

El código COBAYA3k emplea un método de difusión de diferencias finitas en malla fina y multigrupos [4] para cálculos neutrónicos *pin-by-pin* que obtiene la solución en las celdas de combustible homogeneizadas mediante el uso de factores de discontinuidad en las interfases que tienen en cuenta los efectos de heterogeneidad, transporte y geometría para cada una de las caras de las mismas. Además, COBAYA3k permite utilizar el método de descomposición en subdominios tomando la relación corriente a flujo en cada interfase de los subdominios como condiciones de contorno para conseguir la solución global de todos ellos.

El código ANDES emplea un método nodal analítico en malla gruesa para calcular la distribución tridimensional de la potencia del reactor. El acoplamiento de ANDES con COBRA-IIIc y COBRA-TF [10] ha sido verificado y validado en cálculos estacionarios y transitorios en las Tesis doctorales del primer y tercer autor. Dicho acoplamiento ha sido desarrollado de forma genérica y puede ser utilizado tanto en reactores con geometría Cartesiana como para geometría Triangular. La figura 1 muestra los lazos de iteración que tienen lugar en COBAYA3 para realizar tanto cálculos estacionarios como transitorios independientemente del problema local o de núcleo completo que se esté resolviendo.

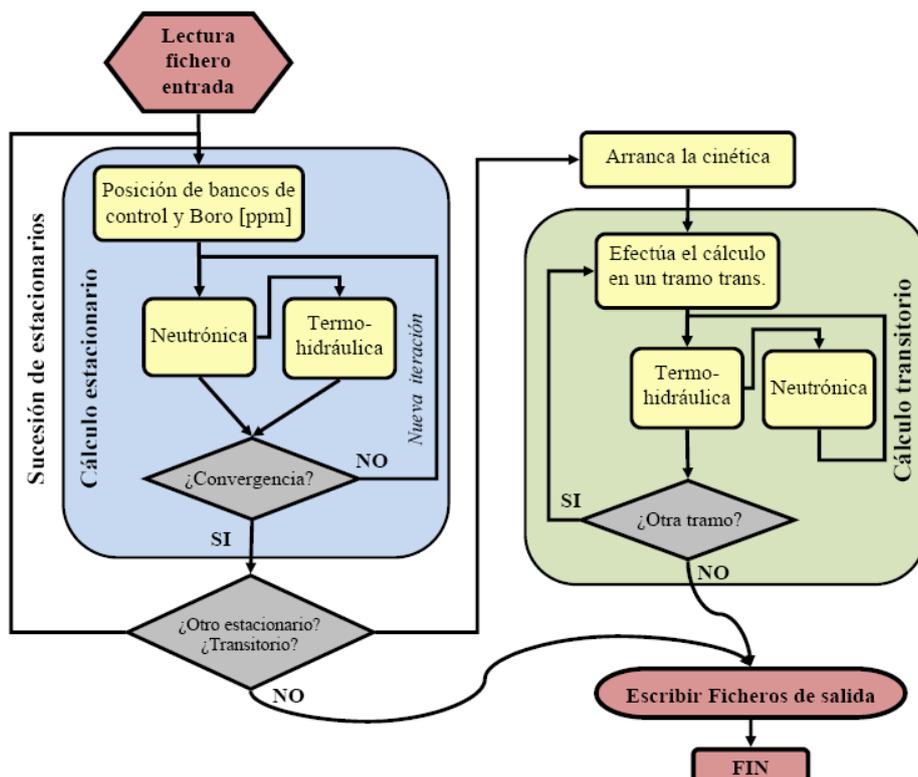


Figura 1. Estructura interna de la secuencia de cálculo en COBAYA3

En cuanto al esquema de acoplamiento elegido en ambas escalas de cálculo (malla gruesa y malla fina), éste es un acoplamiento interno en serie en el que se intercambia toda la información necesaria para poder efectuar la realimentación termohidráulica, es decir, considerar el efecto de las propiedades termohidráulicas en los parámetros neutrónicos. El esquema de acoplamiento temporal se ha implementado utilizando una discretización temporal escalonada “*staggered time discretization*” [2], donde la solución de la cinética neutrónica y de la termohidráulica están intercaladas en el centro de los pasos de tiempo, con una extrapolación exponencial del flujo neutrónico y una extrapolación lineal de las variables de la realimentación termohidráulica, sobre medio paso de tiempo.

2.1. Descomposición en Subdominios mediante Disecciones Alternadas

Como ya ha sido comentado anteriormente, la descomposición en subdominios permite abordar el problema del cálculo del núcleo completo en la escala de barras combustibles y subcanales con un sistema de cálculo multiescala. Explicar en detalle dicha metodología no es el objeto de este artículo ya que ésta ha sido ampliamente descrita en otras referencias, [1], [8] y [11] (para obtener más información sobre los principios en los que se basa, se recomienda al lector acudir a ellas). En este artículo se dan detalles sobre su implementación y sobre las tasas de convergencia.

En la figura 2 se presenta el esquema iterativo implementado en COBAYA3 que permite converger los cálculos acoplados en malla fina. Las iteraciones se realizan en dos etapas, primero se itera hasta convergencia de las disecciones alternadas en cada una de las físicas por separado (lazos internos del diagrama) y segundo, el lazo externo de iteración en el que se actualizan las variables de la realimentación termohidráulica.

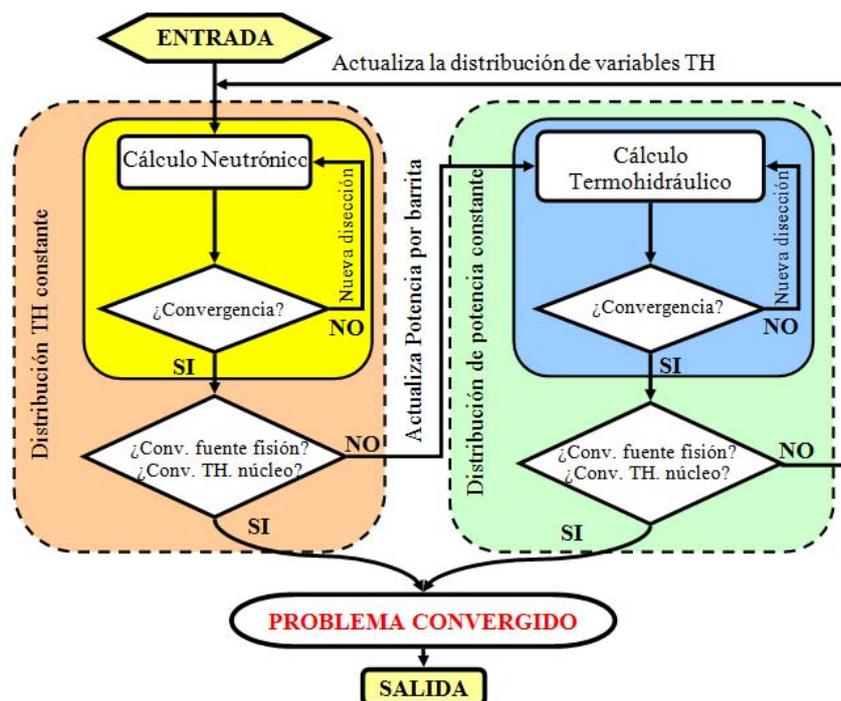


Figura 2. Esquema de iteración en la descomposición en subdominios

En dicho esquema, para la neutrónica se realiza una aceleración nodal intercalada entre cada barrido de la solución en malla fina del problema, así como, la posibilidad de realizar un amortiguamiento en la realimentación de las variables termohidráulicas al transferir que acelera la convergencia del problema disminuyendo las oscilaciones propias del proceso iterativo del problema no lineal. Después de cada solución de núcleo completo neutrónica o

termohidráulica, las nuevas distribuciones obtenidas se comparan con las almacenadas al principio de la iteración. Si la diferencia es suficientemente pequeña en las potencias por barra y las distribuciones de densidades y temperaturas, el problema se considera convergido.

3. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados correspondientes a la aplicación del sistema COBAYA3 a varios de los ejercicios propuestos en *OECD/NEA/USNRC PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark* [5]. Dichos resultados van a ser usados para la verificación de la implementación del acoplamiento de los códigos neutrónicos presentes en COBAYA3 con COBRA-IIIc/MIT-2 y COBRA-TF, tanto para escenarios estacionarios como transitorios en malla Cartesiana.

El *benchmark* consiste en el modelado de un transitorio de expulsión de barra de control en un núcleo parcialmente cargado con combustible de óxidos mixtos (MOX) a partir de un estado estacionario sin potencia (HZP). El ejercicio de la parte 2 corresponde con un cálculo a HFP acoplado cuyos resultados a nivel nodal se presentan en la sección 3.1 mientras que los ejercicios de la parte 3 y 4 corresponden con el estado estacionario previo y el cálculo transitorio respectivamente. El diseño del núcleo se basa en una planta nuclear tipo PWR de Westinghouse con cuatro lazos. Este núcleo tiene una potencia nominal de 3565 MWt y 193 elementos combustibles de UO₂/MOX.

3.1 Resultados a Nivel Nodal/Canales Medios

Los resultados obtenidos en los cálculos de difusión en dos grupos de energía y malla gruesa se comparan en la tabla I con los correspondientes proporcionados por el código PARCS [3] usando cuatro nodos neutrónicos por elemento combustible (4 N/EC) y cambiando el número de canales por elemento en los COBRAs (1 y 4 CH/EC).

Resultados	ANDES				PARCS	SKETCH	NUREC
	COBRA-IIIc		COBRA-TF		-	-	-
	1CH/EC	4CH/EC	1CH/EC	4CH/EC	4CH/EC	1CH/EC	4CH/EC
Boro (ppm)	1685.4	1682.9	1682.3	1680.4	1679.3	1675.4	1683.3
F _{xy}	1.3741	1.3787	1.3782	1.3829	1.3702	1.3557	1.3808
F _z	1.415	1.416	1.416	1.416	1.417	1.4221	1.424
A.O.(%)	-9.62	-9.94	-10.30	-10.41	-10	-12.2	-10.0
T _{Doppler}	562.0	562.4	561.4	561.7	562.8	563.4	554.6
T _{max}	1541.0	1555.8	1538.3	1550.8	-	-	-

Tabla I. Comparación de los resultados para el ejercicio 2 del *benchmark* del MOX en 2 grupos de energía

Todos los casos comparados muestran un buen acuerdo de nuestras soluciones frente a las del resto de participantes, especialmente con la de PARCS. Fijándonos en esta última, las diferencias en la concentración crítica de Boro son inferiores a 3.5 ppm, mientras que el error relativo en el factor de pico radial no superará el 0.06%, que es un error despreciable.

A continuación se analizan los resultados obtenidos en la simulación de un transitorio de expulsión de una barra de control en un núcleo parcialmente cargado con combustible MOX. En el transitorio, el núcleo parte de un estado HZP (10^{-4} % de la potencia nominal) definido en la parte 3 del benchmark. En la tabla II se presenta una comparación de las magnitudes más representativas durante el transitorio mientras que en la figura 3 se muestra la evolución temporal de la potencia y de la temperatura Doppler media.

	ANDES/CIH	ANDES/CTF	PARCS	CORETRAN
Tiempo de pico (sec)	0.34	0.34	0.342	0.330
Potencia de pico (%)	141.7	143.3	142.2	166.2
Máxima reactividad (\$)	1.093	1.093	1.122	1.079
Potencia media (%)	28.1	28.2	27.2	26.5
T_{Dop} (t = 1 s) (°C)	309.1	309.2	308.8	312.7

Tabla II. Comparación de los resultados para el ejercicio 4 del benchmark del MOX

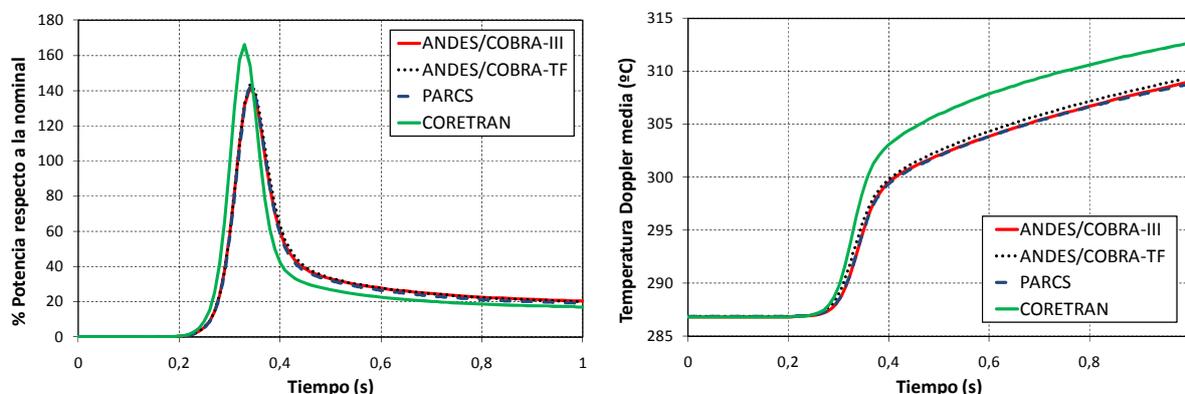


Figura 3. Evolución temporal de la potencia y de la temperatura Doppler media

3.2 Resultados en Malla Fina

En el *benchmark* del MOX además de las secciones eficaces nodales se proporcionan librerías de secciones eficaces homogeneizadas en 8 grupos a nivel de barra pero estas no incluyen factores de discontinuidad de celda (*CDF*) y no se pueden corregir los efectos de heterogeneidad interna, transporte y tamaño de la malla en el cálculo de difusión en malla fina. No obstante estas librerías se han utilizado para hacer los cálculos de núcleo completo y comparar con los resultados de referencia proporcionados en el informe final [6].

Primero, se presenta un cálculo neutrónico detallado del núcleo completo en condiciones de HZP y ARI tal y como se describe en la Parte 3 de las especificaciones del *benchmark*. La tabla III muestra una comparación de algunos parámetros neutrónicos frente a la solución de transporte obtenida con el código DeCART y las soluciones nodales en 8 grupos de energía obtenidas con PARCS y ANDES.

	DeCART	COBAYA3	PARCS 8G	ANDES 8G
Boro Crítico	1265 ppm	1313 ppm	1341 ppm	1343 ppm
PWE (%)	ref	1.17	1.05	1.06
EWE (%)	ref	2.79	3.49	3.44

Tabla III. Errores relativos en la distribución de potencia HZP 3D

Los valores obtenidos con COBAYA3 se encuentran entre ambas aproximaciones (transporte y difusión en malla gruesa) y pudieran haber sido mejores si los factores de discontinuidad en las interfases se hubieran incluido en la librería de secciones eficaces de celda. La tabla IV muestra los resultados correspondientes al cálculo de COBAYA3/COBRA-TF usando la descomposición en subdominios para el ejercicio a HFP del *benchmark* y una comparación frente a las soluciones nodales de ANDES/COBRA-TF y PARCS.

	COBAYA3/CTF	ANDES/CTF 8G	PARCS 8G
Boro Crítico	1655.0 ppm	1672.5 ppm	1672.0 ppm
F_z	1.437	1.422	1.424
F_{xy}	1.3233	1.395	1.384
A.O.(%)	-10.25	-10.30	-9.9
T_{Doppler} (°C)	561.7	561.8	563.0
T_{fuel max} (°C)	1770.4	1572.8	-

Tabla IV. Comparación de los estados estacionarios 3D a HFP del MOX-part2

Hay muy buen acuerdo en los resultados mostrado en la tabla IV donde las desviaciones en k_{eff} son inferiores a 170 pcm. Sin embargo, se puede ver como la temperatura máxima del combustible es casi 200°C mayor en el cálculo acoplado de celdas/subcanales que en la solución en nodos/canales. En la figura 3 se compara la distribución de potencia por elemento combustible obtenida del cálculo en malla fina comparada con la solución proporcionada por ANDES/COBRA-TF. Los mayores errores se encuentran concentrados en la periferia del núcleo donde los gradientes dentro de los elementos combustibles son mayores debido a la presencia del reflector.

Sólo para dar unos números a cerca de los tiempos de cálculo, el cálculo de COBAYA3/COBRA-TF tardó 2 días y 5 horas usando 225 procesadores del supercomputador Magerit, mientras que la solución de ANDES/COBRA-TF tardó 16 minutos aproximadamente. Sin paralelización, el cálculo detallado hubiera tardado 497 días en completarse en la misma estación de trabajo.

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1,120 1,679	1,390 0,85	1,200 0,53	1,370 0,073	1,020 0,431	1,110 0,495	1,100 1,200	0,481 1,019
2	1,390 0,85	1,270 0,803	1,080 0,444	1,200 0,091	1,300 0,0862	0,974 0,267	1,110 0,09	0,571 1,296
3	1,200 0,53	1,080 0,444	1,180 0,576	1,330 0,406	1,210 0,0661	1,190 0,0336	1,100 0,682	0,474 2,152
4	1,370 0,073	1,200 0,091	1,330 0,406	1,060 0,679	1,290 0,100	1,180 0,262	1,000 0,270	0,398 0,703
5	1,020 0,431	1,300 0,0862	1,210 0,0661	1,290 0,100	0,937 0,469	1,120 0,134	0,645 0,124	
6	1,110 0,495	0,974 0,267	1,190 0,0336	1,180 0,262	1,120 0,134	0,843 0,308	0,319 0,0940	
7	1,100 1,200	1,110 0,09	1,100 0,682	1,000 0,270	0,645 0,124	0,319 0,0940		
8	0,481 1,019	0,571 1,296	0,474 2,152	0,398 0,703				

Resultado con CTF+DS

0,1890
1,240

Errores relativos (%) con ANDES/CTF

Figura 3. Error en la distribución de potencia entre COBAYA3/CTF y ANDES/CTF para el caso de HFP 3D

La figura 4 muestra en un corte radial a la altura donde se produce el máximo valor del F_z la temperatura del agua en el cálculo de subcanales del núcleo completo. Adicionalmente la figura 5 muestra la tasa de convergencia de las disecciones alternadas para este problema, viendo que son necesarias 18 iteraciones entre la neutróica y la termohidráulica para alcanzar los criterios de convergencia requeridos. Estos son una convergencia de $1.E-5$ en flujos y corrientes y de $5.E-3$ para las propiedades termohidráulicas.

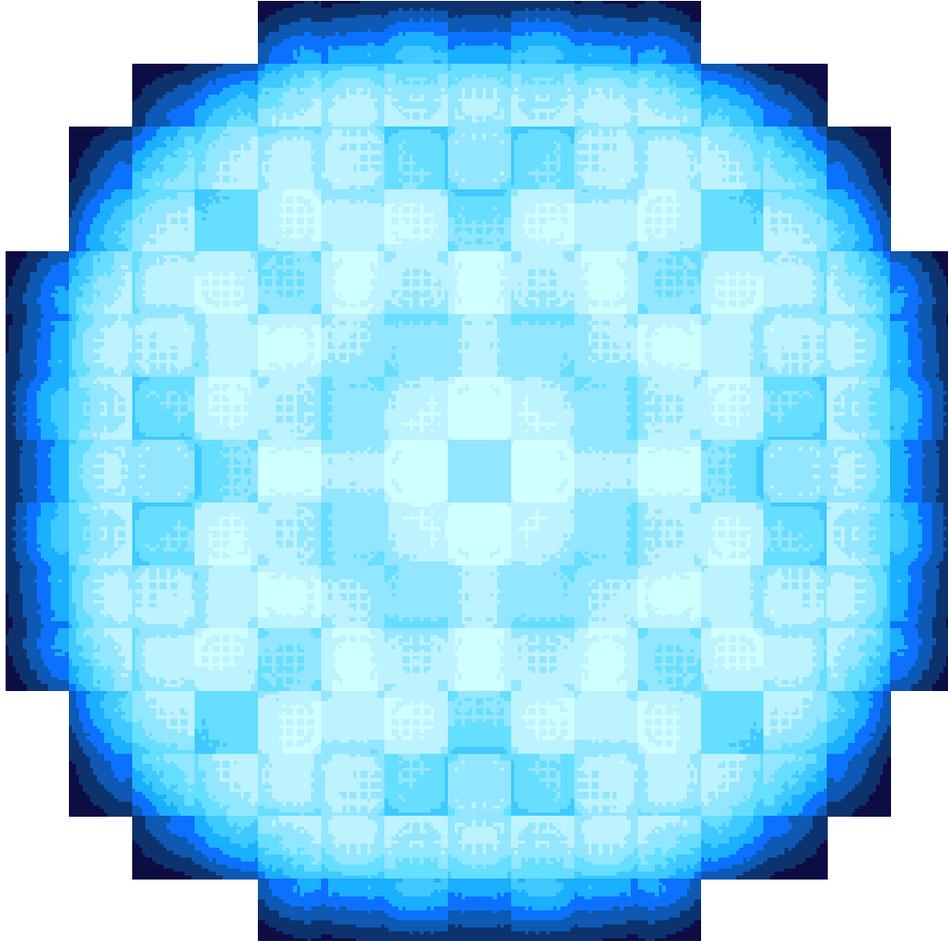


Figura 4. Temperatura del agua en los canales para el caso MOX-HFP 3D

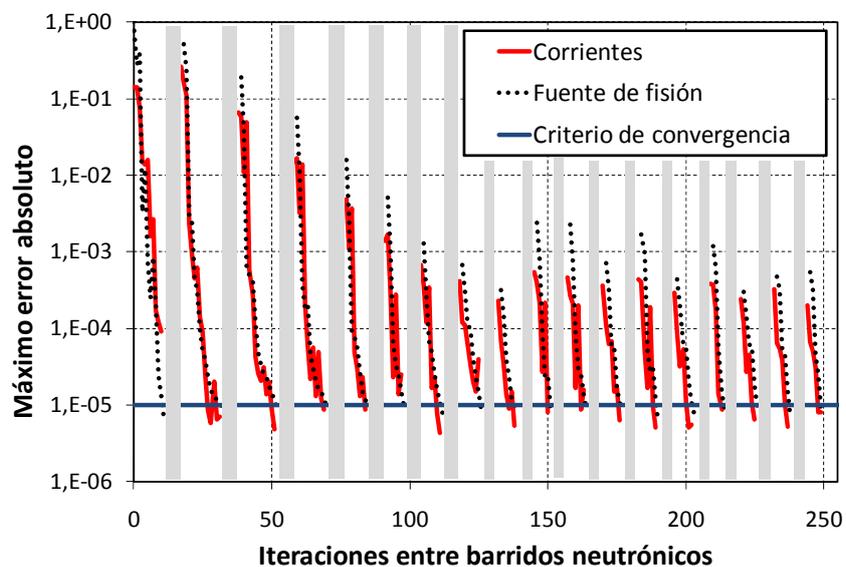


Figura 5. Convergencia de las disecciones alternadas en el cálculo detallado del HFP

4. CONCLUSIONES

A partir de los resultados presentados en el apartado 3 se puede concluir que los desarrollos plasmados en el sistema de códigos COBAYA3 han sido un éxito. Dichos desarrollos forman parte de las Tesis doctorales de los tres primeros autores y han dado lugar a numerosas publicaciones en la literatura como puede apreciarse en la larga lista de referencias.

Durante los últimos 3 años se ha desarrollado e implementado la metodología de la descomposición en subdominios mediante disecciones alternadas para cálculos acoplados en la escala de la barra de combustible así como el acoplamiento neutrónico-termohidráulico entre los códigos que componen el sistema COBAYA3.

La posibilidad de realizar cálculos acoplados en malla fina permitirá 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 y Séptimo programa marco dentro de los proyectos NURESIM y NURISP, con número de contrato 516560 (FI6O) y 232124 (FI7O) respectivamente. El trabajo de los tres 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 Ciencia e Innovación a través del programa FPU con la beca número AP2005-0667.

El autor con agradecimiento reconoce los recursos informáticos, conocimientos técnicos y asistencia proporcionada por el Centro de Supercomputación y Visualización de Madrid (CeSViMa) y la Red Española de Supercomputación.

REFERENCIAS

- [1]. JIMENEZ, J., CUERVO, D. et al. "A Domain Decomposition Methodology for Pin-by-pin Coupled Neutronic and Thermal-hydraulic Analyses in COBAYA3", *Nucl. Eng. Des.* 2010, **240**, pp. 313-320.
- [2]. ARAGONÉS, J.M., AHNERT, C., CABELLOS O. et al, "Methods and Results for the MSLB NEA Benchmark Using SIMTRAN and RELAP-5", *Nuc. Eng. Desing*, 146, 29-40, 2004
- [3]. DOWNAR, T., LEE, D., XU, Y., KOZLOWSKI, T. and STAUDENMIER, J., "PARCS V2.6", U.S. NRC Core Neutronics Simulator Theory Manual (2006)
- [4]. HERRERO, J.J, JIMENEZ, J., et al, "Performance of Whole Core Pin-by-Pin Calculations by Domain Decomposition Through Alternate Dissections in Steady State and Transient Calculations", *M&C2009*.
- [5]. KOZLOWSKI, T. and DOWNAR, T.J. "OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO2 Core Transient Benchmark, Final Specifications, Revision 2", Purdue University, West Lafayette, Indiana USA (2003)
- [6]. KOZLOWSKI, T. and DOWNAR, T.J., "Pressurized Water Reactor MOX/UO2 core transient benchmark. Final Report". NEA/NSC/DOC 20., 2007
- [7]. JIMENEZ, J., HERRERO, J.J, LOZANO, J.A., et al. "Descomposición espacial en subdominios para reactores de agua ligera a la escala de la barra de combustible", 34th Annual meeting of the Spanish Nuclear Society, 2008, Murcia, Spain
- [8]. JIMENEZ, J., CUERVO, D. and ARAGONES, J.M. "A domain decomposition methodology through alternate dissections for coupled neutronic and thermal-hydraulic analyses in COBAYA3", *ENC2010 Transactions*, Barcelona, ISBN 978-92-95064-09-6
- [9]. JIMENEZ, J., AVRAMOVA, M., CUERVO, D. and IVANOV, K., "Comparative Analysis of Neutronics/Thermal-hydraulics Multi-scale Coupling for LWR Analysis", *PHYSOR08*.
- [10]. PAIK, C., HOCHREITER, L.; KELLY, J. and KOHRT, R. "Analysis of the FLECHT-SEASET 163-Rod Blocked Bundle Data Using COBRA-TF", *U.S. NRC*, 1985
- [11]. HERRERO, J.J, AHNERT, C. and ARAGONES, J.M. "Parallelized Domain Decomposition by alternate dissections methodology for PWR core diffusion calculations", *Annals of nuclear Energy*, submitted for publication.
- [12]. LOZANO, J.A., JIMENEZ, J., GARCIA-HERRANZ, N. and ARAGONES, J.M. "Extension of the analytic nodal diffusion solver ANDES to triangular-Z geometry and coupling with COBRA-IIIC for hexagonal core analysis", *Annals of Nuclear Energy*, 37 (2010), pp. 380-388
- [13]. LOZANO, J.A., ARAGONÉS, J.M. and GARCÍA-HERRANZ, N., 2007. Development and performance of the analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry, *Proceedings of Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications*, 15-19 April 2007.