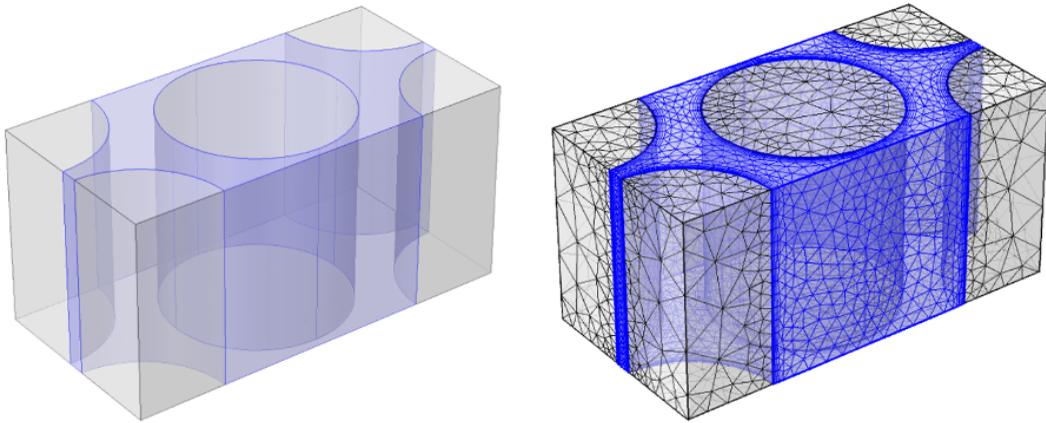


Escalamiento de reactores nucleares

Un enfoque al modelado matemático



Gilberto Espinosa Paredes



OmniaScience

ESCALAMIENTO DE REACTORES NUCLEARES

UN ENFOQUE AL MODELADO MATEMÁTICO

GILBERTO ESPINOSA-PAREDES

ESCALAMIENTO DE REACTORES NUCLEARES. UN ENFOQUE AL MODELADO MATEMÁTICO

Autor:

Gilberto Espinosa-Paredes

Área de Ingeniería en Recursos Energéticos

Universidad Autónoma Metropolitana - Iztapalapa

México

gepe@xanum.uam.mx

El libro fue financiado por CONAHCyT bajo el Proyecto de Ciencia Básica y de Frontera 2023-2024 con referencia CBF-2023-2024-2023.



ISBN: 978-84-128130-6-7

Depósito Legal: B 1785-2025

DOI: <https://doi.org/10.3926/oss.41>

© OmniaScience (Omnia Publisher SL) 2024

© Diseño de cubierta: OmniaScience

© Imagen cubierta: Gilberto Espinosa-Paredes

OmniaScience no se hace responsable de la información contenida en este libro y no aceptará ninguna responsabilidad legal por los errores u omisiones que puedan existir.

ÍNDICE

Prólogo	IX
Capítulo 1. Introducción	1
1.1. Transición energética	1
1.2. Enfoque del escalamiento	2
1.3. Método de escalamiento	2
1.4. Relevancia	4
Capítulo 2. Modelo escalado de transporte de neutrones	9
2.1. Difusión de neutrones en reactores nucleares	9
2.2. Ecuación escalada de difusión de neutrones	13
2.3. Ecuación de las desviaciones espaciales	17
2.4. Modelo escalado de transporte de neutrones	20
2.5. Coeficientes escalados de transporte	22
2.6. Comparación con solución exacta	24
Capítulo 3. Coeficiente de difusión de neutrones dependiente del tiempo	29
3.1. Escalas de tiempo en reactores nucleares	29
3.2. Características del modelo escalado	30
3.3. Desviaciones espaciales dependiente en el tiempo	31
3.4. Problema de los valores límite para los coeficientes de solución	33
3.5. Coeficientes escalados dependientes del tiempo	33
3.6. Correlaciones empíricas	37
3.7. Modelo escalado vs simulación numérica directa	40

Capítulo 4. Coeficiente de difusión de neutrones con partículas desordenadas	43
4.1. Preliminares	43
4.2. Número de partículas TRISO en la celda	45
4.3. Coeficientes de solución de las desviaciones espaciales	47
4.4. Estimación numérica de los coeficientes escalados	50
4.5. Comparación con solución analítica	52
Capítulo 5. Modelo escalado de un SFR	55
5.1. Escalamiento	55
5.2. Descripción del reactor SFR	56
5.3. Formulación matemática local	58
5.4. Método de escalamiento	60
5.5. Escalamiento de las ecuaciones locales	60
5.6. Ecuación de las desviaciones espaciales	65
5.7. Ecuaciones de transporte escaladas	67
Capítulo 6. Coeficientes escalados de transporte de calor de un SRF	71
6.1. Modelo escalado de transferencia de calor	71
6.2. Ecuaciones de las desviaciones de temperaturas	73
6.3. Coeficientes de solución de las desviaciones	75
6.4. Coeficientes escalados de transporte de calor	79
6.5. Comparación con el problema directo	83
Capítulo 7. Acoplamiento escalado de un SFR	89
7.1. Preliminares del reactor SFR	89
7.2. Densidad de potencia	93
7.3. Ecuaciones de gobierno a escala del reactor	97
7.4. Reactividad inherente	101
7.5. Acoplamiento nuclear-termo-fluido	101
Capítulo 8. Simulación escalada del reactor SFR	103
8.1. Implementación	103
8.2. Solución en estado estacionario	104
8.3. Reactividad del sistema de control secundario	107
8.4. Reactividad por barras de control	108
8.5. Flujo neutrónico asimétrico	109
8.6. Análisis a escalas inferiores	110
8.7. Método de reducción de escala	114
8.8. Resolución	117

Capítulo 9. Simulación multifísico y multiescala del reactor CEFR	119
9.1. Reactor CEFR	119
9.2. Características de diseño del reactor CEFR	122
9.3. Modelado neutrónico del reactor CERF	124
9.4. Coeficientes de reactividad	127
9.5. Modelo multifísico y multiescala del reactor CEFR	128
9.6. Acoplamiento multifísico y multiescala del reactor CEFR	129
9.7. Implementación	130
9.8. Simulaciones en estado estacionario	131
9.9. Simulación de un UTOP	132
9.10. Reactividad por barras de control	133
Capítulo 10. Flujo en dos fases en reactores de sales fundidas	137
10.1. Reactores nucleares de sales fundidas	137
10.2. Fenómenos multifísicos y multiescala	138
10.3. Ecuaciones locales de transporte de calor	139
10.4. Modelo escalado de transporte de calor en un reactor MSR	140
10.5. Ecuaciones de las desviaciones espaciales	142
10.6. Solución de las desviaciones espaciales	143
10.7. Coeficientes de solución de las desviaciones	143
10.8. Celda representativa	145
10.9. Ecuaciones escaladas de transporte de energía	152
10.10. Coeficientes escalados de transporte de energía	153
10.11. Comparación de la conductividad térmica	156
10.12. Experimentos numéricos	157
Capítulo 11. Módulo de Young escalado en pastillas de UO_2	161
11.1. Escalas jerárquicas de un reactor nuclear	161
11.2. Análisis de la microestructura	162
11.3. Ecuación gobernante en la microescala	164
11.4. Ecuación gobernante en la macroescala	166
11.5. Ecuaciones de gobierno para las desviaciones espaciales	167
11.6. Ecuación escalada de desplazamiento	169
11.7. Análisis de la microestructura	169
11.8. Dominio computacional	172
11.9. Coeficientes escalados de elasticidad	173
11.10. Módulo de Young escalado	176
11.11. Validación	177
11.12. Correlación empírica	178

Referencias bibliográficas	181
Acrónimos	187
Nomenclatura	189
Autor	193

Dedicado a

Elizabeth JMM

por esas grandes décadas que siguen acumulandose

PRÓLOGO

La representación de los fenómenos nucleares, transferencia de calor en el combustible y refrigerante con alto grado de resolución en tres dimensiones, es un problema aún sin resolver, por los cientos de miles de componentes en combustibles nucleares (*pin*) y sus interacciones con el medio que lo contienen. Equivaldría a resolver el problema directo en cada *pin* que constituyen las ecuaciones diferenciales parciales de los fenómenos de transporte y la retroalimentación con los fenómenos que afectan la población neutrónica. Evidentemente, existen esfuerzos para lograr las mejores aproximaciones con alto grado de resolución que se han denominado *pin to pin* en la literatura, pero con la necesidad de alto poder de cómputo, excluido para aplicaciones en línea, y análisis donde se requiere pronta respuesta. Sin embargo, el efecto de un *pin* en principio debe propagarse desde un punto de vista de interacción a los demás *pines* y lo que existe a través de estos, por lo menos en un ensamble de combustible, en el mejor de casos.

En esta obra se propone un nuevo paradigma escalando el problema directo a la escala del reactor, que puede entenderse, haciendo una analogía con los efectos moleculares con las propiedades de transporte de masa, energía y cantidad de movimiento a la escala del continuo. El proceso de escalamiento del problema directo conlleva coeficientes de transporte representativos a la escala del reactor, y contiene los efectos de la escala del *continuum* a través de las propiedades de transporte. El escalamiento del reactor es un procedimiento matemático riguroso que puede dar lugar a modelos de flujos separados, con coeficientes de transporte escalados obtenidos aplicando formalismos matemáticos que no son directos y su complejidad y desafío es su obtención. El mayor esfuerzo del método de escalamiento es precisamente la obtención de los coeficientes escalados, que requieren un cierto poder de cómputo, pero finalmente los resultados se pueden

representar por correlaciones empíricas que se pueden aplicar directamente en códigos numéricos. El resultado final es un modelo matemático que representa el comportamiento del reactor con buen grado de resolución, y tiempos de ejecución mucho menores que el problema directo *pin to pin*. En muchos casos es importante incrementar la resolución para un análisis más detallado de algún punto del reactor que se pueden revelar a través de los modelos escalados, para ello se propone un método heurístico de reducción de escala, que utiliza información de escalas mayores, a nivel núcleo del reactor o ensamble de combustible.

INTRODUCCIÓN

1.1. Transición energética

Es evidente la grave crisis ambiental en el mundo por la emisión alarmante de gases de efecto invernadero provenientes de la quema de combustibles fósiles del carbón, petróleo y gas, representando el 60% de la generación mundial de electricidad, el mayor contribuyente al cambio climático. Los esfuerzos por incrementar las energías renovables han sido importantes por sus bajas o nulas emisiones de gases de efecto invernadero, pero muy lejos aún para revertir la tendencia ambiental. Las proyecciones del Organismo Internacional de Energía Atómica (OIEA) estiman que el consumo de electricidad se duplicará para 2050. A corto y mediano plazo la transición energética debe contar con sistemas energéticos con altas densidades de potencia prácticamente sin interrupciones con altos factores de carga, y sin emisiones de gases que afecten el medio ambiente.

Los sistemas energéticos que cumplen estrictamente son los reactores nucleares y las nuevas tecnologías de cierta generación, entre otros diseños innovadores presentan avances en materia de seguridad, economía y escalabilidad y pueden

llegar a operar hasta 80 años o más, garantizando una gran amortización a la inversión y sobre todo durante su operación para la generación de energía eléctrica. La energía nuclear es la segunda mayor fuente de electricidad baja en carbono en la actualidad, después de la hidroeléctrica, y representa alrededor del 25% de la electricidad. Treinta y un países operan más de 400 reactores nucleares de energía, y otros 30 están interesados en introducir la energía nuclear en su matriz energética. Las nuevas tecnologías de reactores nucleares, además de generación de electricidad son diseñados para otros propósitos como calor industrial, producción de hidrógeno o potabilizar agua.

No obstante, este libro no está dedicado a un análisis profundo de los aspectos ambientales que puedan incluir el análisis de ciclos de vida por demás importante, que debe abordarse en otras publicaciones. Pero es evidente, que no puede haber transición energética estratégica sin el despliegue mundial de reactores nucleares, sin dejar de considerar la importancia de las energías renovables. En este sentido, esta obra constituye un enfoque innovador científico y tecnológico para el análisis de reactores nucleares de nueva generación y los actuales en operación, ya que aborda el problema fundamental del reactor nuclear, en núcleos desnudos o reflectados de diferentes tecnologías.

1.2. Enfoque del escalamiento

Entrando en materia, el objetivo fundamental de este libro es desarrollar modelos matemáticos que representen el comportamiento a la escala de un reactor nuclear, con un alto grado de fidelidad similar a simulaciones *pin to pin*. El enfoque de escalamiento es altamente aplicable en línea por su menor costo computacional respecto al problema directo *pin to pin*, esto es especialmente importante porque los reactores nucleares están compuestos por cientos de miles de *pines*. Los modelos matemáticos representativos del reactor nuclear son desarrollos que no son directos y conllevan una metodología que es rigurosa desde un punto de vista matemático, que permite estimar los coeficientes de transporte a escala del reactor.

1.3. Método de escalamiento

Existen varias formas de definir cantidades escaladas, y en un marco Euleriano, se puede definir una cantidad superficial de una función ψ , asociada a la fase $-\gamma$:

$$m(\mathbf{y})^* \langle \psi_\gamma \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_V m(\mathbf{y}) \psi_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (1.1)$$

Aquí V es el volumen representativo delimitado por una superficie cerrada S ; tal región V puede o no contener ambas fases γ y σ . La función ψ_γ depende del espacio y el tiempo, mientras que la función de ponderación m se permite variar solo con el espacio. El vector de posición \mathbf{x} está localizado en el centroide de V , y \mathbf{y}_γ se localiza en puntos dentro de la región del volumen representativo V asociada con la fase $-\gamma$, mientras que \mathbf{y} se puede localizar tanto la fase $-\gamma$ como la fase $-\sigma$.

La función de ponderación está definida como:

$$m(\mathbf{y}) = \begin{cases} \frac{1}{V}, & |\mathbf{y}| \leq r_0 \\ 0, & |\mathbf{y}| > r_0 \end{cases} \quad (1.2)$$

Entonces la cantidad escalada superficial se define como:

$$\langle \phi_\gamma \rangle(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \int_{V_\gamma} \phi_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (1.3)$$

En forma similar, la cantidad escalada intrínseca:

$$\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} \phi_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (1.4)$$

En (1.2), r_0 es el tamaño de V en unidades de longitud y V_γ es el volumen de la fase $-\gamma$ dentro del volumen V .

Las cantidades escaladas: superficial e intrínseca están relacionados por:

$$\langle \phi_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \quad (1.5)$$

donde ε_γ es el volumen de la fase $-\gamma$:

$$\varepsilon_\gamma = \frac{V_\gamma}{V} \quad (1.6)$$

Además de las definiciones de escalamiento, surge la necesidad de aplicar teoremas de integrales, uno de ellos basado en el teorema de divergencia de Gauss:

$$\langle \nabla \phi_\gamma \rangle = \nabla \langle \phi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dV \quad (1.7)$$

donde $A_{\gamma\sigma}$ representa el área interfacial dentro del volumen representativo.

La variable local está compuesta por la cantidad escalada intrínseca y las desviaciones espaciales:

$$\phi = \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \tilde{\phi} \quad (1.8)$$

Esta expresión es fundamental y se puede aplicar como una herramienta matemática, por ejemplo, en (1.7):

$$\langle \nabla \phi_\gamma \rangle = \nabla \langle \phi_\gamma \rangle + \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \left(\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} dA \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_\gamma dV \quad (1.9)$$

donde se puede demostrar que:

$$\left(\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} dV \right) = -\nabla \varepsilon_\gamma \quad (1.10)$$

Entonces el teorema toma la siguiente forma, después de considerar (1.5):

$$\langle \nabla \phi_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (1.11)$$

Desde el punto de vista matemático no se demuestra porque $\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$ es constante respecto a la integral de área, pero de forma intuitiva se debe a las escalas de longitud de V , $A_{\gamma\sigma}$, $\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$ y $\tilde{\phi}_\gamma$.

1.4. Relevancia

El reactor nuclear es un sistema heterogéneo donde los procesos nucleares y de transferencia de calor tienen lugar en múltiples escalas. El paradigma es estable-

cer un método que permita desde la concepción física más pequeña analizable con la teoría conocida, hasta una concepción completa del reactor, el método que se aplica para lograrlo se le puede denominar escalamiento que permite obtener un modelo matemático extendido de la teoría conocida, pero además de nuevos términos, los coeficientes derivados que corresponden a la escala del reactor incorporan los efectos de la escala más pequeña a través de los coeficientes originales o locales. Entonces, con el método un reactor nuclear puede escalarse desde la escala de *pin* hasta la escala del reactor nuclear.

Los procesos neutrónicos cobran gran relevancia en el entendimiento de los procesos en reactores nucleares, cuya tarea no es sencilla en el modelado escalado por la concepción implícita del alcance de la teoría existente que rompe con los esquemas estándar, logrando comportamiento subdifusivo a través de los coeficientes escalados de difusión de neutrones, de escape interfacial y pseudoconvectivos. La obtención de estos coeficientes escalados podría interpretarse como un logro matemático y numérico, no obstante, involucra un entendimiento físico a mayor escala. A través de los **Capítulos 2, 3, y 4** se profundiza en este tema con un gran rigor matemático.

En un reactor nuclear se producen simultáneamente diferentes fenómenos. En el núcleo del reactor, el proceso neutrónico derivado de la fisión está íntimamente ligado al proceso de transferencia de calor entre las barras de combustible y el refrigerante. El núcleo del reactor es heterogéneo y contiene muchos ensambles de combustible, y a su vez, cada conjunto contiene múltiples *pin*es (barra) de combustible. El núcleo contiene diferentes zonas: enriquecimiento de combustible, barras de control y grafito. Una gran parte del esfuerzo para comprender la física de los reactores nucleares incluye el análisis de la interacción entre el combustible y el refrigerante.

El escalamiento de un reactor refrigerado con sodio (SFR) se presenta en este libro, como uno de los aspectos más relevantes, porque constituye todas las etapas de las metodologías incluyendo, un proceso de reducción de escala de tipo heurístico para análisis del reactor a escala de ensamble, hasta la escala de un *pin* con las tres regiones que lo pueden definir tales como la región de combustible nuclear, la región de revestimiento y la región de holgura localizado entre estas dos regiones. Con la idea de realizar un análisis mucho más detallado utilizando las condiciones del modelo que representan el reactor escalado, pasando por el ensamble, el *pin* y sus componentes. El escalamiento del SFR se cubre en los **Capítulos 5, 6, 7 y 8**, debido a que se abordan 4 aspectos metodológicos que

incluyen simulación y pruebas acopladas. En **Capítulo 5** se presenta la derivación teórica del modelo de dos de las ecuaciones escaladas de transporte de calor. En el **Capítulo 6** se calculan los coeficientes escalados de transferencia de calor como función de la velocidad del sodio. En el **Capítulo 7** se presenta la estrategia de acoplamiento entre el modelo de dos ecuaciones escaladas de transferencia de calor y el modelo de los procesos neutrónico considerando que el reactor es reflectado. En el **Capítulo 8** se presenta la simulación escalada del reactor SFR, siendo los resultados campo de flujo neutrónico y concentración de precursores, así como los campos de temperatura del combustible y el refrigerante sodio para inserciones de reactividad positiva y negativa, incluyendo efectos asimétricos. Es importante resaltar que los fenómenos físicos de retroalimentación entre los procesos neutrónicos de transferencia de calor se establecieron con un modelo de difusión 3D con campos de reactividad tridimensionales. En este mismo capítulo se presentan resultados de la reducción de escala con el análisis de un *pin* de combustible, con las condiciones de un foco caliente del reactor SFR.

La metodología de escalamiento presentada en los **Capítulos 6 a 8**, se aplicaron para simulación multifísica y multiescala del reactor rápido experimental refrigerado con sodio, conocido como CEFR. En el **Capítulo 9** se hace uso directo del modelo escalado de transporte de calor y los procesos neutrónicos 3D. Los parámetros nucleares se calcularon con SERPENT y se presentan los resultados obtenidos. El uso de los nuevos modelos escalado y propuestos a lo largo de los capítulos antes mencionados, produce resultados aplicables a análisis y diseño de reactores con tiempos computacionales más bajos en comparación con las simulaciones conocidas como *pin to pin* códigos. Resulta notablemente valioso para otras aplicaciones en línea como son analizadores de planta y para el entrenamiento de operadores en simuladores de alcance total.

La derivación del modelo matemático escalado que gobierna el transporte de calor en un reactor de sales fundidas, donde las dos fases fluidas se encuentran en movimiento, porque el combustible nuclear es líquido en el cual están dispersas burbujas de helio. El método de escalamiento se aplicó a las ecuaciones locales de flujos separados que utilizan dos temperaturas, una para la sal fundida y otra para el helio. El resultado principal del **Capítulo 10** es un modelo a la escala del reactor MSR de dos ecuaciones que da cuenta de los procesos de transferencia de calor que involucran dos temperaturas no necesariamente en equilibrio térmico: una temperatura para el combustible de fluido nuclear y la otra para las burbujas de helio. Además, el procedimiento de escalamiento permite evaluar los coeficientes escalados de transferencia de calor representativos de la escala

del reactor. Los diversos coeficientes escalados (con características tensoriales y vectoriales) se derivaron como una función de los coeficientes variables definidos en las soluciones de las desviaciones de temperaturas de ambas fases y se resuelven construyendo problemas de valores a la frontera como se presenta en el Capítulo 6. Estos coeficientes escalados son representados con correlaciones empíricas. Basándose en los parámetros de diseño del reactor de sal fundida, como la temperatura de salida del fluido, el tamaño de las burbujas y la diferencia de temperatura conocida durante la operación.

Finalmente, en el **Capítulo 11** se presenta el módulo de Young escalado para una pastilla de combustible de UO_2 . El pellet de combustible nuclear es un material sinterizado con características heterogéneas constituido por la fase sólida de partícula de combustible y la fase gaseosa generada por el espacio entre sólidos. Para estas pastillas de combustible, se aplicó el método de escalamiento a las ecuaciones que gobiernan la mecánica a nivel microescala para calcular el módulo de Young escalado, que resultó ser una función de la porosidad. La ecuación escalada válida a escala de pastilla de combustible incluye tensores efectivos relacionados con el módulo de elasticidad y un nuevo vector efectivo denominado coeficiente de elasticidad interfacial, importante en materiales fuertemente deformados. El análisis presentado en este trabajo considera el cálculo de los coeficientes escalados para cuatro casos de microestructura para considerar los diferentes tipos de porosidad que pueden ocurrir dentro del combustible de UO_2 durante la operación del reactor. Además, se propone una correlación del módulo de Young en función de la porosidad y la presión que se puede implementar en programas de computo.

MODELO ESCALADO DE TRANSPORTE DE NEUTRONES

2.1. Difusión de neutrones en reactores nucleares

El reactor nuclear es un sistema heterogéneo donde los procesos nucleares y de transferencia de calor tienen lugar en múltiples escalas. Con el método de escalamiento, un reactor nuclear puede escalarse desde la escala de *pin* hasta la escala del reactor nuclear. Sin embargo, con esta metodología se obtiene un modelo matemático integro-diferencial que contiene más incógnitas que ecuaciones, es decir, variables dependientes con respecto al modelo no escalado. Por lo tanto, para obtener una ecuación escalada de difusión de neutrones bien condicionada, se proponen problemas de los coeficientes de las soluciones de las desviaciones espaciales que se evalúan numéricamente para obtener los coeficientes de difusión de neutrones escalados. Estos problemas se definen como problemas integro-diferenciales de valor límite a microescala, es decir a escala de *pin*. Para demostrar la aplicabilidad de la teoría, se calculan los coeficientes escalados para un reactor nuclear de cuarta generación de lecho de combustibles esféricos (tipo *Pebble bed*). Los resultados obtenidos con el modelo escalado de difusión de neutrones concuerdan bien con los resultados de la teoría de difusión clásica y la ecuación de Boltzmann.

La mayoría de los estudios sobre reactores tratan el movimiento de los neutrones como un proceso de difusión, en el que se supone que los neutrones, en promedio, tienden a difundirse desde regiones de alta a baja densidad de neutrones. El tratamiento del transporte de neutrones como un proceso de difusión tiene una validez limitada porque el neutrón presenta una trayectoria libre media relativamente grande, *e.g.*, para los reactores de agua ligera (LWR), la trayectoria libre es del orden 1[cm], que es comparable con el diámetro de un *pin* de combustible, con un orden de centímetros para espectro de neutrones rápidos. Dada la comprensión real del proceso de difusión, y sobre la base de una técnica de escalamiento, es sin duda necesario derivar una nueva ecuación de difusión de neutrones para describir su distribución en el núcleo de un reactor nuclear.

Los reactores de alta temperatura (HTR) se han estudiado durante muchas décadas y ahora se los considera una posible alternativa a los reactores LWR. El diseño de los PBMR (**Figura 2.1a**) es un tipo de reactor HTR, los ensambles de combustible son esféricos donde se muestra un conjunto de ellos en la **Figura 2.1b**, los cuales están refrigerados por helio. El ensamble esférico tiene un diámetro de 5[cm] con un revestimiento de grafito de espesor de 0.1[cm] como se ilustra en la **Figura 2.1c**, y puede contener entre 10000 y 20000 microesferas de combustible mezclado con grafito pulverizado (**Figura 2.1d**). En la **Figura 2.1e** se muestra un esquema de la microesfera o partícula TRISO, que tiene en su centro un núcleo de combustible o kernel que puede ser óxido de uranio o plutonio. El kernel está rodeado por una capa de carbono poroso, una capa de carburo de silicio y dos capas de carbono pirolítico.

El proceso de escalamiento comienza con la física que rige a escala de *pin* de combustible como se describió a través de la **Figura 2.1**. Consideramos el proceso de difusión y fisión en un núcleo de reactor heterogéneo donde los neutrones generados dentro del material de combustible del reactor se dispersan dentro del moderador. Para una configuración altamente heterogénea, se puede suponer que solo hay «dos materiales» en el sistema, el combustible (σ) y el moderador con materiales estructurales (γ).

También se supone que todos los neutrones tienen la misma velocidad y que el flujo angular es linealmente anisotrópico. Entonces, la ecuación de conservación que gobierna el proceso de difusión de neutrones en la fase $-\gamma$, así como las condiciones iniciales y de contorno en las interfaces están dadas por las siguientes ecuaciones locales:

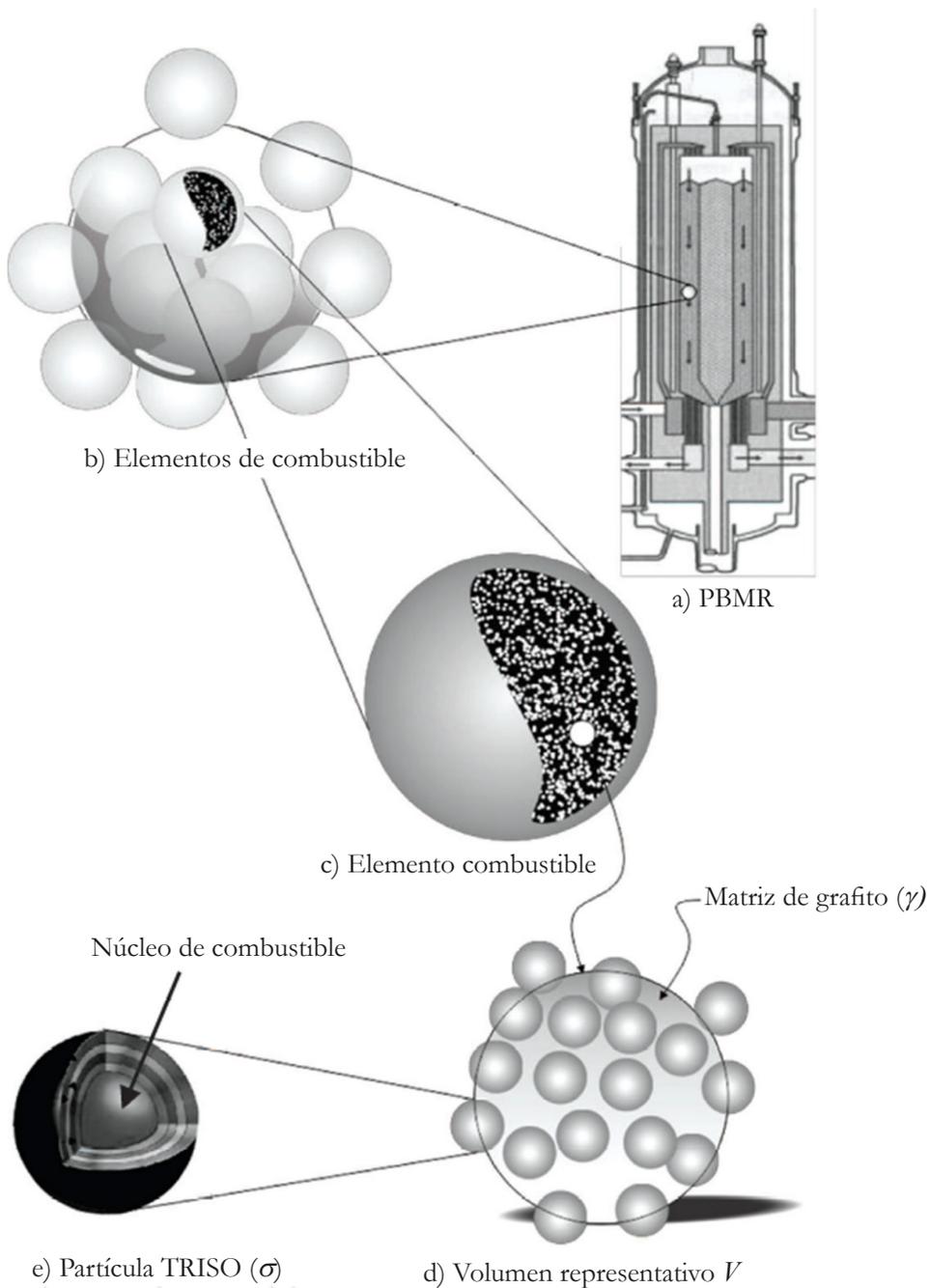


Figura 2.1. Escalas del reactor HTGR.

Fase $-\gamma$:

$$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{a\gamma}(\mathbf{r}) \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) = S_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

$$\mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) = -D_\gamma(\mathbf{r}) \nabla \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

Condición inicial:

$$\phi_\gamma(\mathbf{r}, 0) = \phi_{\gamma 0}(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

Condición en la interfaz $-\gamma\sigma$:

$$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \phi_\gamma = -\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\sigma \nabla \phi_\sigma \quad (2.4)$$

$$\phi_\gamma = \phi_\sigma \quad (2.5)$$

donde ϕ es el flujo neutrónico, \mathbf{J} es el vector densidad de corriente, Σ_a es a sección eficaz macroscópica de absorción, S es la fuente de neutrones, D es el coeficiente de difusión de neutrones y $\mathbf{n}_{\gamma\sigma}$ es el vector normal unitario en la interface dirigido de fase $-\gamma$ hacia la fase $-\sigma$. La ecuación de difusión contiene los procesos más relevantes sobre los neutrones que tienen lugar en un sistema de reacción nuclear: neutrones de fisión, neutrones diferidos por decaimiento de fragmentos de fisión, absorción y escape de neutrones como una función del espacio y del tiempo. Es importante la interpretación de la fuente de neutrones $S_\gamma(\mathbf{r}, t)$ que se refiere a aquellos neutrones que se transportaron desde la fase $-\sigma$ del combustible donde se llevan a cabo las fisiones nucleares y los generados por decaimiento, es decir los neutrones diferidos.

La teoría de la difusión proporciona una descripción matemática estrictamente válida del flujo de neutrones cuando se satisfacen los supuestos realizados en su derivación: (1) la absorción es mucho menos probable que la dispersión, (2) la distribución de neutrones varía espacialmente de forma lineal y (3) la dispersión es isotrópica. La primera condición se cumple para la mayoría de los materiales moderadores y estructurales que se encuentran en los reactores nucleares, pero no para el combustible y el elemento de control altamente absorbedor de neutro-

nes. La segunda condición se cumple para unas pocas trayectorias libres medias que se alejan del límite de grandes medios homogéneos con una distribución de fuentes relativamente uniforme. La tercera condición se cumple para la dispersión de núcleos de masa atómica pesada.

Un reactor nuclear es un sistema heterogéneo y la ecuación de difusión no es estrictamente aplicable. Por lo tanto, la motivación es derivar un modelo escalado de difusión de neutrones para aplicaciones en reactores nucleares.

Es importante destacar que el modelo de difusión de neutrones representativo a la escala del reactor nuclear contiene coeficientes escalados e interfaciales que son representativos de reactores nucleares de agua ligera, de metales líquidos y del tipo *Pebble Bed*.

La ventaja de este método es en principio representar el comportamiento del reactor que permite una mejor interpretación de registros y mediciones del flujo de neutrones o potencia neutrónica. Otras aplicaciones son analizadores de planta, o también para entrenamiento de operadores de plantas nucleares.

2.2. Ecuación escalada de difusión de neutrones

Aplicando los operadores de escalamiento a la ecuación de difusión de neutrones, presentado en el **Capítulo 1**:

$$\frac{1}{v_n} \left\langle \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \right\rangle + \langle \nabla \cdot \mathbf{J}_\gamma \rangle + \langle \Sigma_{a\gamma} \phi_\gamma \rangle = \langle S_\gamma \rangle \quad (2.6)$$

La velocidad del neutrón v_n es constante dentro del operador integral. En un núcleo de reactor típico, el volumen V_γ es independiente del tiempo. Esto nos permite intercambiar integración y diferenciación para expresar el primer término del lado izquierdo de este resultado de la siguiente manera:

$$\left\langle \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t} \quad (2.7)$$

Considerando que $\langle \phi_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$, donde la fracción volumen ε_γ es independiente del tiempo:

$$\left\langle \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \right\rangle = \varepsilon_\gamma \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \quad (2.8)$$

Para intercambiar la integración y la diferenciación en el segundo término del lado izquierdo de (2.1), se utiliza el teorema dado por (1.5) en el **Capítulo 1**:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{J}_\gamma \rangle = -\nabla \cdot \langle D_\gamma \nabla \phi_\gamma \rangle - \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \phi_\gamma dA \quad (2.9)$$

El término integral representa la densidad de corriente en la interfaz entre el combustible y el moderador o refrigerante, en este trabajo este término se llama tasa interfacial de neutrones.

Sustituyendo se obtiene:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\gamma \frac{1}{v_n} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} &= \varepsilon_\gamma \langle S_\gamma \rangle^\gamma - \varepsilon_\gamma \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \phi_\gamma dA \\ &+ \nabla \cdot \left\{ D_\gamma \left(\nabla \langle \phi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dA \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde:

$$\nabla \cdot \langle D_\gamma \nabla \phi_\gamma \rangle = \nabla \cdot \left\{ D_\gamma \left(\nabla \langle \phi_\gamma \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dA \right) \right\} \quad (2.11)$$

En esta ecuación, el término integral representa la tasa de difusión de neutrones en la interfaz $-\gamma\sigma$, o en otras palabras es la difusión interfacial entre la fase $-\sigma$ (combustible) y la fase $-\gamma$ (moderador). Además, se pueden considerar cantidades escaladas intrínsecas, *i.e.*,

$$\langle S_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \langle S_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.12)$$

$$\langle \Sigma_{a\gamma} \phi_\gamma \rangle = \Sigma_{a\gamma} \varepsilon_\gamma \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \quad (2.13)$$

Ahora, para eliminar el valor local del flujo neutrónico en el término difusivo, utilizamos la siguiente descomposición de la variable local:

$$\phi = \langle \phi \rangle^\gamma + \tilde{\phi} \quad (2.14)$$

Considerando esta descomposición espacial dentro de la integral del área de $\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma$ conduce a:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dA = \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (2.15)$$

Si se impone que la restricción de escala de longitud es:

$$\ell_\gamma, \ell_\sigma \ll V^{1/3} \ll L \quad (2.16)$$

donde L es la longitud característica del núcleo del reactor, ℓ_γ y ℓ_σ son longitudes características del moderador o refrigerante (es la distancia entre elementos de combustible) y los elementos de combustible, respectivamente. Se puede considerar que la cantidad escalada $\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$ es constante dentro de la integral del área interfacial. Entonces,

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dA = \left\{ \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (2.17)$$

donde:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} dA = -\nabla \varepsilon_\gamma \quad (2.18)$$

Pero $\nabla \varepsilon_\gamma = 0$ porque en este estudio ε_γ es constante prácticamente, lejos de las paredes del sistema en estudio, entonces:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \phi_\gamma dA = \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (2.19)$$

y:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma} dA = \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \tilde{\phi}_{\gamma} dA \quad (2.20)$$

Sustituyendo,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\gamma} \frac{1}{v} \frac{\partial \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{\partial t} &= \varepsilon_{\gamma} \langle S_{\gamma} \rangle^{\gamma} - \Sigma_{a\gamma} \varepsilon_{\gamma} \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \tilde{\phi}_{\gamma} dA \\ &+ \nabla \cdot \left\{ D_{\gamma} \left(\varepsilon_{\gamma} \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_{\gamma} dA \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Los procesos neutrónicos en el *pin* de combustible en reactores nucleares, es permisible que se considere una región homogénea, en donde ε_{γ} permanece constante.

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{v_n} \frac{\partial \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{\partial t}}_{\text{acumulación}} &= \underbrace{\langle S_{\gamma} \rangle^{\gamma}}_{\text{fuente}} + \underbrace{\nabla \cdot (D_{\gamma} \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma})}_{\text{fugas}} - \underbrace{\Sigma_{a\gamma} \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}_{\text{absorción}} \\ &+ \underbrace{\frac{\varepsilon_{\gamma}^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \tilde{\phi}_{\gamma} dA}_{\text{corriente interfacial}} + \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{D_{\gamma}}{V_{\gamma}} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \tilde{\phi}_{\gamma} dA \right)}_{\text{termino no local}} \end{aligned} \quad (2.22)$$

Considerando restricciones de escala de longitud, se puede demostrar que el término no local es nulo:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{\partial t} = \langle S_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \nabla \cdot (D_{\gamma} \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}) - \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \frac{\varepsilon_{\gamma}^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \tilde{\phi}_{\gamma} dA \quad (2.23)$$

Esta expresión es la ecuación escalada de difusión de neutrones, donde se puede observar un nuevo término respecto al problema original. Este término nuevo es la corriente interfacial de neutrones, que se puede identificar por un término integro-diferencial de las desviaciones espaciales del flujo neutrónico $\tilde{\phi}$, dentro del volumen representativo. Para encontrar la solución de esta ecuación es necesario establecer la ecuación que gobierna el comportamiento de $\tilde{\phi}$, la cual se discute y presenta en la siguiente sección.

2.3. Ecuación de las desviaciones espaciales

La ecuación local de difusión de neutrones dada por (2.1), se puede expresar de la siguiente forma:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} - \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \phi_\gamma) + \Sigma_{a\gamma} \phi_\gamma - S_\gamma = 0 \quad (2.24)$$

Restando (2.23) de esta ecuación, se obtiene la ecuación de gobierno para $\tilde{\phi}$:

$$\underbrace{\frac{1}{v_n} \frac{\partial \tilde{\phi}_\gamma}{\partial t}}_{\text{acumulación}} = - \underbrace{\Sigma_{a\gamma} \tilde{\phi}_\gamma}_{\text{absorción}} + \underbrace{\nabla \cdot (D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma)}_{\text{difusión}} + \underbrace{\frac{\epsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma dA}_{\text{corriente interfacial}} \quad (2.25)$$

Se consideró que el consumo de combustible para tiempos cortos es constante, lo cual significa que $\langle S_\gamma \rangle^\gamma - S_\gamma = 0$.

Para resolver el problema de valores límite en alguna región representativa, proponemos un modelo geométrico de un sistema periódico espacial:

$$\tilde{\phi}_\gamma(\mathbf{r} + \ell_i) = \tilde{\phi}_\gamma(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.26)$$

Aquí ℓ_i representa tres vectores reticulares no únicos que se requieren para describir un conjunto de combustible periódico espacialmente. Las implicaciones de las condiciones periódicas no necesariamente son aplicables solo para sistemas periódicos espaciales ordenados, como algunos tipos de reactores nucleares.

Se ha demostrado que los sistemas desordenados también pueden aproximarse mediante regiones representativas cuya disparidad en la escala de longitud sea suficiente para que las heterogeneidades locales se suavicen espacialmente en el volumen representativo apropiado. Posteriormente, a estas regiones representativas también se les pueden imponer condiciones periódicas. Más adelante en este trabajo, utilizaremos celdas unitarias regulares para calcular coeficientes escalables, ya que es lo suficientemente preciso para representar el núcleo de los reactores nucleares, pero enfatizamos que la teoría desarrollada es aplicable a geometrías más complejas e irregulares a microescala, siempre que se satisfagan las disparidades en la escala de longitud y los volúmenes representativos apropiados. Estas características tienen una importancia crucial cuando se homogeneizan procesos

cuya física tiene lugar en entornos heterogéneos. Es una aproximación aceptable que las cantidades escalables se puedan linealizar sobre una celda unitaria.

Cuando las restricciones de escala de longitud son válidas de acuerdo con (2.16), se ha demostrado que el escalamiento de las desviaciones espaciales es igual a cero:

$$\text{Restricción del escalamiento:} \quad \langle \tilde{\phi}_\gamma \rangle = 0 \quad (2.27)$$

Sustituyendo la descomposición dada (2.14) en la variable local de las condiciones de frontera, se obtiene:

$$\tilde{\phi}_\gamma = \underbrace{(\phi_\sigma - \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma)}_{\text{Fuente Macroescala}} \quad (2.28)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \tilde{\phi}_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \underbrace{\left(\nabla \langle \phi \rangle^\gamma + \frac{\mathbf{J}_\sigma}{D_\gamma} \right)}_{\text{Fuente Macroescala}} \quad (2.29)$$

Considerando *quasi*-estado estacionario, el problema se reduce a:

$$\text{En la fase:} \quad -\gamma \Sigma_{a\gamma} \tilde{\phi}_\gamma = \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma) + \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (2.30)$$

La forma de este problema de valor límite para desviaciones espaciales sugiere una formulación lineal en términos de cantidades escalables y la fuente de neutrones del combustible nuclear, *i.e.*, la fase $-\sigma$.

Debemos recordar que las cantidades escalables son constantes dentro de la región representativa donde se resuelve el problema de las desviaciones espaciales. Entonces la solución matemática de las desviaciones espaciales sugiere que sea de la forma:

$$\tilde{\phi}_\gamma = \mathbf{d} \cdot \underbrace{\left(\nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{\mathbf{J}_\sigma}{D_\gamma} \right)}_{\text{Fuente Macroescala}} - \zeta \underbrace{(\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - \phi_\sigma)}_{\text{Fuente Macroescala}} \quad (2.31)$$

donde \mathbf{d} y ζ son coeficientes (en general nos vamos a referir como coeficientes variables) de la solución de las desviaciones espaciales. Aquí es importante destacar que la desviación espacial $\tilde{\phi}_\gamma$ es una variable definida en la microescala; $\tilde{\phi}_\gamma$ es diferente de cero debido a las fuentes definidas en la macroescala en (2.28) y (2.29), y por la linealidad de las ecuaciones que rigen las desviaciones espaciales. Entonces podemos pensar en cada variable como la desviación espacial cuando solo existe su fuente definida en la macroescala en forma normalizada. En otras palabras, tenemos que:

$$\tilde{\phi}_\gamma = d_i, \quad \text{cuando} \quad \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial x} + \frac{J_{\sigma,i}}{D_\gamma} = 1 \quad \text{y las fuentes restantes son cero} \quad (2.32)$$

donde $i = 1, 2, 3$ se usa para indicar cada componente: x, y, z .

De esta manera, la contribución individual de cada fuente definida en la macroescala se cuantifica mediante el coeficiente de la solución formal como se indica en (2.31). Aquí es importante aclarar que, dado que ϕ_σ y \mathbf{J}_σ se definieron inicialmente como constantes dentro del volumen representativo a la microescala, entonces sus valores escalados son los mismos que usamos en el procedimiento teórico de la cantidad escalada intrínseca, es decir, $\phi_\sigma = \langle \phi_\sigma \rangle^\gamma$ y $\mathbf{J}_\sigma = \langle \mathbf{J}_\sigma \rangle^\gamma$. Por esta razón estas variables se escriben simplemente como ϕ_σ y \mathbf{J}_σ en (2.31).

La sustitución de (2.31) en (2.28)-(2.30) produce los problemas de valores límite que se presentan en la **Tabla 2.1**.

Tabla 2.1. Problemas de valores límite para ζ y \mathbf{d} .

$\Sigma_{a\gamma}\zeta = \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \zeta) + \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \zeta dA$	$\Sigma_{a\gamma}\mathbf{d} = \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \mathbf{d}) + \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \mathbf{d} dA$
$\zeta = 1, \text{ en la interfaz } \zeta - \gamma\sigma$	$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \mathbf{d} = \mathbf{n}_{\gamma\sigma}, \text{ en la interfaz } \zeta - \gamma\sigma$
$\zeta(\mathbf{r} + \ell_i) = \zeta(\mathbf{r}), i = 1, 2, 3, \text{ Periodicidad}$	$\mathbf{d}(\mathbf{r} + \ell_i) = \mathbf{d}(\mathbf{r}), i = 1, 2, 3, \text{ Periodicidad}$
$\langle \zeta \rangle^\gamma = 0, \text{ Restricción de escalamiento}$	$\langle \mathbf{d} \rangle^\gamma = 0, \text{ Restricción de escalamiento}$

Es importante apuntar que las fuentes para soluciones no triviales de problemas límite se indican en la interfaz $-\gamma\sigma$. Aquí es importante destacar que los problemas de valores límite son independientes de fuentes macroscópicas que están relacionadas con la diferencia de corrientes de neutrones entre el moderador y el combustible nuclear. Esta característica proporciona un marco teórico general para resolver los problemas límite independientemente de la intensidad de la fuente de neutrones. Como se ve en la siguiente sección, la independencia de los problemas de cierre con fuentes macroscópicas nos permitirá calcular los coeficientes escalados como funciones de $\Sigma_{a\gamma}$ y disposición geométrica.

2.4. Modelo escalado de transporte de neutrones

Ahora, sustituyendo (2.31) en la ecuación escalada dada por (2.23), se obtiene el modelo escalado de difusión de neutrones:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = & \langle S_\gamma \rangle^\gamma - \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \mathbf{u} \cdot (D_\gamma \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \mathbf{J}_\sigma) - a_v \kappa (\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - \phi_\sigma) \\ & + \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eff} \cdot \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \mathbf{W} \cdot \mathbf{J}_\sigma - \mathbf{v} (\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - \phi_\sigma)) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Donde los coeficientes escalados están dados por:

$$\mathbf{u} = \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \mathbf{d} dA \quad (2.34)$$

$$a_v \kappa = \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \zeta dA \quad (2.35)$$

$$\mathbf{D}_{eff} = D_\gamma \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \mathbf{d} dA \right) \quad (2.36)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \mathbf{d} dA \quad (2.37)$$

$$\mathbf{v} = \frac{D_\gamma}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \zeta dA \quad (2.38)$$

El coeficiente escalado de difusión de neutrones \mathbf{D}_{eff} es un tensor, así como el coeficiente de difusión cruzada asociado con el flujo de neutrones dentro de la zona de combustible \mathbf{W} . Se puede demostrar fácilmente que:

$$\mathbf{W} = \frac{\mathbf{D}_{eff}}{D_\gamma} - \mathbf{I} \quad (2.39)$$

Lo que indica que ambos coeficientes de difusión tienen una magnitud comparable y están interrelacionados. Los coeficientes escalados de tipo *convectivo* \mathbf{u} y \mathbf{v} están asociadas a las fuentes macroscópicas dadas por (2.28) y (2.29), respectivamente. Una inspección más profunda de las definiciones de \mathbf{u} y \mathbf{v} dados por (2.34) y (2.38), respectivamente y las condiciones de interfaz del problema del valor límite para \mathbf{d} y ζ (**Tabla 2.1**) indicará que estos coeficientes son cero para partículas de combustible simétricas y tienen valores insignificantes para casos con partículas de combustible no simétricas. El coeficiente interfacial neutrónico κ captura la física del intercambio de neutrones en la interfaz $-\gamma\sigma$, donde a_v es la densidad de área interfacial ($= A_{\gamma\sigma} / V$). Entonces, el modelo escalado de transporte de neutrones está dada por:

$$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \langle S_\gamma \rangle^\gamma - \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - a_v \kappa (\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - \phi_\sigma) + \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eff} \cdot \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \mathbf{W} \cdot \mathbf{J}_\sigma) \quad (2.40)$$

Hasta ahora hemos basado nuestro estudio considerando que todos los neutrones en el reactor tienen la misma velocidad. El modelo escalado tiene dos coeficientes adicionales con respecto a la ecuación estándar de difusión de neutrones. El coeficiente escalado κ captura la física del intercambio de neutrones en la interfaz moderador-combustible, y el tensor de difusión cruzado \mathbf{W} cuantifica la difusión de neutrones cuando la fuerza impulsora es el flujo de neutrones dentro de las partículas de combustible. El tensor \mathbf{W} está interrelacionado con el tensor de difusión, un tensor de difusión escalado \mathbf{D}_{eff} , el cual se derivó matemáticamente.

El método de escalamiento fue necesario para aproximar el problema de muchas microesferas (TRISOS) inmersas en grafito pulverizado cuya muestra representativa se ilustra en **Figura 1d**. En esta figura, también se muestra el volumen representativo seleccionado con algunos TRISOS que intersecan el límite imaginario del volumen, para el estudio del problema de difusión de neutrones a esta escala, es decir, a la microescala.

2.5. Coeficientes escalados de transporte

Los problemas de valores límite se resolvieron numéricamente utilizando el software tipo CFD. Este software funciona dentro del marco del método de elementos finitos y contiene rutinas numéricas avanzadas para manejar peculiaridades desafiantes como: condiciones de contorno periódicas, restricciones de escalamiento y procedimientos de refinamiento de malla adaptativa. Además, debe ser capaz de resolver ecuaciones integro-diferenciales como (2.35) en 3D, y calcular automáticamente los coeficientes escalables. Para todos los cálculos numéricos utilizamos elementos triangulares y aseguramos resultados de malla independiente.

Para calcular los coeficientes escalados, empleamos una celda periódica 3D ilustrada en la **Figura 2.2**, que captura la disposición geométrica de los reactores nucleares con partículas de combustible, lo que constituye un nuevo concepto de sistemas avanzados, conocido como Generación IV.

Para mantener la generalidad de los resultados, definimos convenientemente el número adimensional relativo al área de difusión de neutrones:

$$\Phi = \frac{\Sigma_{a\gamma} l_{cell}^2}{D_\gamma} \quad (2.41)$$

donde l_{cell} es la longitud de la celda como se muestra en la **Figura 2.2**, se puede observar que la inversa del área de difusión de neutrones está dada por $\Sigma_{a\gamma} / D_\gamma$.

La celda unitaria utilizada para los cálculos 3D, compuesta por una esfera dentro de una caja, representa en cierto grado la estructura geométrica, un TRISO rodeado de grafito pulverizado. Debemos recordar que la celda unitaria debe ser periódica en todas las direcciones. Destacamos que la teoría no está limitada por la geometría empleada como celda unitaria y se pueden utilizar otras geometrías más complicadas si se las considera como geometrías representativas a microescala.

La solución de campo de los coeficientes variables de las soluciones de las desviaciones espaciales dada por (2.31) se representa en las **Figuras 2.3** para $\Phi = 1$ y $\varepsilon_\gamma = 0.9$, allí en el eje de coordenadas (x, y, z se normalizaron respecto a l_{cell}).

Las restricciones de escalamiento $\langle \zeta \rangle^\gamma = 0$ y $\langle \mathbf{d} \rangle^\gamma = 0$ se verificaron en nuestros cálculos mientras que las condiciones periódicas son visiblemente evidentes.

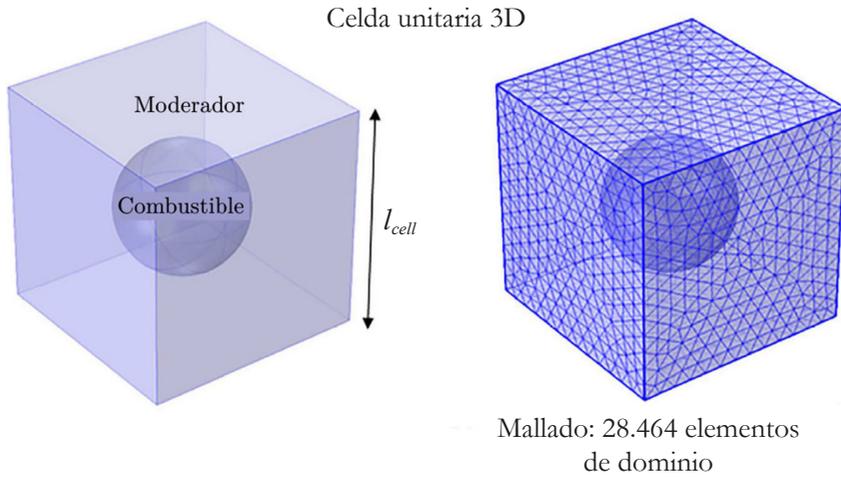


Figura 2.2. Celda unitaria 3D y dominio computacional.

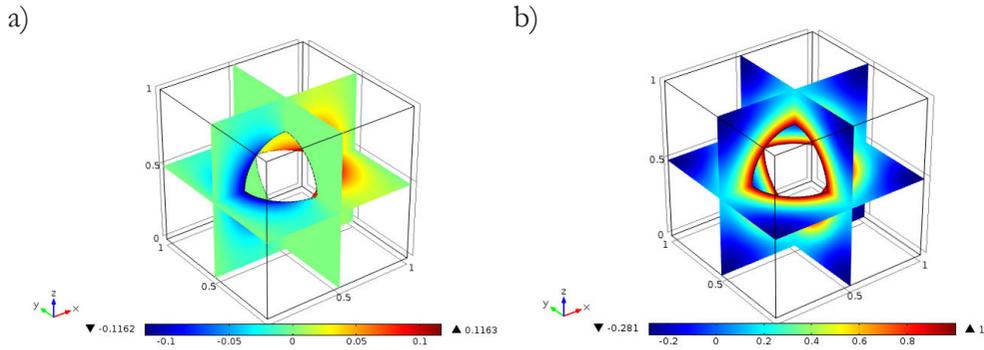


Figura 2.3. Campos de solución: (a) $(d)_x / l_{cell}$ y (b) ζ .

Como se esperaba, la solución de ζ es simétrica alrededor de cualquier plano que corte el centro de las partículas. El elemento $-i$ de \mathbf{d} es simétrica para cualquier plano orientado a lo largo de la coordenada $-i$ y cortando el centro de las partículas. El elemento $-i$ \mathbf{d} es antisimétrica alrededor del plano ortogonal a la coordenada $-i$ y cortando el centro de las partículas.

El componente longitudinal (xx) del tensor de difusión escalado fue calculado y sus estimaciones son graficadas a la izquierda de la **Figuras 2.4**. Debido a la simetría de la celda unitaria: $(D_{eff})_{xx} = (D_{eff})_{yy} = (D_{eff})_{zz}$, encontrando que los

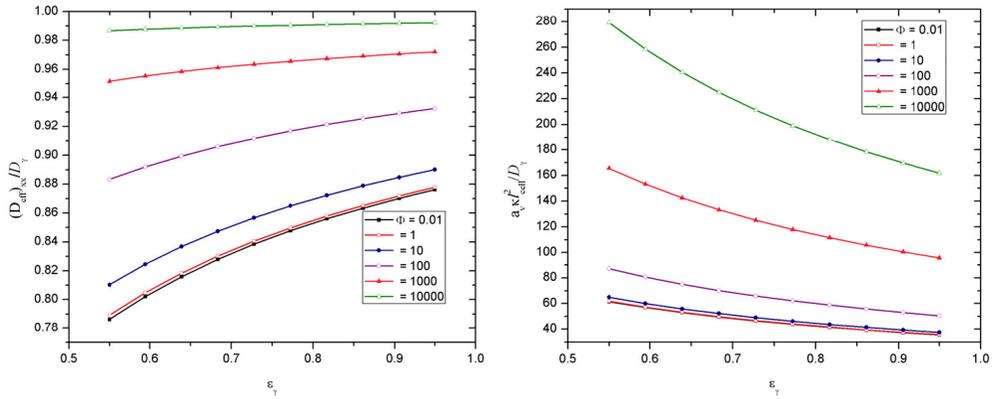


Figura 2.4. Celda Unitaria 3D: $I_{\xi q}$.) Coeficiente de difusión escalado y Der.) Coeficiente interfacial neutrónica.

términos cruzados: $(D_{eff})_{xy}$, $(D_{eff})_{xz}$, $(D_{eff})_{yz} \approx 0$ mucho más pequeños que $(D_{eff})_{xx}$. Entonces, se puede escribir: $\mathbf{D}_{eff} \approx (D_{eff})_{xx} \mathbf{I}$.

Se puede observar en esta figura, que conforme ε_γ se aproxima a 1, $(D_{eff})_{xx} \rightarrow D_\gamma$ el coeficiente de difusión escalado exhibe un comportamiento subdifusivo con respecto a D_γ . Las predicciones numéricas del coeficiente interfacial neutrónico se representan gráficamente a la derecha de la **Figura 2.4**. A medida que aumenta la fracción de volumen del moderador, el coeficiente de difusión de neutrones disminuye hasta llegar al caso hipotético en el que no hay partículas de combustible, es decir, $\varepsilon \rightarrow 1$, $a_v \kappa \rightarrow 0$. En el caso contrario, se observa que el valor máximo para $a_v \kappa$ se obtiene para valores bajos de ε_γ .

Un hallazgo importante es que la tasa de absorción de neutrones mejora la difusión escalada. Para valores altos de Φ , se observa una dependencia débil con la fracción de volumen del moderador. Físicamente, estos resultados indican que para moderadores con alta capacidad de absorción de neutrones la difusión incrementa y la presencia de partículas de combustible no obstaculiza sustancialmente el flujo de neutrones.

2.6. Comparación con solución exacta

Para comprobar las capacidades y la precisión del modelo escalado, se compara la solución numérica con la solución exacta para un caso simplificado de transporte

de neutrones. Con este objetivo, se plantea un problema unidimensional de placa infinita con una fuente de neutrones delta independiente del tiempo [$S_\gamma \delta(x) = S_\gamma$] en el centro del dominio ($x = 0$). La condición inicial es: $\phi_\gamma = 0$ en $t = 0$. En este problema la única fuente de neutrones tiene lugar en $x = 0$ y además no hay partículas de combustible en el resto del dominio.

En estas circunstancias, a partir de cálculos numéricos de coeficientes escalados nosotras ideamos que la difusión escalada $(D_{eff})_{xx} \rightarrow D_\gamma$, y el coeficiente interfacial neutrónico $a_v \kappa \rightarrow 0$. Sin embargo, estas tendencias no se mantienen cuando $x \rightarrow 0$ y los valores asociados de $(D_{eff})_{xx}$ y $a_v \kappa$ deben calcularse a partir del valor correspondiente de la fuente adimensional Φ . El parámetro Φ se calcula considerando el valor de $\Sigma_{a\gamma}$, un *pin* de combustible con espaciado en el arreglo de $l_{cell} = 1.4$ [cm] típico en reactores nucleares, y difusividad normal (no escalada) $D_\gamma = (3\Sigma_{t\gamma})^{-1}$.

En este punto conviene definir el *albedo*:

$$c = \frac{\Sigma_{s\gamma}}{\Sigma_{t\gamma}} = \frac{\Sigma_{s\gamma}}{\Sigma_{a\gamma} + \Sigma_{s\gamma}} \quad (2.42)$$

Y $x\Sigma_{t\gamma}$ como la posición adimensional.

Para este problema, la solución exacta del modelo de difusión del problema directo dado por (2.1), es:

$$\phi_\gamma = \frac{S_\gamma}{4} \sqrt{\frac{3\Sigma_{t\gamma}}{\Sigma_{a\gamma}}} \left[e^{-\sqrt{3\Sigma_{t\gamma}\Sigma_{a\gamma}}|x|} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{3\Sigma_{t\gamma}}{4\nu_n t}} |x| - \sqrt{\Sigma_{a\gamma}\nu_n t} \right) - e^{-\sqrt{3\Sigma_{t\gamma}\Sigma_{a\gamma}}|x|} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\frac{3\Sigma_{t\gamma}}{4\nu_n t}} |x| + \sqrt{\Sigma_{a\gamma}\nu_n t} \right) \right] \quad (2.43)$$

donde:

$$\operatorname{erfc}(x') = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{x'}^{\infty} e^{-u^2} du \quad (2.44)$$

Además, también comparamos con las soluciones exactas para la ecuación de Boltzmann, dadas por Heizler (2010):

Para el caso altamente absorbente:

$$\phi_\gamma = \frac{S_\gamma}{2} \left[E_1(|x|\Sigma_{a\gamma}) - E_1(v_n \Sigma_{a\gamma} t) \right] H\left(t - \frac{|x|}{v}\right) \quad (2.45)$$

Para el caso de dispersión pura:

$$\begin{aligned} \phi_\gamma = & \frac{\sqrt{15}\Sigma_{t\gamma} v_n S_\gamma}{2} \int_0^t e^{-5(v/2)\Sigma_{t\gamma} u} I_0\left(5\frac{v_n}{2}\Sigma_{t\gamma} \sqrt{u^2 - \frac{3|x|^2}{5v_n^2}}\right) H\left(u - \sqrt{\frac{3|x|}{5v_n}}\right) du \\ & - \frac{S_\gamma}{2} \sqrt{\frac{27}{5}} e^{-5(v_n/2)\Sigma_{t\gamma} t} I_0\left(5\frac{v}{2}\Sigma_{t\gamma} \sqrt{t^2 - \frac{3|x|^2}{5v_n^2}}\right) H\left(t - \sqrt{\frac{3|x|}{5v_n}}\right) \end{aligned} \quad (2.46)$$

donde E_1 es la función integral exponencial dada por:

$$E_1(x) = \int_{|x|}^{\infty} \frac{e^{-x'}}{x'} dx' \quad (2.47)$$

y

$$H(x) = \text{Función de Heavyside} \quad (2.48)$$

$$I_n(x) = \text{Función Bessel} \quad (2.49)$$

En la **Figura 2.5** se representan las soluciones numéricas del modelo escalado dado por (2.31) utilizando coeficientes escalados con celdas 2D (Espinosa-Paredes & Aguilar-Madera, 2018) y 3D para dos casos límite de *albedo*. Dichas soluciones se presentan como función del tiempo y la posición. Además, se añaden las soluciones exactas para el modelo de difusión dado por (2.43) y la ecuación de Boltzmann [(2.45) o (2.46)].

En primer lugar, observamos que el modelo escalado sigue de cerca el modelo de difusión, excepto para tiempos largos y un caso de dispersión pura. Debe-

mos recordar que el modelo de difusión considera un movimiento de flujo de neutrones isotrópico y la absorción de neutrones es mucho menos probable que la dispersión. La última afirmación es la razón por la que el modelo de difusión produce resultados similares a la ecuación de Boltzmann cuando $c = 0.99$. Para $c = 0$ la ecuación de Boltzmann desarrolla una singularidad cuando $x \rightarrow 0$.

Por otra parte, debe destacarse que el uso de celda unitaria 3D para el cálculo de coeficientes escalados representa una periodicidad geométrica regular en las 3 direcciones (x, y, z), contrario cuando se emplean celdas unitarias 2D. Esta condición geométrica conduce al cálculo de coeficientes efectivos isotrópicos, que, como se comentó, es una suposición involucrada en el modelo de difusión. Por lo tanto, las curvas graficadas en la **Figura 2.5** confirman la idea de que el modelo escalado con coeficientes escalados obtenidos con celdas 3D predice resultados subdifusivos respecto al modelo de difusión. En general, podemos concluir en esta parte que el modelo escalado concuerda bien con las soluciones exactas del modelo de difusión y la ecuación de Boltzmann, excepto para tiempos largos y casos de dispersión pura.

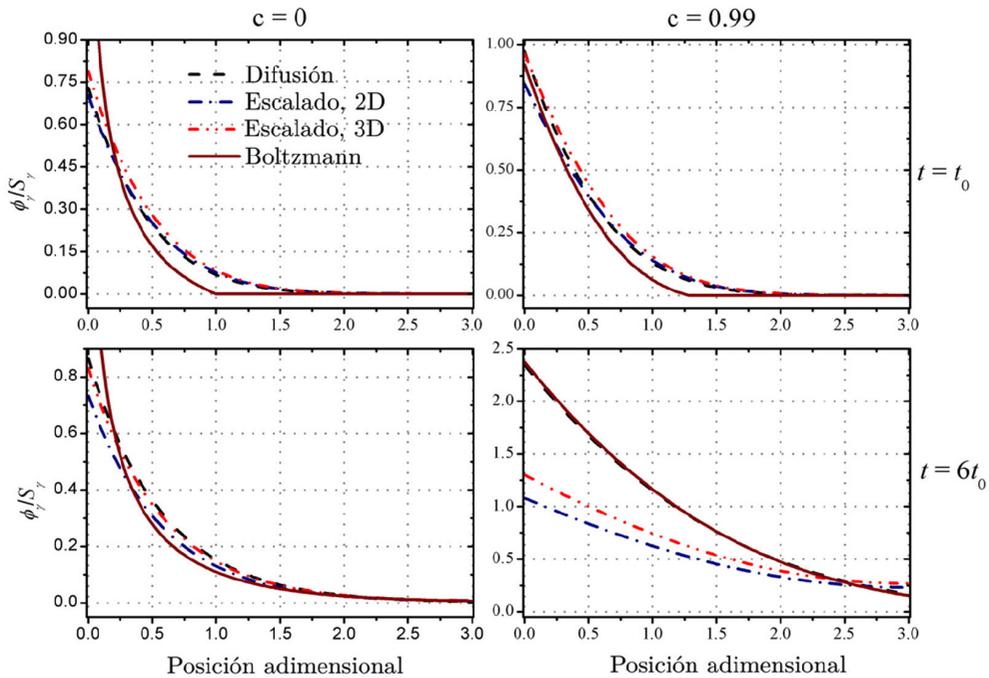


Figura 2.5. Comparación del modelo escalado con la solución exacta.

COEFICIENTE DE DIFUSIÓN DE NEUTRONES DEPENDIENTE DEL TIEMPO

3.1. Escalas de tiempo en reactores nucleares

Se investiga la dependencia temporal del coeficiente escalado de difusión de neutrones, así como de los coeficientes interfaciales neutrónicos en reactores nucleares en escalas de tiempo cortas, mediante el método de escalamiento. En este capítulo se desarrollan los problemas de valores límite de la ecuación diferencial que rige las desviaciones espaciales en torno a las variables escaladas. La solución general del problema de valores límite de desviaciones espaciales permite cerrar la ecuación escalada de difusión de neutrones, que incorpora nuevos términos con respecto a la ecuación estándar (difusión normal). Mientras tanto, las soluciones particulares de las desviaciones espaciales permiten la estimación numérica del coeficiente escalado de difusión e interfacial neutrónico. Los dominios geométricos en los que se calcularon numéricamente los coeficientes escalados incluyen celdas unitarias 2D y 3D, que son geometrías representativas de dos tipos de reactores nucleares: ensambles de combustible convencionales con barras de combustible y ensambles de combustibles esféricos. Las estimaciones numéricas se ajustaron a una expresión analítica en función del tiempo. En este

trabajo se presenta y discute la solución numérica del modelo escalado y la comparación con los resultados de simulaciones numéricas directas.

El coeficiente de difusión de neutrones esta dado por:

$$D_\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r})} \quad (3.1)$$

donde la sección eficaz de neutrones está dada por $\Sigma_{tr}(\mathbf{r}) = \Sigma_t(\mathbf{r}) - \bar{\mu}_0\Sigma_s(\mathbf{r})$, siendo $\bar{\mu}_0$ el coseno del ángulo promedio de dispersión.

En los reactores nucleares el análisis de transitorios y seguridad adquiere especial relevancia, incluso en una maniobra de operación del reactor (por ejemplo, cambios de potencia), la escala de tiempo tiene órdenes de magnitud que van desde segundos hasta minutos. En esta escala de tiempo el coeficiente de difusión de neutrones es independiente del tiempo desde un punto de vista práctico $D_\gamma \neq f(t)$, que en este trabajo podemos establecer como *escala de tiempo normal*. Otra escala de tiempo considera el quemado y el agotamiento del combustible nuclear donde, en general, el coeficiente de difusión es función del tiempo $D_\gamma = f(t)$ con el objetivo de predecir los cambios a largo plazo en la composición del combustible del reactor causados por la exposición al flujo de neutrones durante la operación del reactor; en este caso $\Sigma_{a\gamma}(\mathbf{r}) = f(t)$ así como $\Sigma_{tr}(\mathbf{r})$. La escala temporal de los cambios a largo plazo va desde horas hasta días, incluso semanas y meses, por lo que en este trabajo podemos llamarla *escala temporal larga*. En este capítulo se explora la dependencia temporal de los coeficientes de difusión e interfase neutrónica en reactores nucleares $D_\gamma = f(t)$, en una escala de tiempo corta, aplicando el procedimiento de escalamiento expuesto en el **Capítulo 1**. El orden de magnitud de la *escala de tiempo corta* es de milésimas a centésimas, incluidas décimas de segundo, es decir, es menor que la *escala de tiempo normal* y mucho menor que la *escala de tiempo larga*.

3.2. Características del modelo escalado

El punto de partida es el modelo escalado de difusión de neutrones y su derivación matemática se presentó en el **Capítulo 2**.

$$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \langle S_\gamma \rangle^\gamma + \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma) - \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (3.2)$$

Representa el comportamiento del flujo de neutrones a gran escala cuyo orden de magnitud es el del conjunto combustible, es decir, de varios centímetros. El primer término de la derecha representa los neutrones que se dispersan desde el combustible nuclear en el refrigerante o moderador incluyendo instantáneos y diferidos, el segundo término estrictamente es de difusión de neutrones siendo su interpretación escape de neutrones a escala del reactor, el tercer término es la absorción de neutrones y el último término representa la fuga de neutrones en la interfaz $-\gamma\sigma$.

En esta ecuación, $\tilde{\phi}_\gamma$ son las desviaciones espaciales del flujo neutrónico alrededor de la cantidad escalada $\langle\phi_\gamma\rangle^\gamma$ de la variable local ϕ_γ , *i.e.*, la variable local tiene dos contribuciones:

$$\phi_\gamma = \tilde{\phi}_\gamma + \langle\phi_\gamma\rangle^\gamma \quad (3.3)$$

El siguiente paso consiste en construir soluciones analíticas de $\tilde{\phi}_\gamma$.

3.3. Desviaciones espaciales dependiente en el tiempo

Se puede demostrar que si restamos el modelo escalado en la ecuación local de difusión de neutrones (ver **Capítulo 2**), se obtiene:

$$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \tilde{\phi}_\gamma}{\partial t} = -\Sigma_{a\gamma} \tilde{\phi}_\gamma + \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma) + \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma dA \quad (3.4)$$

Con las condiciones de frontera la interfaz $-\gamma\sigma$:

$$\tilde{\phi}_\gamma = \phi_\sigma - \langle\phi_\gamma\rangle^\gamma \quad (3.5)$$

$$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \tilde{\phi}_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \left(\nabla \langle\phi_\gamma\rangle^\gamma + \frac{\mathbf{J}_\sigma}{D_\gamma} \right) \quad (3.6)$$

Una rápida inspección de las ecuaciones gobernantes para las desviaciones espaciales (3.4)-(3.6) nos permitirá identificar dos términos con pequeñas variaciones de tiempo y espacio ya que están escritos en términos de cantidades escaladas y macroscópicas; estos son los términos $(\phi_\sigma - \langle\phi_\gamma\rangle^\gamma)$ y $\left[\nabla \langle\phi_\gamma\rangle^\gamma + \frac{\mathbf{J}_\sigma}{D_\gamma} \right]$ cuya dinámica

estará determinada por el comportamiento del reactor nuclear y representan fuentes en la macroescala. Estas características se pueden aprovechar y luego considerar dichos términos como constantes en (3.4)-(3.6).

Ahora, observando que las ecuaciones anteriores son lineales, podemos proponer la solución como una superposición lineal de soluciones individuales para cada fuente en la macroescala en una forma separada, es decir,

$$\tilde{\phi}_\gamma(t, \mathbf{x}) = \mathbf{d}_\gamma(t, \mathbf{x}) \cdot \left(\nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{\mathbf{J}_\sigma}{D_\gamma} \right) + \zeta_\gamma(t, \mathbf{x}) (\phi_\sigma - \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma) + c_\gamma(t, \mathbf{x}) \quad (3.7)$$

Aquí \mathbf{d}_γ , ζ_γ y c_γ son coeficientes variables y representan las desviaciones espaciales cuando solo una fuente en la macroescala actúa a escala nuclear. Se puede demostrar que $c_\gamma(t, \mathbf{x}) = 0$.

En este punto, es necesario definir los dominios geométricos donde se calcularán numéricamente las desviaciones espaciales. En este trabajo, utilizaremos geometrías representativas (celdas) para dos tipos de microestructuras de reactores nucleares. Estas celdas representativas se esquematizan en la **Figura 3.1**.

La justificación para utilizar celdas simples es la suposición de que todo el reactor nuclear puede reproducirse completamente replicando las celdas adecuadamente en direcciones ortogonales. Por lo tanto, es conveniente imponer condiciones pe-

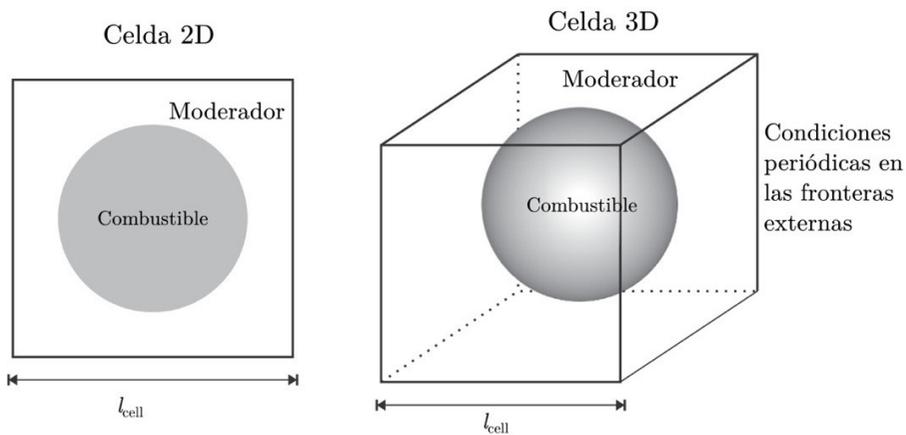


Figura 3.1. Celdas unitarias en 2D y 3D.

riódicas en los límites externos de las celdas evitando de esta manera la necesidad de conocer las condiciones de contorno en los límites de la macroescala de todo el reactor nuclear. Esto lleva a escribir en los límites externos de las celdas como:

$$\tilde{\phi}_\gamma(t, \mathbf{x}) = \tilde{\phi}_\gamma(t, \mathbf{x} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.8)$$

donde \mathbf{l}_i representa el vector para replicar la celda en la dirección $-i$.

Como ahora estamos empleando condiciones periódicas en los límites externos de las celdas, el problema de valores límite de las desviaciones se completa con la siguiente restricción de escalamiento que proporciona estabilidad a la solución numérica:

$$\langle \tilde{\phi}_\gamma \rangle^\gamma = 0 \quad (3.9)$$

Como condición inicial, parece intuitivo considerar que $\phi_{\gamma 0}$ es constante, entonces la condición inicial es:

$$\tilde{\phi}_\gamma = 0 \quad \text{en} \quad t = 0 \quad (3.10)$$

3.4. Problema de los valores límite para los coeficientes de solución

La sustitución de la solución dada por (3.7) en (3.4)-(3.6) conduce a problemas de valores límite para los coeficientes variables (**Tabla 3.1**).

Es importante destacar que los coeficientes \mathbf{d}_γ y ζ_γ de la solución de $\tilde{\phi}_\gamma$, presentan una dependencia en el tiempo, además de la dependencia espacial como se puede observar en el operador diferencial.

3.5. Coeficientes escalados dependientes del tiempo

Los coeficientes escalados se obtienen de los coeficientes de solución dada por (3.7) con los problemas límite se presentan en la **Tabla 3.1**, con esto se estiman los coeficientes que aparecen en la ecuación escalada dada por (2.40), a través de evaluar las ecuaciones integro-diferenciales (2.35), (2.36) y (2.37). Las variables

Tabla 3.1. Problema de los valores límite para \mathbf{d}_γ y ζ_γ

$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \mathbf{d}_\gamma}{\partial t} = -\Sigma_{a\gamma} \mathbf{d}_\gamma + \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \mathbf{d}_\gamma)$ $+ \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \mathbf{d}_\gamma dA$	$\frac{1}{v_n} \frac{\partial \zeta_\gamma}{\partial t} = -\Sigma_{a\gamma} \zeta_\gamma + \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \zeta_\gamma)$ $+ \frac{\varepsilon_\gamma^{-1}}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \zeta_\gamma dA$
$\mathbf{d}_\gamma = \mathbf{0}$, en la interfaz $-\gamma\sigma$	$\zeta_\gamma = 1$, en la interfaz $-\gamma\sigma$
$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \mathbf{d}_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\sigma}$, en la interfaz $-\gamma\sigma$	$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \nabla \zeta_\gamma = 0$, en la interfaz $-\gamma\sigma$
$\mathbf{d}_\gamma = \mathbf{0}$, en $t = 0$	$\zeta_\gamma = 0$, en $t = 0$
$\langle \mathbf{d}_\gamma \rangle^\gamma = \mathbf{0}$, Restricción de escalamiento	$\langle \zeta_\gamma \rangle^\gamma = 0$, restricción de escalamiento
$\mathbf{d}_\gamma(\mathbf{x} + l_i) = \mathbf{d}_\gamma(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, 3$ Periodicidad	$\zeta_\gamma(\mathbf{x} + l_i) = \zeta_\gamma(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, 3$ Periodicidad

y los coeficientes escalados se obtienen numéricamente usando un software comercial tipo CFD.

Para geometrías de celdas como las representadas en la **Figura 3.1**, calculamos la evolución temporal del *coeficiente de difusión escalado* y del *coeficiente interfacial neutrónico* como funciones de la tasa adimensional de absorción de neutrones:

$$\Phi = \frac{\Sigma_{a\gamma} l_{cell}^2}{D_\gamma} \quad (3.11)$$

y el tiempo adimensional:

$$\tau = \frac{v_n D_\gamma}{l_{cell}^2} t \quad (3.12)$$

La longitud de la celda unitaria l_{cell} se ilustra en la **Figura 3.1**.

Como se muestra en las **Figuras 3.2** y **3.3** para la celda unitaria 2D y 3D, respectivamente. El *coeficiente interfacial neutrónico* tiene el valor máximo en los primeros tiempos y finalmente alcanza el estado estable.

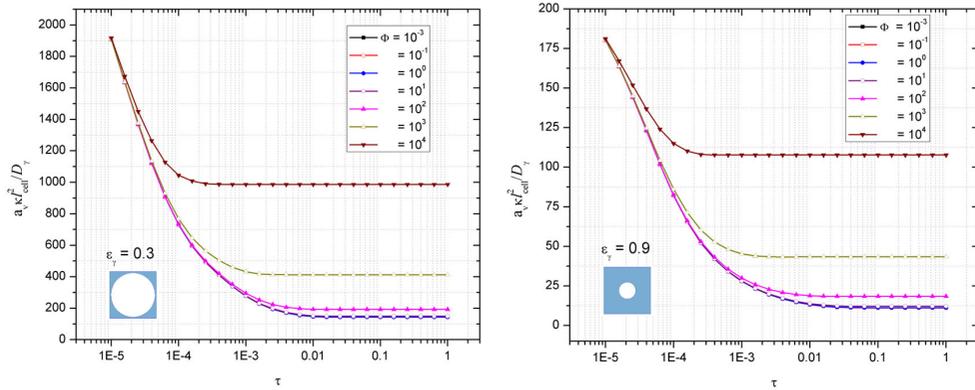


Figura 3.2. Coeficiente interfacial neutrónico. Celda 2D para $\varepsilon_\gamma = 0.3$ y $\varepsilon_\gamma = 0.9$.

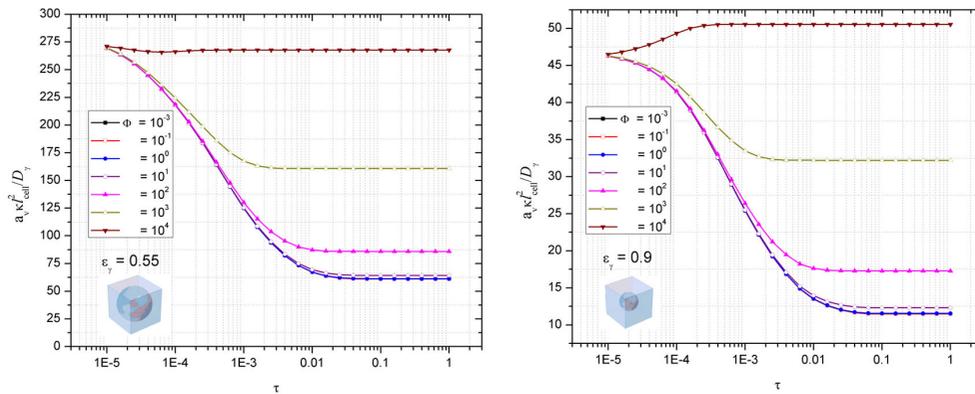


Figura 3.3. Coeficiente interfacial neutrónico. Celda 3D para $\varepsilon_\gamma = 0.55$ y $\varepsilon_\gamma = 0.9$.

El tiempo para alcanzar el estado estable depende de la tasa de absorción de neutrones en el moderador. La tendencia general indica que el estado estable se logra en tiempos más cortos para valores crecientes de Φ . Los valores máximos (iniciales) y de estado estable de κ aumentan cuando aumenta Φ y para pequeñas fracciones de volumen del moderador. Se observó que el uso de celdas 3D también disminuye la estimación del *coeficiente interfacial neutrónico*, lo que indica que el uso de barras nucleares (*pins*) en reactores nucleares favorece el escape de neutrones. En general, se encontró que el coeficiente $a_\nu \kappa$ tiene valores mayores para aquellos escenarios donde menos neutrones viajan a través del moderador.

Uno de estos escenarios ocurre en los primeros tiempos considerando que al comienzo de la operación del reactor el moderador contacta por primera vez las partículas de combustible. Además, las altas tasas de absorción de neutrones disminuyen la cantidad de neutrones que se mueven en el moderador y se obtienen las mismas conclusiones cuando ocurre una dispersión deficiente de neutrones, por ejemplo, cuando se utilizan barras de combustible en lugar de partículas esféricas de combustible.

El cálculo numérico del componente longitudinal del *tensor de difusión efectivo* se presenta en las **Figuras 3.4 y 3.5**, para 2D y 3D, respectivamente. Este coeficien-

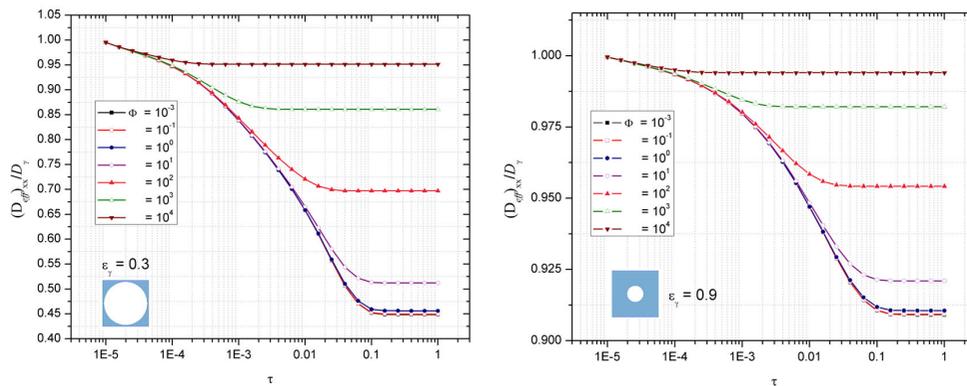


Figura 3.4. Coeficiente escalado de difusión de neutrones. Celda 2D para $\epsilon_\gamma = 0.3$ y $\epsilon_\gamma = 0.9$.

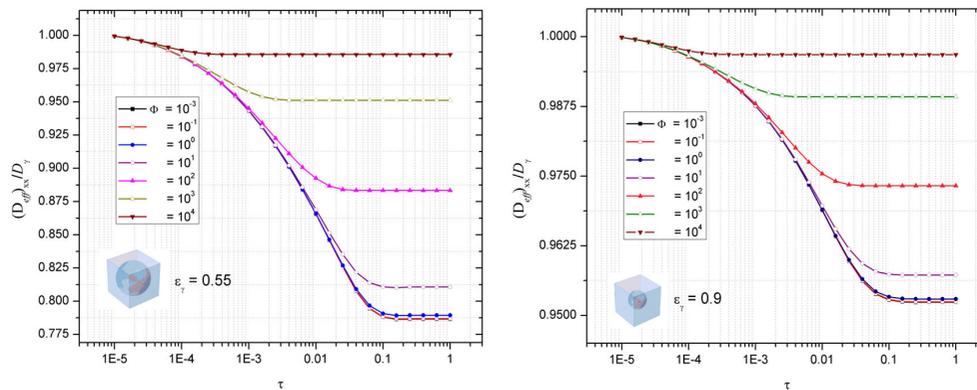


Figura 3.5. Coeficiente escalado de difusión de neutrones. Celda 3D para $\epsilon_\gamma = 0.55$ y $\epsilon_\gamma = 0.9$.

te tiene un comportamiento similar al coeficiente $a_v\kappa$. El valor máximo se produce en tiempos tempranos, aunque en este caso el valor máximo está limitado por el coeficiente de difusividad D_γ . Finalmente, se observa una disminución exponencial única y se alcanza el valor de estado estable antes $\tau = 1$.

Se observa que el estado estacionario se alcanza en tiempos más cortos a medida que aumenta la tasa de absorción de neutrones. El análisis muestra que este coeficiente tiene un comportamiento similar al coeficiente $a_v\kappa$. El valor máximo se produce en tiempos cortos, aunque en este caso el valor máximo está limitado por el coeficiente de difusividad D_γ . Finalmente, se observa una disminución exponencial única y se alcanza el valor de estado estable antes que $\tau = 1$, además la *difusividad escalada* mejora cuando se encuentran pocos obstáculos físicos en la trayectoria del neutrón, *i.e.*, $\varepsilon_\gamma \rightarrow 1$ para partículas esféricas de combustible, donde se producen gradientes de densidad de neutrones locales más grandes en el moderador en tiempos tempranos y altas tasas de absorción de neutrones.

3.6. Correlaciones empíricas

Con el objetivo de facilitar la aplicabilidad de los coeficientes escalados estimados, se desarrollaron correlaciones empíricas, de la forma:

$$\left. \begin{array}{l} \frac{a_v\kappa l_{cell}^2}{D_\gamma} \\ (D_{eff})_{xx} \\ \frac{(D_{eff})_{xx}}{D_\gamma} \end{array} \right\} = a(1 - e^{-b\tau})^c \quad (3.13)$$

Los parámetros de ajuste a , b y c se presentan en las **Tablas 3.2** y **3.3** para cada coeficiente escalado y en función de la tasa de absorción de neutrones adimensional, la fracción de volumen del moderador y la dimensionalidad de la celda empleada para la solución.

En general, este modelo se ajusta bien en la mayoría de los casos excepto el coeficiente $a_v\kappa$ para celdas 3D con $\Phi = 10000$ y $\varepsilon_\gamma = 0.55, 0.9$.

Tabla 3.2. Parámetros de ajuste para $a_v \kappa$ en términos de Φ y ε_γ

$\frac{a_v \kappa l_{cell}^2}{D_\gamma}$		Cálculos 2D							
		$\varepsilon_\gamma = 0.3$				$\varepsilon_\gamma = 0.9$			
Φ		a	b	c	R^2	a	b	c	R^2
		0.001		140.21672	200.37894	-0.42424	0.99880	10.47666	54.53353
0.1		140.27581	200.56604	-0.42423	0.99880	10.48729	54.66611	-0.38779	0.99141
1		140.81194	202.26824	-0.42419	0.99880	10.58326	55.87121	-0.38769	0.99141
10		146.07471	219.41282	-0.42379	0.99882	11.48918	67.98297	-0.38677	0.99144
100		191.00869	399.30708	-0.42080	0.99889	17.82624	191.38798	-0.37981	0.99170
1000		411.98126	2307.4210	-0.41036	0.99889	42.86933	1413.6962	-0.34768	0.99310
10000		985.93571	17815.090	-0.37049	0.99935	107.5367	12402.734	-0.24903	0.99714

$\frac{a_v \kappa l_{cell}^2}{D_\gamma}$		Cálculos 3D							
		$\varepsilon_\gamma = 0.55$				$\varepsilon_\gamma = 0.9$			
Φ		a	b	c	R^2	a	b	c	R^2
		0.001		58.36082	16.54401	-0.18868	0.96613	10.80937	6.89145
0.1		58.41088	16.56261	-0.18848	0.96615	10.83091	6.98163	-0.16648	0.94551
1		58.68369	16.86719	-0.18843	0.96623	10.90100	7.12602	-0.16624	0.94561
10		61.77517	20.17427	-0.18605	0.96711	11.73962	9.52417	-0.16301	0.94682
100		84.06202	58.70019	-0.16887	0.97293	16.90831	37.2498	-0.14177	0.95399
1000		160.0617	634.6369	-0.11066	0.98778	32.08386	413.5379	-0.07514	0.97068
10000		267.7182	3.39×10^8	7019.77	-0.08696	49.85988	2.32×10^8	-303915	-0.08696

Tabla 3.3. Parámetros de ajuste para $(D_{eff})_{xx}$ en términos de Φ y ε_γ

$\frac{(D_{eff})_{xx}}{D_\gamma}$	Cálculos 2D							
	$\varepsilon_\gamma = 0.3$				$\varepsilon_\gamma = 0.9$			
	Φ	a	b	c	R^2	a	b	c
0.001	0.22400	1.8168×10^{-4}	-0.07908	0.92215	0.90042	1.11893	-0.01055	0.93492
0.1	0.25132	7.5958×10^{-4}	-0.07897	0.92240	0.90067	1.13704	-0.01054	0.93504
1	0.23385	2.4314×10^{-4}	-0.07795	0.92457	0.90294	1.32128	-0.01043	0.93601
10	0.43851	0.24706	-0.06970	0.94015	0.91739	3.09372	-0.00954	0.94383
100	0.69292	25.96031	-0.04853	0.97242	0.95347	25.6934	-0.00645	0.96849
1000	0.86016	509.39939	-0.02941	0.98963	0.98197	485.0454	-0.00354	0.99186
10000	0.95129	10182.8470	-0.01926	0.99979	0.99400	10826.627	-0.00244	0.99998

$\frac{(D_{eff})_{xx}}{D_\gamma}$	Cálculos 3D							
	$\varepsilon_\gamma = 0.55$				$\varepsilon_\gamma = 0.9$			
	Φ	a	b	c	R^2	a	b	c
0.001	0.77130	1.55053	-0.02677	0.94359	0.95038	3.49286	-0.00574	0.94931
0.1	0.77176	1.57160	-0.02674	0.94370	0.95045	3.51443	-0.00574	0.94939
1	0.77573	1.76750	-0.02651	0.94461	0.95107	3.71371	-0.00569	0.94993
10	0.80336	3.72148	-0.02456	0.95192	0.95595	5.71484	-0.00533	0.95460
100	0.88163	30.93749	-0.01762	0.97201	0.97288	31.45688	-0.00387	0.97234
1000	0.95084	496.24955	-0.01036	0.98715	0.98916	505.95767	-0.00224	0.98881
10000	0.98550	7545.4485	-0.00565	0.99522	0.99678	7805.1759	-0.00127	0.99502

3.7. Modelo escalado vs simulación numérica directa

En esta sección presentamos la solución numérica del modelo escalado dado por (2.40), con el fin de compararlo con la simulación numérica directa (SND) de un caso sintético que consiste en una matriz unidimensional de 20 *pin*s de combustible como se muestra en la **Figura 3.6**.

El procedimiento aplicado es el siguiente:

P1. El problema transitorio puntual de difusión de neutrones dado por ecuaciones (2.1)-(2.5) (ver **Capítulo 2**), se resuelve numéricamente en el dominio representado en la **Figura 3.6**, y luego se calcula el escalamiento intrínseco de ϕ_γ alrededor de cada partícula de combustible, esto se denomina escalamiento intrínseco de SND.

P2. La ecuación escalada de difusión de neutrones dada por (2.40) se resuelve numéricamente en una geometría 1D con la misma longitud que el modelo SND. La ecuación escalada se resuelve utilizando coeficientes escalados transitorios y de estado estable, para cualquier valor de $\tau > 1$.

P3. Se comparan ambas soluciones numéricas. A partir de las simulaciones, se encontró la comparación en torno a un *pin* de combustible es suficiente, ya que la fuente de neutrones está distribuida de manera uniforme y las condiciones de contorno externo no afecta la solución numérica.

En la **Figura 3.7** se presenta un caso de solución numérica de la SND.

La comparación entre las soluciones numéricas de la SND y del modelo escalado se presenta para cuatro casos en la **Figura 3.8**.

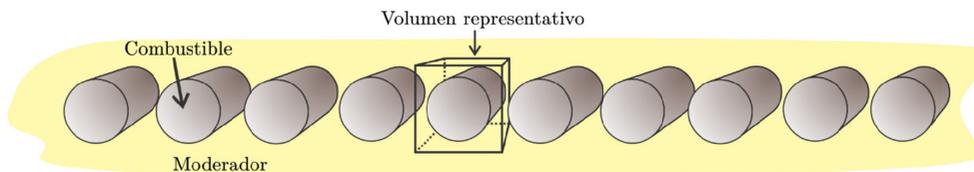


Figura 3.6. Geometría empleada para realizar simulación numérica directa.

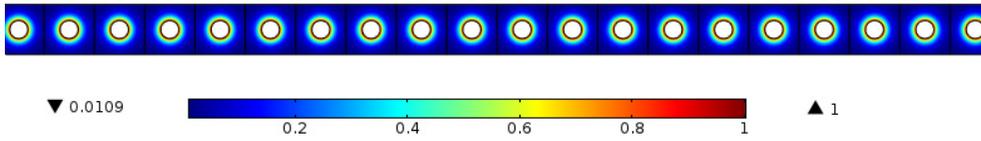


Figura 3.7. Solución numérica de $\phi_\gamma / \phi_\sigma$ para la SND para $\tau = 1$, $\varepsilon_\gamma = 0.9$ y $\Phi = 100$.

Los resultados demuestran que el uso de coeficientes efectivos de estado estable, en general, produce una buena concordancia cuando se cumplen las condiciones estacionarias. Sin embargo, esta teoría falla en los primeros tiempos y las desviaciones de la solución de la SND *real* aumentan cuando aumenta la tasa de absorción de neutrones. La ecuación escalada de difusión con coeficientes escalados transitorios concuerda bien con la solución SND en tiempos intermedios (aproximadamente $1 \times 10^{-4} < \tau < 0.001$) y sigue más de cerca la solución SND en

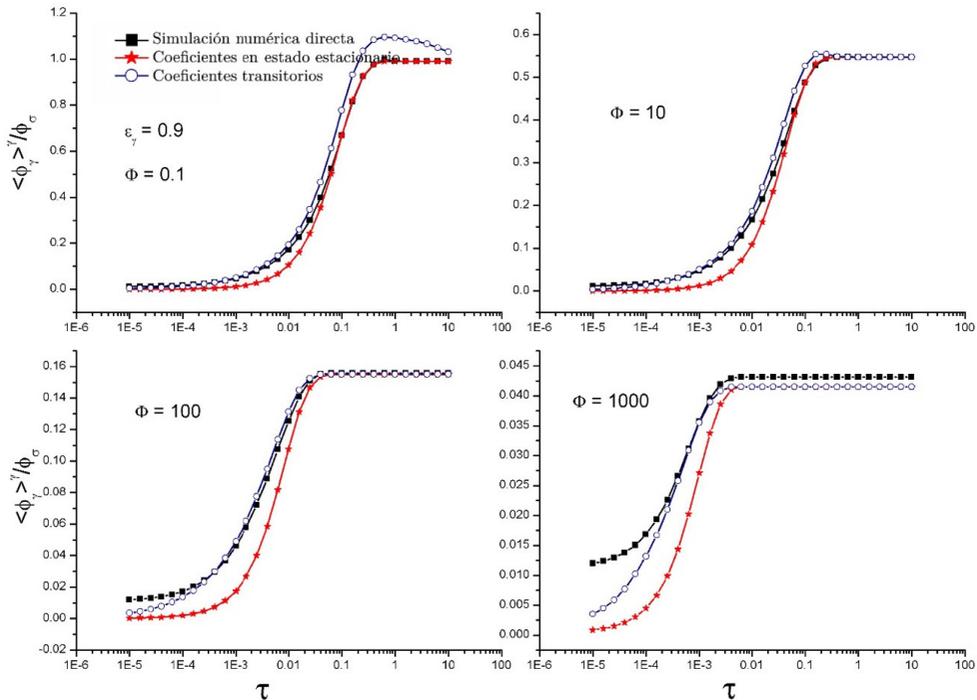


Figura 3.8. Comparación del modelo escalado con la SND, para $\varepsilon_\gamma = 0.9$ y diferentes tasas de absorción de neutrones.

los primeros tiempos en comparación con el enfoque de coeficientes de estado estable. Sin embargo, se observa que valores bajos de Φ , el uso de coeficientes transitorios sobreestima la solución numérica cuando se aproxima al estado estacionario.

COEFICIENTE DE DIFUSIÓN DE NEUTRONES CON PARTÍCULAS DESORDENADAS

4.1. Preliminares

El objetivo de este capítulo es el análisis del coeficiente de difusión de neutrones con una aproximación tridimensional de partículas TRISO ordenadas y desordenadas del modelo escalado de difusión de neutrones. Para ello, calculamos los coeficientes de difusión escalada y de flujo neutrónico interfacial en celdas representativas de elementos combustibles compuestos por varias partículas TRISO colocadas aleatoriamente. El conjunto de 700 realizaciones muestra más variaciones en la estimación numérica del coeficiente de flujo neutrónico interfacial que para el coeficiente de difusión escalada. La suposición de una disposición ordenada de partículas TRISO dentro de la partícula combustible es suficiente para la estimación del *coeficiente de difusión escalado*. Una comparación del modelo escalado con coeficientes escalados calculados a partir de disposiciones desordenadas, con soluciones analíticas para difusión de neutrones unidireccional demuestra que la teoría de difusión clásica y la ecuación de Boltzmann producen predicciones similares para tiempos largos y materiales altamente o poco absorbentes.

El trabajo de Espinosa-Paredes y Aguilar-Madera (2018) ilustra la aplicación de dicho método de escalamiento para desarrollar una ecuación de difusión de neutrones a mayor escala para matrices periódicas 2D de combustibles cilíndricos en BWR. Siguiendo la misma metodología de escalamiento, se exploraron los efectos transitorios en los coeficientes efectivos para reactores modulares de lecho de esferas (PBMR) y BWR en dominios 3D y 2D respectivamente, presentado en el **Capítulo 3** de este libro.

El modelo escalado directo está dado por (2.40) y los coeficientes escalados $\alpha_v, \kappa, \mathbf{D}_{eff}$ y \mathbf{W} por (2.35), (2.36) y (2.37), respectivamente. La derivación matemática de estas ecuaciones se presenta en el **Capítulo 2**. Recordemos que el primer término del lado derecho de (2.40) es la fuente neutrónica homogeneizada, que debe interpretarse como los neutrones que se dispersan en el moderador desde el combustible. El segundo término es la tasa de absorción de neutrones, el tercer término es el intercambio neutrónico entre el moderador y las partículas de combustible, el cuarto término es la difusión escalada de neutrones debido a los gradientes espaciales en el moderador, y el último término cuantifica la difusión de neutrones debido a los gradientes espaciales en las partículas de combustible. Los coeficientes definidos por (2.35)-(2.37) están asociados a la física a escala de elemento-combustible.

El tensor de difusión escalado \mathbf{D}_{eff} en principio considera el transporte de neutrones a través de los caminos tortuosos del grafito que rodea las partículas de combustible TRISO, cuya fuerza impulsora es el gradiente escalado del flujo de neutrones en el grafito. El tensor \mathbf{W} es similar a \mathbf{D}_{eff} pero con la diferencia de que su fuerza impulsora es el gradiente escalado del flujo de neutrones dentro de las partículas de combustible. El coeficiente κ cuantifica el flujo de neutrones que pasa de las partículas de combustible hacia el entorno, y α_v es la densidad de área interfacial.

Para determinar los coeficientes escalados dados por (2.35) y (2.36), es necesario estimar los coeficientes variables ζ y \mathbf{d} que están relacionados con las desviaciones espaciales del flujo neutrónico. Estos coeficientes se obtienen con los problemas de valores a la frontera que se presentan en la **Tabla 2.1 (Capítulo 2)**. Debido a la naturaleza del problema se utiliza una geometría 3D para la celda representativa y la solución numérica se obtuvo para diferentes arreglos ordenados y desordenados de partículas TRISO, en celda representativa cúbica.

Para mantener la generalidad de los resultados en las siguientes secciones, definimos convenientemente el número adimensional relativo al área de difusión de neutrones,

$$\Phi = \frac{l_{cell}^2}{L_\gamma^2} \quad (4.1)$$

donde L_γ es la longitud de difusión de neutrones:

$$L_\gamma = \sqrt{\frac{D_\gamma}{\Sigma_{a\gamma}}} \quad (4.2)$$

4.2. Número de partículas TRISO en la celda

Los problemas de valores a la frontera de ζ_γ y \mathbf{d}_γ presentados en la **Tabla 2.1** del **Capítulo 2** se resuelven en una celda representativa, que están compuestos por arreglos 3D de partículas esféricas colocadas aleatoriamente en una celda cúbica.

En este enfoque, surge una pregunta natural sobre el número de partículas TRISO que se deben utilizar para la estimación numérica de los coeficientes escalados. Después de explorar las variaciones de los coeficientes escalados con el número de partículas TRISO, encontramos que 27 partículas (un arreglo de $3 \times 3 \times 3$ partículas) producen una consistencia razonable de los resultados, en particular para el coeficiente escalado difusión neutrónica. Más de 27 partículas requiere más recursos computacionales y los resultados numéricos no cambian significativamente. En esta parte enfatizamos que cada problema de valores a la frontera de los coeficientes variables ζ_γ y \mathbf{d}_γ en 3D se resuelve al menos 500 veces y se debe asegurar la independencia de los resultados con el tamaño de malla.

De esta manera, la **Figura 4.1** muestra el efecto del número de partículas sobre los coeficientes escalados; *difusión neutrónica* (izquierda) e intercambio neutrónico (derecha). En esta figura, comparamos los coeficientes estimados con 8 (estrella), 18 (círculo vacío) y 27 (cruz) partículas TRISO dentro del volumen representativo. En ambos casos, el número de partículas tiene un efecto notable en los coeficientes escalados $\Phi < 100$, sin embargo, dicho efecto es dominante en el coeficiente de intercambio neutrónico. Como la mayoría de los casos de aplicación se encuentran en dicho intervalo, enfatizamos que se debe tener cuidado en la zona de mayor variabilidad. En este sentido, confirmamos que 27 partículas son una opción adecuada, ya que el valor medio y su incertidumbre permanecen invariantes.

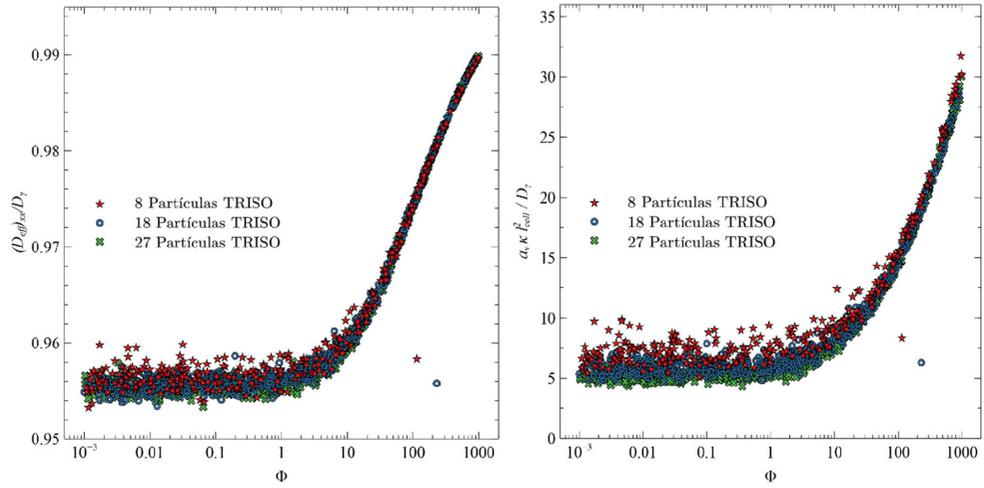


Figura 4.1. Efecto del número de partículas sobre los coeficientes: (Izq.) Difusión de neutrones y (Der.) Intercambio de neutrones.

Esto es evidente al comparar los casos de 18 y 27 partículas en la **Figura 4.2**, donde analizamos cómo cambian el valor medio y la barra de dispersión si el número de partículas aumenta para valores fijos de Φ .

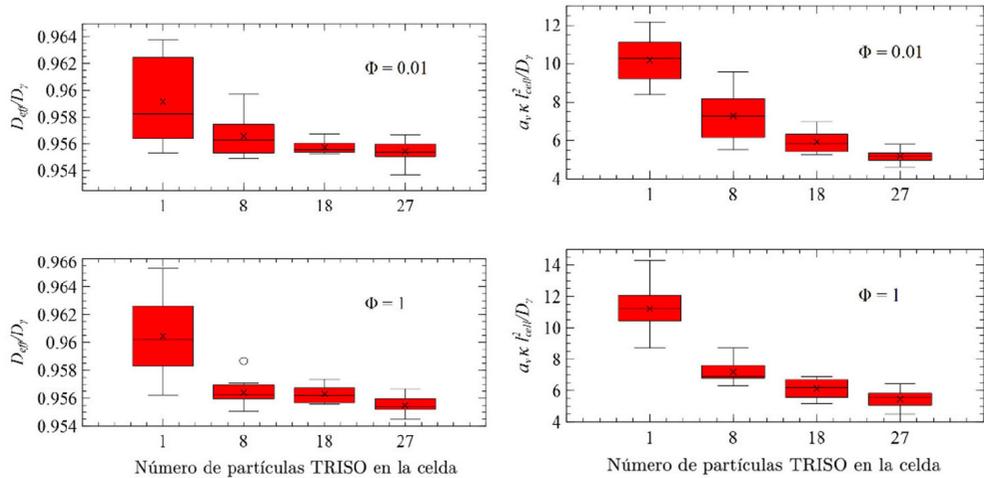


Figura 4.2. Efecto del número de partículas sobre los coeficientes escalados para valores fijos de Φ . (Izq.) Difusión neutrónica y (Der.) Intercambio neutrónico.

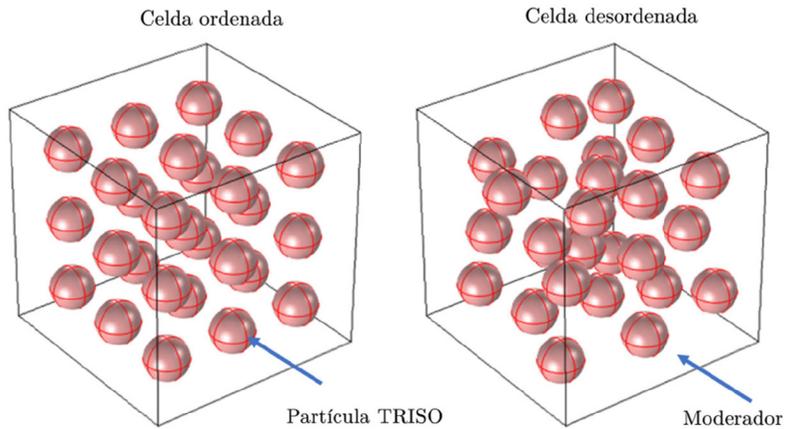


Figura 4.3. Matrices ordenadas y desordenadas de 27 partículas TRISO ($\varepsilon_\gamma = 0.9$).

Nótese que para un valor fijo de la variabilidad de los coeficientes se reduce a medida que aumenta el número de partículas. Esto se mantiene independientemente del valor de Φ . En esta figura se despliega 1.5 veces el rango intercuartil, donde la cruz es la mediana y la línea horizontal dentro del cuadro rojo representa el valor medio.

En la **Figura 4.3**, presentamos dos conjuntos diferentes de partículas TRISO, que intentan representar la agrupación dentro del elemento combustible.

Para fines de comparación, definimos una agrupación ordenada que no es realista, ya que las partículas TRISO se dispersan aleatoriamente en la matriz de grafito. Por otro lado, también presentamos una agrupación desordenada, que es más realista y coherente con la forma en que las partículas TRISO se acomodan en la matriz de grafito.

4.3. Coeficientes de solución de las desviaciones espaciales

Después de definir estas disposiciones para representar la distribución de partículas en el elemento combustible, se debe realizar la evaluación en una celda representativa los coeficientes escalados \mathbf{D}_{eff} y $a_v\kappa$ a través de resolver los problemas de valores iniciales de ζ_γ y \mathbf{d}_γ presentados en la **Tabla 2.1** (ver **Capítulo 2**), en la celda representativa. En el caso de la disposición ordenada, se supone una

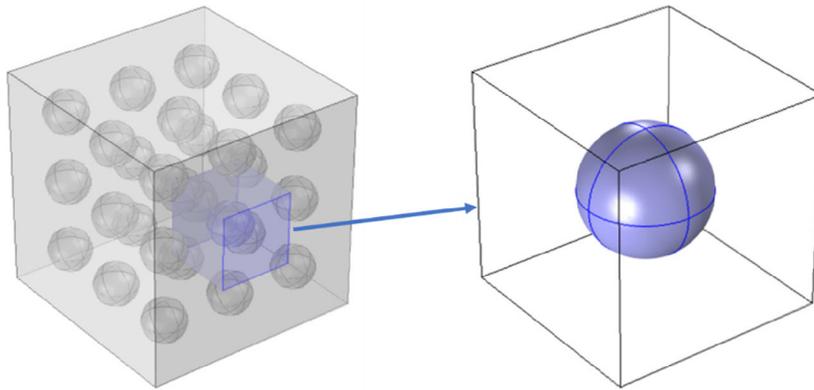


Figura 4.4. Una celda simple para simular la agrupación ordenada de partículas.

disposición regular y periódica de las partículas de combustible, de modo que la definición de la celda escalada es bastante directa y, luego, se puede utilizar una partícula esférica simple dentro de un cubo, como se ilustra en la **Figura 4.4**.

Sin embargo, en el caso de una disposición desordenada, existen infinitas formas de definir la celda, de modo que las variaciones geométricas debidas a las posiciones de las partículas TRISO pueden inducir incertidumbre que debe incorporarse al cálculo del coeficiente efectivo. Esto implica que la configuración desordenada convierte la solución del problema de valores límite en un proceso estocástico y que el promedio del conjunto acompañado de la varianza debe considerarse para los coeficientes escalados.

En la **Figura 4.5** se muestra la nodalización empleada para la solución numérica de los problemas de valores límite en la matriz desordenada de partículas TRISO. Los coeficientes escalados obtenidos son independientes del tamaño de malla, es decir para un número mayor de elementos, los cálculos obtenidos prácticamente no cambian.

Un ejemplo de soluciones de campo de coeficientes variables en medios desordenados se muestra en la **Figuras 4.6** para $\Phi = 1$. Aquí debe destacarse que la configuración de las partículas TRISO se realizó aleatoriamente por colocación del centro de las partículas obedeciendo a una distribución de probabilidad uniforme. En estas figuras, la componente $-x$ del coeficiente variable \mathbf{d} fue normalizado respecto a la longitud de la celda l_{cell} . La longitud de la celda se refiere al

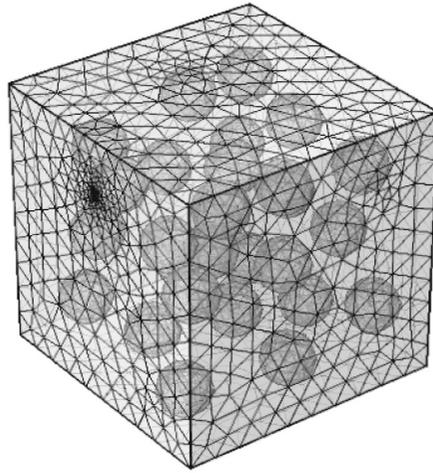


Figura 4.5. Malla para una celda con 27 partículas TRISO: 29883 elementos de dominio (tetraédricos), 6162 elementos de límite y 1116 elementos de arista.

tamaño de un dominio representativo a escala de combustible, y puede repetirse periódicamente en cada dirección, y eventualmente los detalles geométricos de todos los elementos de combustible del PBMR pueden reproducirse, dentro de cierto grado de aceptación. Para el arreglo ordenado de partículas, la longitud de la celda coincide con la distancia entre los centros de las partículas, y para el arreglo desordenado de partículas, la identificación de l_{cell} es menos claro y parece más apropiado que sea el tamaño de paso nominal.

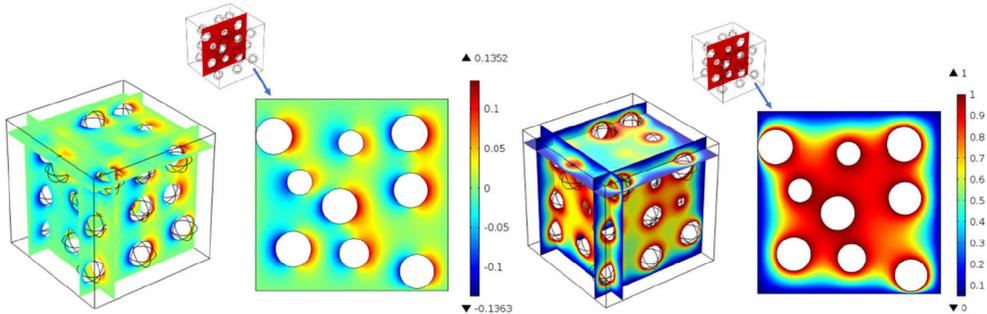


Figura 4.6. Celda desordenada con 27 TRISO para $\Phi = 1$ y $\varepsilon_\gamma = 0.9$.
Izq.) Coeficiente variable $(d)_x/l_{cell}$ y Der.) Coeficiente variable ζ .

La solución de ζ es simétrica alrededor de las partículas TRISO para cualquier plano de corte. El elemento x de \mathbf{d} es simétrico para cualquier plano orientado a lo largo de la coordenada $-x$ y que corta el centro de las partículas, siendo antisimétrico para planos ortogonales a la coordenada. De hecho, la condición de simetría (y antisimétrica para otros planos de corte) es aplicable para cada componente del vector \mathbf{d} . Finalmente, es importante destacar que la solución del campo alrededor de cualquier partícula está fuertemente influenciada por el campo de solución de las partículas vecinas.

4.4. Estimación numérica de los coeficientes escalados

Como se mencionó anteriormente, para incorporar el efecto de la variabilidad en la distribución de partículas espaciales, que presumiblemente están empaquetadas aleatoriamente en la matriz de grafito, definimos una metodología para evaluar los coeficientes efectivos en términos del área adimensional de difusión de neutrones (Φ) para muchas realizaciones de configuraciones de partículas, y luego promediamos el conjunto para obtener valores representativos.

En primer lugar, definimos la celda de promediado y el número de partículas TRISO dentro de ella. Suponiendo que todas las partículas tienen el mismo tamaño, descubrimos que 27 partículas dispersas aleatoriamente en la celda representativa con dimensiones seleccionadas adecuadamente es un número apropiado. Se permite que la posición de cada partícula cambie aleatoriamente siempre que no haya partículas superpuestas. Una vez que se definen las posiciones de todas las partículas, resolvemos el problema de cierre para obtener las soluciones de campo para cada coeficiente variable.

A partir de las soluciones de campo de los problemas de valores límite (**Tabla 2.1**), calculamos los coeficientes escalados para esa configuración particular de partículas dispersas aleatoriamente. Este procedimiento se repite muchas veces hasta que se puede esbozar una representación confiable de los coeficientes escalados. Para generar los resultados se repite el procedimiento mencionado anteriormente 700 veces.

La **Figura 4.7** muestra el efecto del parámetro Φ sobre el coeficiente de difusión escalado, y sobre el flujo de neutrones interfacial $a_v\kappa$ pasando de la partícula TRISO de combustible a la matriz de grafito.

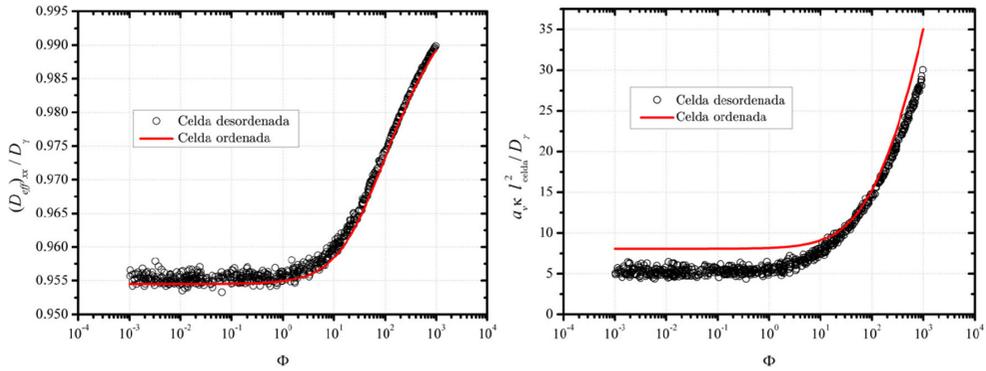


Figura 4.7. Izq.) Coeficiente de difusión escalado y Der.) Flujo de neutrones interfacial. La línea continua (roja) caso ordenado y los círculos negros vacíos casos desordenados.

Comparando los resultados del coeficiente escalado de difusión neutrónica, es evidente que tanto el caso ordenado como el desordenado tienen el mismo comportamiento cualitativo porque el intervalo de variación para este parámetro es menor al 1%.

El uso de la representación ordenada es confiable, ya que, en la mayoría de los casos, se encuentra dentro del intervalo de confianza del caso desordenado, como se ilustra en la **Figura 4.8**. Sin embargo, el uso de la celda simple podría no ser preciso en el cálculo de $a_\nu \kappa$.

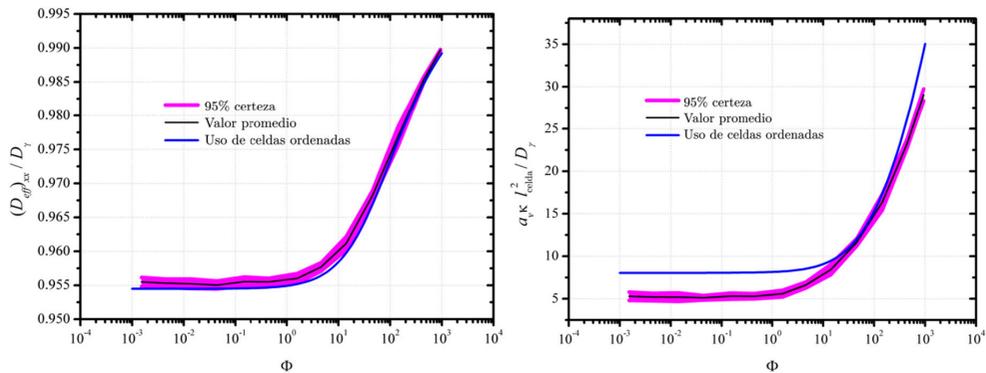


Figura 4.8. Valores promedio. Izq.) $(D_{eff})_{xx} / D_\gamma$ y Der.) $a_\nu \kappa l_{cell}^2 / D_\gamma$. Intervalo de confianza del 95 [%] para 700 experimentos numéricos.

La disposición desordenada de partículas favorece la difusión efectiva de neutrones y este efecto es más notorio para valores $\Phi < 100$. Mientras el área adimensional para la dispersión de neutrones aumenta, ambas configuraciones geométricas (ordenada y desordenada) producen predicciones similares.

El efecto de las incertidumbres vinculadas a la distribución aleatoria de partículas es más relevante para valores de $\Phi < 15$. En el caso del flujo de neutrones interfacial, las predicciones con el modelo ordenado son bastante diferentes de las obtenidas con el desordenado, véanse las **Figuras 4.7 y 4.8**.

Existen diferencias importantes para $\Phi < 20$. Esto se puede ver claramente en la **Figura 4.8**, donde los intervalos de confianza están lejos de las predicciones para el caso ordenado. Esto significa que el uso de celdas ordenadas para calcular coeficientes escalados conduce a errores que no son despreciables en la evaluación del flujo de neutrones de todo el proceso.

Resumiendo, esta sección, corroboramos las afirmaciones mencionadas anteriormente; ambos coeficientes son sensibles a las incertidumbres inducidas por la dispersión aleatoria de partículas TRISO, y el efecto es más notorio a valores bajos del parámetro Φ . Se destaca que, por lo tanto, ambas configuraciones TRISO tienen una fracción de volumen de grafito similar, el caso desordenado produce una difusión de neutrones de hasta 8.5[%] más grandes que las partículas de combustible ordenadas cuando el área de difusión adimensional disminuye sustancialmente. Considerando el coeficiente interfacial neutrónico, se observa que ambas configuraciones geométricas arrojan estimaciones diferentes y difieren sustancialmente a medida que aumenta Φ . Dependiendo de los valores de Φ , se puede observar que para $\Phi < 50$ El coeficiente neutrónico es mayor para configuraciones desordenadas de partículas. El caso opuesto es cierto para $\Phi > 50$. También se observa que para $10 < \Phi < 100$ la estimación de $a_v \kappa$ es similar para ambos modelos de partículas TRISO. Destacamos que la disposición geométrica de las partículas de combustible juega un papel crucial en el comportamiento del transporte de neutrones.

4.5. Comparación con solución analítica

Con el fin de investigar las capacidades y la precisión de la ecuación escalada de difusión de neutrones, se compara la solución numérica para los coeficientes obtenidos del caso desordenado con soluciones analíticas de aproximación P1 de

la ecuación de Boltzmann para un caso de transporte de neutrones simplificado. Con este objetivo, se plantea un problema unidimensional de placa infinita con una fuente de neutrones delta independiente del tiempo [$S_\gamma = S_\gamma \delta(x)$] en el centro del dominio ($x = 0$) se introduce. La condición inicial se enuncia simplemente como: en $t = 0$, $\phi_\gamma(x, 0) = 0$. En este problema la única fuente de neutrones tiene lugar en $x = 0$ y además no hay partículas de combustible en el resto del dominio. En esta circunstancia, A partir de cálculos numéricos de coeficientes escalados, ideamos que la difusión $(D_{eff})_{xx} \rightarrow D_\gamma$, y el coeficiente de neutrón de la interfaz $a_v \kappa \rightarrow 0$. Sin embargo, estas tendencias no se mantienen cuando $x \rightarrow 0$ y los valores asociados de $(D_{eff})_{xx}$ y $a_v \kappa$ debe calcularse a partir del valor correspondiente de la fuente adimensional Φ . El parámetro Φ se calcula asumiendo el valor de $\Sigma_{a\gamma}$, un paso de *pin* de combustible l_{cell} de 1.2 a 1.7 [cm], y una difusividad normal como $D_\gamma = (3\Sigma_{t\gamma})^{-1}$.

En la **Figura 4.9** resumimos los resultados del flujo de neutrones en función de la posición espacial para el modelo escalado para el caso desordenado (curva

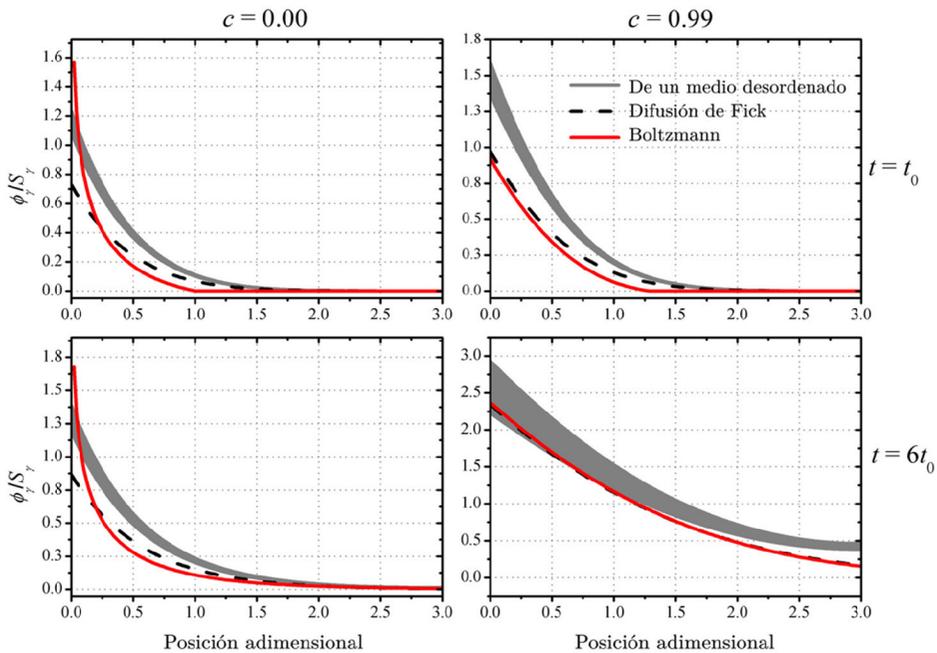


Figura 4.9. Flujo de neutrones en función de la posición para medios puramente absorbentes $c = 0.0$ (panel izquierdo) y para medios de alta dispersión $c = 0.99$ (panel derecho) para dos tiempos de simulación.

gris ancha), la ecuación de difusión clásica (curva discontinua) y la ecuación de Boltzmann (curva continua).

Resultados contrastantes para diferentes valores de c y t_0 , y asumiendo esas predicciones con el modelo desordenado como marco de referencia, se puede observar que las soluciones analíticas para el modelo de difusión clásico y el modelo de Boltzmann son una representación confiable del flujo de neutrones para medios poco absorbentes, $c = 0.0$, y solo asintóticamente para $\chi > 1.5$ y para cualquier valor de t . En este caso todas las soluciones tienden a la misma curva. Por otro lado, para medios muy absorbentes, $c = 0.99$, el flujo de neutrones calculado se encuentra dentro del intervalo de confianza solo para $\chi > 2.0$ en t_0 y para $\chi < 100$ cuando el tiempo es $6t_0$. Esto implica que las predicciones analíticas son confiables para largas distancias en tiempos cortos y para distancias cortas a medida que pasa el tiempo.

MODELO ESCALADO DE UN SFR

5.1. Escalamiento

En un reactor nuclear se producen simultáneamente diferentes fenómenos. En el núcleo del reactor, el proceso neutrónico derivado de la fisión está íntimamente ligado al proceso de transferencia de calor entre las barras de combustible y el refrigerante. El núcleo del reactor es heterogéneo y contiene muchos ensambles de combustible, y a su vez, cada conjunto contiene múltiples *pines* (barra) de combustible. El núcleo contiene diferentes zonas: enriquecimiento de combustible, barras de control y grafito. Una gran parte del esfuerzo para comprender la física de los reactores nucleares incluye el análisis de la interacción entre el combustible y el refrigerante. Algunos enfoques se basan en el análisis del núcleo del reactor considerando un subcanal (Todreas & Kazimi, 1990), que establece un canal representativo compuesto por una barra y el fluido que lo rodea. En este enfoque, se consideran las ecuaciones de balance de masa, cantidad de movimiento y la energía para la barra de combustible con sus propiedades individuales de los materiales. En el caso de los reactores rápidos refrigerados por metal líquido (LMFR), la metodología de análisis de subcanales se ha utilizado con frecuencia.

El análisis termohidráulico del combustible, incluida la interacción entre dos tipos diferentes de subcanales para reactores rápidos refrigerados por sodio (SFR). Sin embargo, los investigadores no consideraron los efectos de retroalimentación de los procesos neutrónicos. También se han analizado haces de barras de combustible en subcanales termohidráulico.

Además del enfoque de subcanal, el análisis de reactores nucleares se ha realizado mediante una aproximación de medio poroso, donde el combustible *pin* (fase sólida) se comporta como la matriz sólida mientras que el refrigerante (fase líquida o gas) llena el espacio poroso constituido por el espacio vacío entre los *pines* de combustible. No obstante, esto se puede realizar directamente con códigos tipo CFD donde las propiedades físicas son locales sin ninguna extensión a escala del reactor. La aproximación de medio poroso se ha utilizado en arreglos hexagonales de combustible, incorporando un código de análisis termohidráulico 2D de reactores modulares de alta temperatura (HTGR).

Los trabajos anteriores aplican enfoques estándar y nosotros proponemos el escalamiento del reactor desde la escala del *pin* aplicando el método de escalamiento. Este método permite conocer el vínculo matemático con la física a escalas inferiores. En el núcleo del reactor se consideran dos fases, la fase sólida son las barras de combustible (*pin*) y la fase líquida es el metal líquido.

5.2. Descripción del reactor SFR

El Foro Internacional de Generación IV (GIF) define dos tipos de reactores rápidos refrigerados con metal líquido: el reactor rápido refrigerado por sodio y el reactor rápido refrigerado por plomo (LFR). El diseño SFR puede refrigerarse con sodio y una aleación de sodio y potasio. Para los diseños LFR, los refrigerantes son plomo y una aleación eutéctica de plomo y bismuto. Estos reactores tienen varias décadas de experiencia desde que el comienzo de esta tecnología se remonta a la década de 1940. El combustible es una mezcla de uranio y plutonio. El proceso neutrónico genera una gran cantidad de energía en forma de calor, que se elimina continuamente mediante el refrigerante. El refrigerante fluye a través del núcleo para extraer el calor y luego pasa por un intercambiador de calor para producir vapor que, a su vez, mueve una turbina y genera electricidad.

El núcleo del SFR está formado por ensambles de combustible hexagonales como se ilustra en la **Figura 5.1**. Esta figura muestra la disposición radial del

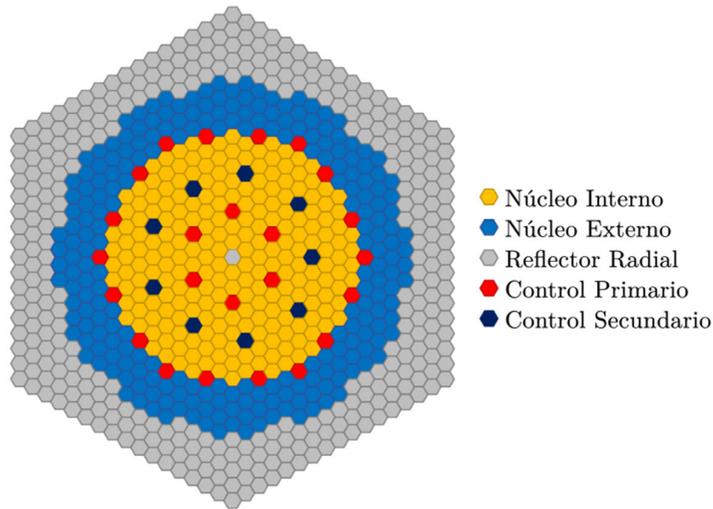


Figura 5.1. Núcleo del reactor SFR (Facchini, Giusti, Ciolini, Tucek, Thomas & D’Agata, 2017).

núcleo; incluye el combustible, los reflectores y las barras de control. La zona de combustible está dividida en secciones interna y externa; cada una tiene diferentes concentraciones de uranio-plutonio.

Las características de diseño del reactor SFR se presentan en la **Tabla 5.1**.

La **Figura 5.2** ilustra las dimensiones de un ensamble combustible, la distancia entre *pinés* y el radio de las barras de combustible que constituye la escala local. En la **Figura 5.2a** se presenta un ensamble de combustible el cual es de tipo hexagonal, el cual está constituido por 271 [*pinés*] de combustible. En la **Figura 5.2b** representa la distribución de las barras de combustible. La zona activa del conjunto combustible tiene una longitud de 1.006 [m]. En la **Figura 5.2c** se pre-

Tabla 5.1. Características del reactor SFR.

Potencia térmica del reactor	3600[MW]	Ensamblés internos	225
Temperatura del sodio a la entrada	668 [K]	Ensamblés externos	228
Temperatura promedio de combustible	1500[K]	Reflectores radiales	330
Temperatura promedio del sodio	743[K]	Ensamblés de control	33

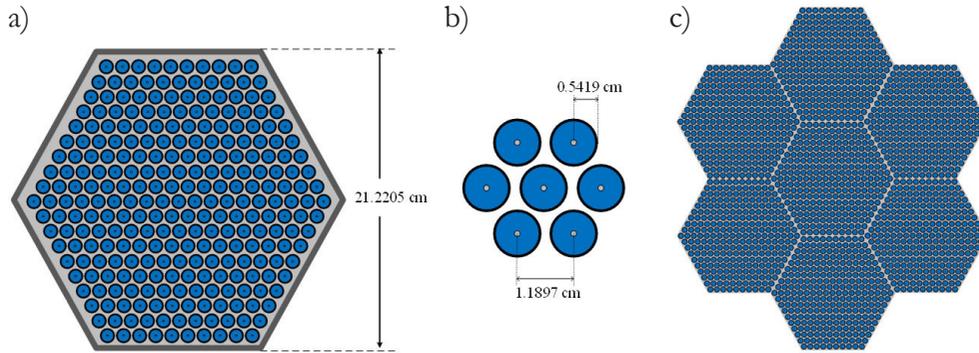


Figura 5.2. a) Ensamble de combustible, b) distribución de pines de combustible en el ensamble. c) Conjunto de ensambles en el núcleo del reactor.

senta un conjunto de ensambles combustible, donde la disposición representada puede verse como un enjambre de abejas con el volumen representativo definido, que coincide con una celda unitaria que representa todo el sistema.

5.3. Formulación matemática local

La formulación matemática a la escala local considera los procesos de transporte de calor en la barra de combustible, incluido el fluido térmico del metal líquido. El modelo matemático del problema directo que representa la aproximación local para describir el subcanal de un combustible está constituido por un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (EDP), es decir:

Pin de combustible:

$$(\rho C p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) + q''' \quad (5.1)$$

Metal líquido:

$$(\rho C p)_m \left(\frac{\partial T_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_m T_m) \right) = \nabla \cdot (k_m \nabla T_m) \quad (5.2)$$

Condiciones de Frontera:

$$T_f = T_m \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (5.3)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla T_f = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla T_m \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (5.4)$$

Condiciones Iniciales:

$$T_f = T_{f0}(\mathbf{r}), \quad T_m = T_{m0}(\mathbf{r}) \quad \text{en} \quad t=0 \quad (5.5)$$

donde A_{fm} es el área interfacial entre el *pin* de combustible y metal líquido. El subíndice f se usa para el combustible nuclear y m para el metal líquido. La densidad de potencia está dada por

$$q''' = \frac{P_0}{V_f} \quad (5.6)$$

donde P_0 es la potencia térmica nominal y V_f es el volumen de combustible.

Las entradas de fase fluida en el conjunto combustible, en general, son función de la posición y el tiempo:

$$T_m = T_m(\mathbf{r}, t) \quad \text{en} \quad A_m \quad (5.7)$$

donde A_m es el área de entrada.

Los procesos de acoplamiento y retroalimentación en el núcleo del reactor son: el proceso neutrónico requiere la información de la temperatura de la barra de combustible T_f y del metal líquido T_m , para calcular la reactividad y en consecuencia la densidad de potencia q''' . Entonces, la densidad de potencia se utiliza para recalculer la temperatura del combustible, así como una nueva temperatura del metal; computacionalmente, esto representa un flujo recursivo de información, y desde un punto de vista físico, fenómenos de retroalimentación.

5.4. Método de escalamiento

En la **Figura 5.3** se presentan las diferentes escalas del reactor, desde la escala más grande que es el núcleo hasta un conjunto de *pin*s contenidos en un ensamble de combustible, donde se selecciona un volumen representativo del núcleo del reactor. De esta manera, las ecuaciones de gobierno válidas a escala de *pin*s de combustible se escalan espacialmente aplicando el método de escalamiento.

Es importante apuntar que el escalamiento del reactor nuclear constituye un modelado completo, que aproxima las simulaciones *pin a pin* de un reactor, con mucho menos recursos de cómputo. No obstante, para lograr esta aproximación se deben seguir el procedimiento del método de escalamiento presentado en el **Capítulo 1** y que aplicó en los capítulos anteriores, siendo un proceso complicado que no es directo, pero el modelado final puede tener diferentes aplicaciones, inclusive aquellas donde el tiempo real es importante como análisis en línea y entrenamiento de operadores de centrales nucleares.

5.5. Escalamiento de las ecuaciones locales

Para el escalamiento de las ecuaciones locales, se debe establecer el dominio donde el operador integral debe aplicarse. En la **Figura 5.3** se ilustra el volumen

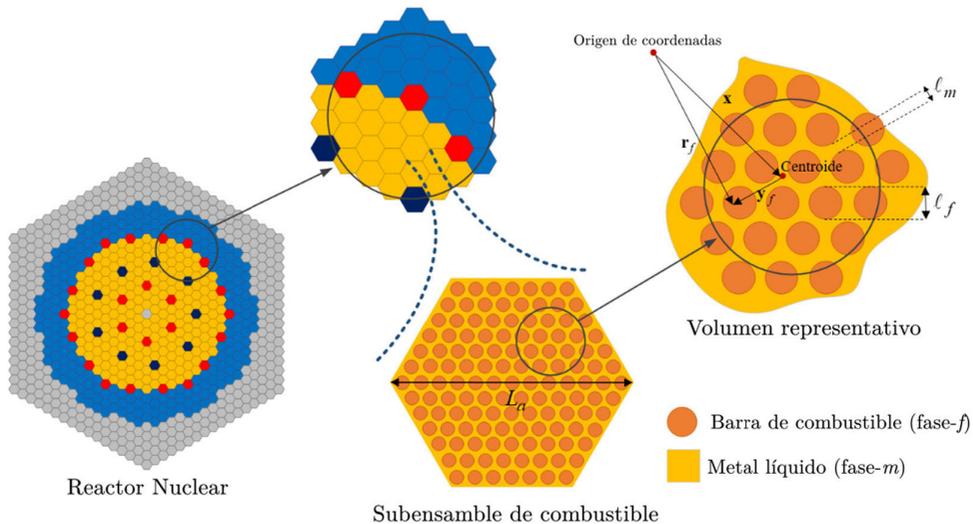


Figura 5.3. Volumen representativo y escalas de longitud en el núcleo del reactor SFR.

representativo V seleccionado que está hecho de un conjunto de *pinas* dispersos geoméricamente en el metal líquido. El volumen representativo tiene la propiedad $V = V_f + V_m$, donde V_f es el volumen de los *pinas* contenidos en ese volumen y V_m es el volumen del metal líquido.

Las escalas características del volumen representativo son:

$$\ell_f, \ell_m \ll V^{1/3} \ll L_a \quad (5.8)$$

donde L_a es la longitud característica de un ensamble de combustible hexagonal, ℓ_f y ℓ_m son las longitudes características de un *pin* y entre ellos, respectivamente como se ilustra en la **Figura 5.3**. Se puede observar que ℓ_f y ℓ_m son del mismo orden de magnitud. La ley de escalamiento dada por esta expresión garantiza que los resultados escalados tengan un buen comportamiento desde el punto de vista matemático, y que sean representativos desde un punto de vista físico.

El operador de escalamiento de una propiedad continua introduce el concepto de *cantidad superficial*, en este caso esta propiedad es la temperatura $T_\gamma(\gamma = f, m)$. Este operador está definido por:

$$\langle T_\gamma \rangle(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \int_{V_\gamma} T_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (5.9)$$

Una *cantidad intrínseca* se define como:

$$\langle T_\gamma \rangle^\gamma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} T_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (5.10)$$

La cantidad escalada es evaluada en el centroide \mathbf{x} del volumen representativo V , de lo contrario daría lugar a una aproximación de tipo no local. La relación entre las dos cantidades se puede demostrar fácilmente que está dado por:

$$\langle T_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \langle T_\gamma \rangle^\gamma \quad (5.11)$$

La fracción volumen de cada fase se define como $\varepsilon_\gamma = V_\gamma/V$, dentro del dominio del volumen representativo.

Aplicando sistemáticamente los operadores integrales a las ecuaciones locales de transferencia de calor, se obtienen los siguientes modelos matemáticos escalados:

Modelo escalado para el combustible:

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C_p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\varepsilon_f k_f \nabla \langle T_f \rangle^f + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} (T_f - \langle T_f \rangle^f) dA \right] \\ + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla T_f dA + \varepsilon_f \langle q''' \rangle^f \end{aligned} \quad (5.12)$$

Modelo escalado para metal líquido:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C_p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C_p)_m \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_m T_m \rangle = \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla T_m dA \\ + \nabla \cdot \left[\varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} (T_m - \langle T_m \rangle^m) dA \right] \end{aligned} \quad (5.13)$$

donde A_{fm} es el área interfacial en el volumen representativo V , \mathbf{n}_{fm} es el vector normal que apunta desde la superficie del *pin* al metal líquido que lo rodea, cuya propiedad es $\mathbf{n}_{fm} = -\mathbf{n}_{mf}$. En estas ecuaciones, las propiedades físicas son constantes en V , esto significa que no son escalables y son función de la temperatura y presión.

En estas ecuaciones se aplicaron teoremas fundamentales de integrales, primero se aplica el operador de una cantidad superficial a la ecuación local de transferencia de calor en el combustible:

$$\left\langle (\rho C_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) \right\rangle + \langle q''' \rangle \quad (5.14)$$

En el primer término se aplica directamente la regla integral de Leibniz y la relación entre cantidades superficiales e intrínsecas:

$$\left\langle (\rho C_p)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} \right\rangle = (\rho C_p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle}{\partial t} = \varepsilon_f (\rho C_p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} \quad (5.15)$$

El teorema de escalamiento espacial se aplica como una herramienta matemática para intercambiar operadores integrales por diferenciales:

$$\langle \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) \rangle^f = \nabla \cdot (\varepsilon_f k_f \langle \nabla T_f \rangle^f) + \frac{1}{V_f} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot (k_f \nabla T_f) dA \quad (5.16)$$

Para el término $\langle \nabla T_f \rangle^f$ de esta ecuación, es necesario aplicar por segunda vez el teorema de escalamiento especial. La variable local T_f se puede representar como una descomposición de la temperatura intrínseca $\langle T_f \rangle^f$, y desviaciones espaciales \tilde{T}_f , es decir:

$$T_f = \langle T_f \rangle^f + \tilde{T}_f \quad (5.17)$$

$$T_m = \langle T_m \rangle^m + \tilde{T}_m \quad (5.18)$$

En el modelo escalado de transferencia de calor en el metal líquido, el término incluye la velocidad local \mathbf{v}_m , entonces:

$$\mathbf{v}_m = \langle \mathbf{v}_m \rangle^m + \tilde{\mathbf{v}}_m \quad (5.19)$$

Se puede demostrar a través del teorema de escalamiento, que para una cantidad constante, se obtiene el siguiente *lema*:

$$\nabla \varepsilon_m = -\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} dA \quad (5.20)$$

Entonces las ecuaciones escaladas escritas en términos de cantidades entre desviaciones espaciales están dadas por:

Modelo escalado para el combustible:

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = & \nabla \cdot (k_f \varepsilon_f \langle \nabla T_f \rangle^f) + \nabla \cdot \left(\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \\ & + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA + \varepsilon_f \langle q'' \rangle^f \end{aligned} \quad (5.21)$$

Modelo escalado para metal líquido:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C p)_m \nabla \cdot (\varepsilon_m \langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m) = -(\rho C p)_m \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \tilde{T}_m \rangle \\ + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \tilde{T}_m dA + \nabla \cdot (\varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m) + \nabla \cdot \left(\frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \tilde{T}_m dA \right) \end{aligned} \quad (5.22)$$

Las restricciones de escala de longitud presentadas previamente se aplicaron para simplificar las ecuaciones anteriores, debido a que se puede demostrar que las desviaciones espaciales de una cantidad superficial son cero, cuando estas se evalúan en el centroide del volumen representativo, es decir:

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_m \rangle = 0, \langle \tilde{T}_m \rangle = 0, \langle \tilde{T}_f \rangle = 0 \quad (5.23)$$

Se puede observar por simple inspección, que el modelo escalado presenta mayor número de incógnitas ($\langle T_f \rangle^f$, $\langle T_m \rangle^m$, \tilde{T}_f y \tilde{T}_m) que ecuaciones, esto significa que matemáticamente corresponde a un problema mal planteado. Las desviaciones espaciales \tilde{T}_f y \tilde{T}_m necesitan ser definidas para obtener un conjunto cerrado de ecuaciones, es decir número de ecuaciones igual al número de incógnitas. La determinación de la solución de desviación espacial en términos de las cantidades escaladas corresponde a un problema de valores a la frontera.

Los problemas matemáticos para determinar \tilde{T}_f y \tilde{T}_m complementan el grado de libertad en la aplicación del método de escalamiento, es decir, el procedimiento genera más variables que ecuaciones; las ecuaciones que cuantifican desviaciones de las variables promedio constituyen el conjunto cerrado de ecuaciones.

El proceso de escalamiento que utilizamos en este trabajo, para integrar información de escalas de mayor resolución a una escala donde el dominio puede considerarse como homogéneo, utiliza teoría local, ya que durante el desarrollo se cumplen ciertas restricciones de escala de longitud.

Esto implica que la variable se evalúa en el centroide de la celda unitaria, por lo que el problema es local. Cuando la variable independiente se evalúa en un lugar diferente del centroide, el problema es no local. El análisis de este tipo de problemas es extremadamente complejo y se evitan siempre que sea posible.

5.6. Ecuación de las desviaciones espaciales

Como se mencionó previamente, el modelo escalado es no cerradas debido a la presencia de las desviaciones espaciales de temperaturas \tilde{T}_m y \tilde{T}_f . Se puede obtener un conjunto cerrado de ecuaciones si las desviaciones espaciales de temperatura se pueden escribir en términos de cantidades intrínsecas. Para obtener las desviaciones espaciales de la temperatura, necesitamos buscar sus soluciones ya sean analíticas, numéricas o en términos de expresiones generales o soluciones formales.

Para obtener las ecuaciones que gobiernan las desviaciones espaciales, aplicamos el procedimiento para el combustible: Las ecuaciones entre desviaciones espaciales surgen de la sustitución de la descomposición espacial (5.17) en la ecuación local (5.1), y luego restar la expresión (5.21), de esta manera se obtiene una expresión para la desviación de la temperatura, que es una variable desconocida.

Desviaciones espaciales de temperatura:

$$\begin{aligned}
 (\rho C p)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) - \varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \\
 - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA
 \end{aligned} \tag{5.24}$$

Las desviaciones espaciales de la densidad de potencia $\tilde{q}'''(\mathbf{r}, t)$ son cero, debido a que el perfil de potencia es una constante para tiempos cortos, es decir, el consumo de material fisionable es despreciable. Otra simplificación de la ecuación anterior se obtiene a través de un análisis de orden de magnitud, de los términos que la componen:

$$\nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) = \mathbf{O} \left(\frac{k_f \tilde{T}_f}{\ell_f^2} \right) \tag{5.25}$$

$$\varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) = \mathbf{O} \left(\frac{\varepsilon_f^{-1} k_f \tilde{T}_f}{\ell_f L_a} \right) \tag{5.26}$$

donde $\ell_f \ll L_a$, entonces:

$$\nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) \gg \varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left(\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \quad (5.27)$$

Aplicando se obtiene:

Desviaciones espaciales de temperatura del combustible:

$$(\rho C_p)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA \quad (5.28)$$

De manera similar, utilizando el análisis correspondiente de órdenes de magnitud, la ecuación de desviaciones para la temperatura del metal \tilde{T}_m , está dada por

Desviaciones espaciales de temperatura del metal líquido:

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_m \frac{\partial \tilde{T}_m}{\partial t} + (\rho C_p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \tilde{T}_m) + (\rho C_p)_m \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_m \langle T_m \rangle^m) \\ = \nabla \cdot (k_m \nabla \tilde{T}_m) - \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \tilde{T}_m dA \end{aligned} \quad (5.29)$$

Las *condiciones de frontera interfaciales* se reescriben sustituyendo la descomposición espacial, con la idea de establecer el problema de valores a la frontera para las desviaciones de temperatura:

$$\tilde{T}_f - \tilde{T}_m = \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (5.30)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \tilde{T}_f - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \tilde{T}_m = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \langle T_m \rangle^m - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (5.31)$$

Estas ecuaciones contienen fuentes macroscópicas asociadas con las cantidades escaladas $\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f$, $\langle \nabla T_m \rangle^m$ y $\langle \nabla T_f \rangle^f$.

Si tales cantidades son nulas, la solución trivial $\tilde{T}_m, \tilde{T}_f = 0$, satisface el problema del valor límite para las desviaciones de temperatura. La solución no trivial, que es más útil e interesante, proviene de proponer que la solución general está dada por una suma finita de la combinación lineal de fuentes macroscópicas.

Este procedimiento se lleva a cabo por dos razones:

- i) La naturaleza lineal del problema de valores a la frontera dadas por (5.28)-(5.31), y
- ii) Las fuentes macroscópicas se comportan como constantes debido a las restricciones de escala de longitud dentro del dominio de validez de las desviaciones de temperatura.

Por lo tanto, las soluciones generales para las desviaciones de temperatura son:

Solución de las desviaciones de temperatura combustible:

$$\tilde{T}_f = \mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m) \quad (5.32)$$

Solución para las desviaciones espaciales de temperatura del metal líquido:

$$\tilde{T}_m = \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \quad (5.33)$$

donde los vectores \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mf} , \mathbf{b}_{mm} y escalares s_f y s_m se conocen como *coeficientes variables*.

5.7. Ecuaciones de transporte escaladas

Para obtener las ecuaciones de transporte escaladas, se sustituyen las soluciones formales para las desviaciones (5.32) y (5.33), en (5.21) y (5.22), para el combustible y el metal líquido respectivamente:

Modelo escalado para el combustible:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_f (\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} &= k_f \varepsilon_f \nabla \cdot (\nabla \langle T_f \rangle^f) + \langle q''(\mathbf{r}, t) \rangle^f \\
&+ \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \left(\mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f \left(\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) \right) dA \\
&+ \nabla \cdot \left(\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \left(\mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f \left(\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) \right) dA \right)
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Modelo escalado para metal líquido:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_m (\rho Cp)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho Cp)_m \varepsilon_m \nabla \cdot \left(\langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m \right) &= \nabla \cdot \left(\varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m \right) \\
- (\rho Cp)_m \nabla \cdot \left\langle \tilde{\mathbf{v}}_m \left(\mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left(\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) \right\rangle \\
&+ \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \left(\mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left(\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) dA \\
&+ \nabla \cdot \left(\frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \left(\mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left(\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) dA \right)
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Estas ecuaciones contienen términos que pueden ser agrupados de acuerdo con su naturaleza, ya sea conductiva o convectiva, además de los coeficientes de solución de las desviaciones espaciales.

Al realizar la agrupación de los términos es posible obtener los coeficientes escalados, los cuales contienen la información de los coeficientes locales y los *coeficientes variables*.

Modelo escalado para el combustible:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_f (\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} &= \mathbf{u}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{u}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \\
&+ \nabla \cdot \left[\mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \right] - a_v h \left(\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) + \varepsilon_f \langle q''(\mathbf{r}, t) \rangle^f
\end{aligned} \tag{5.36}$$

donde los coeficientes escalados de transferencia están definidos por:

$$\mathbf{K}_{ff} = k_f \left(\varepsilon_f \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{ff} dA \right) \quad (5.37)$$

$$\mathbf{K}_{fm} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{fm} dA \quad (5.38)$$

$$\mathbf{u}_{ff} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ff} dA + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \quad (5.39)$$

$$\mathbf{u}_{fm} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{fm} dA - \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \quad (5.40)$$

$$a_v h = k_f \left(\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \right) = -k_m \left(\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \right) \quad (5.41)$$

Modelo escalado para metal líquido:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C p)_m \varepsilon_m \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m) &= \mathbf{u}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{u}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f \\ + \nabla \cdot [\mathbf{K}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{K}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f] &- a_v h (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \end{aligned} \quad (5.42)$$

donde los coeficientes escalados están definidos por:

$$\mathbf{K}_{mm} = k_m \left(\varepsilon_m \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mm} dA \right) - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mm} \rangle \quad (5.43)$$

$$\mathbf{K}_{mf} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mf} dA - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mf} \rangle \quad (5.44)$$

$$\mathbf{u}_{mm} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mm} dA - \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA + (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \quad (5.45)$$

$$\mathbf{u}_{mf} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mf} dA + \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \quad (5.46)$$

$$a_v h = k_m \left(\frac{1}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \right) = -k_f \left(\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \right) \quad (5.47)$$

La solución de los coeficientes \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mf} , \mathbf{b}_{mm} , s_f y s_m en estas ecuaciones permiten conocer los coeficientes escalados de transferencia de calor \mathbf{K}_{ff} , \mathbf{K}_{fm} , \mathbf{K}_{mf} , \mathbf{K}_{mm} , \mathbf{u}_{ff} , \mathbf{u}_{fm} , \mathbf{u}_{mf} , \mathbf{u}_{mm} y $a_v h$.

En el siguiente capítulo se presenta como calcular estas variables.

COEFICIENTES ESCALADOS DE TRANSPORTE DE CALOR DE UN SRF

6.1. Modelo escalado de transferencia de calor

En la **Tabla 6.1** se presenta en forma resumida el modelo y coeficientes escalados de transferencia de calor, para un reactor enfriado con metales líquidos. Estos fueron demostrados en el **Capítulo 5**.

En esta tabla se resume en forma matemática los coeficientes escalados, con la idea de establecer que estos dependen de los *coeficientes variables* \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mf} , \mathbf{b}_{mm} , s_f y s_m relacionadas con la solución de las desviaciones espaciales de las temperaturas. El objetivo de este capítulo es obtenerlos para evaluar los coeficientes escalados de transferencia de calor \mathbf{K}_{ff} , \mathbf{K}_{fm} , \mathbf{u}_{ff} , \mathbf{u}_{fm} y $a_v h$.

Tabla 6.1. Modelo escalado de transferencia de calor.

Modelo escalado para el combustible

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} &= \mathbf{u}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{u}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \\ + \nabla \cdot [&\mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m] - a_v h (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m) + \varepsilon_f \langle q''(\mathbf{r}, t) \rangle^f \\ \mathbf{K}_{ff} &= k_f \left(\varepsilon_f \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{ff} dA \right) \\ \mathbf{K}_{fm} &= \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{fm} dA \\ \mathbf{u}_{ff} &= \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ff} dA + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \\ \mathbf{u}_{fm} &= \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{fm} dA - \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \\ a_v h &= k_f \left(\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \right) = -k_m \left(\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \right) \end{aligned}$$

Modelo escalado para metal líquido

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C p)_m \varepsilon_m \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m) &= \mathbf{u}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \\ + \mathbf{u}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \nabla \cdot [&\mathbf{K}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{K}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f] - a_v h (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \\ \mathbf{K}_{mm} &= k_m \left(\varepsilon_m \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mm} dA \right) - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mm} \rangle \\ \mathbf{K}_{mf} &= \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mf} dA - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mf} \rangle \\ \mathbf{u}_{mm} &= \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mm} dA - \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA + (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \\ \mathbf{u}_{mf} &= \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mf} dA + \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA - (\rho C p)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \end{aligned}$$

6.2. Ecuaciones de las desviaciones de temperaturas

Los problemas de valores a la frontera de las ecuaciones gobernantes de las desviaciones parciales de temperatura fueron obtenidos en el **Capítulo 5**, aquí se presenta un breve resumen.

Desviaciones espaciales de temperatura del combustible:

$$(\rho Cp)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA \quad (6.1)$$

Desviaciones espaciales de temperatura del metal líquido:

$$\begin{aligned} (\rho Cp)_m \frac{\partial \tilde{T}_m}{\partial t} + (\rho Cp)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \tilde{T}_m) + (\rho Cp)_m \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_m \langle T_m \rangle^m) \\ = \nabla \cdot (k_m \nabla \tilde{T}_m) - \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \tilde{T}_m dA \end{aligned} \quad (6.2)$$

Condiciones de frontera interfaciales:

$$\tilde{T}_f - \tilde{T}_m = \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (6.3)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \tilde{T}_f - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \tilde{T}_m = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \langle T_m \rangle^m - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (6.4)$$

Soluciones matemáticas:

$$\tilde{T}_f = \mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m) \quad (6.5)$$

$$\tilde{T}_m = \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \quad (6.6)$$

Se puede inferir directamente que se pueden sustituir las soluciones matemáticas en las ecuaciones de las desviaciones, y agrupando de acuerdo con la fuente macroscópica correspondiente, *i.e.*, $\langle \nabla T_f \rangle^f$, $\langle \nabla T_m \rangle^m$ y $(\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m)$ para obtener

problemas en función de los *coeficientes variables*. Además, se consideró condiciones de estado cuasi estacionario con la idea de lograr un conjunto de ecuaciones simplificadas, sin afectar el alcance de los procesos de transporte. Estas ecuaciones contienen fuentes macroscópicas

Los problemas de valores a la frontera para obtener los vectores de los coeficientes variables \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mf} , \mathbf{b}_{mm} y escalares s_f , s_m se presentan en la **Tabla 6.2**.

Tabla 6.2. Problemas de valores a la frontera para los coeficientes de solución de \tilde{T}_f y \tilde{T}_m .

Problema de frontera 1	Problema de frontera 2	Problema de frontera 3
Región - f	Región - f	Región - f
$0 = \nabla \cdot (k_f \nabla \mathbf{b}_{ff})$ $-\varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ff} dA$	$0 = \nabla \cdot (k_f \nabla \mathbf{b}_{fm})$ $-\varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{fm} dA$	$0 = \nabla \cdot (k_f \nabla s_f)$ $-\varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA$
En región - m	En región - m	En región - m
$0 = -(\rho C p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \mathbf{b}_{mf})$ $+\nabla \cdot (k_m \nabla \mathbf{b}_{mf})$ $-\varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mf} dA$	$0 = -(\rho C p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \mathbf{b}_{mm} + \tilde{\mathbf{v}}_m)$ $+\nabla \cdot (k_m \nabla \mathbf{b}_{mm})$ $-\varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mm} dA$	$0 = (\rho C p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m s_m)$ $-\nabla \cdot (k_m \nabla s_m)$ $+\varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA$
En la frontera - fm	En la frontera - fm	En la frontera - fm
$\mathbf{b}_{ff} = \mathbf{b}_{mf}$	$\mathbf{b}_{fm} = \mathbf{b}_{mm}$	$s_f = s_m - 1$
En la frontera - fm	En la frontera - fm	En la frontera - fm
$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \mathbf{b}_{ff}$ $= \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \mathbf{b}_{mf} - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \mathbf{I}$	$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \mathbf{b}_{fm}$ $= \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \mathbf{b}_{mm} + \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \mathbf{I}$	$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla s_f = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla s_m$
Además, condiciones de periodicidad y restricciones:	Además, condiciones de periodicidad y restricciones:	Además, condiciones de periodicidad y restricciones:
$\langle \mathbf{b}_{ff} \rangle, \langle \mathbf{b}_{mf} \rangle \approx 0$	$\langle \mathbf{b}_{fm} \rangle, \langle \mathbf{b}_{mm} \rangle \approx 0$	$\langle s_f \rangle, \langle s_m \rangle \approx 0$

El Problema de Frontera 1 resuelve \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{mf} , el Problema de Frontera 2 resuelve \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mm} , y el Problema de Frontera 3 resuelve s_f , s_m .

Con el método de escalamiento fue posible obtener un modelo de dos ecuaciones de no equilibrio con coeficientes de transferencia de calor escalados. Por otro lado, es posible hacer un análisis utilizando otras metodologías como el marco de expansión asintótica.

Ambos enfoques, el método de escalamiento aplicado en este trabajo y el marco de expansión asintótica presentan ciertas similitudes y también profundas diferencias en varios aspectos dentro de su metodología. Creemos que la mejor referencia con respecto a sus comparaciones es la de Davit *et al.* (2013).

Hasta donde sabemos, hay muy pocos trabajos dedicados a analizar el transporte de calor con métodos asintóticos. En uno de esos trabajos, el modelo de transferencia de calor escalado obtenido en nuestro trabajo abarca algunos de los modelos derivados con el método asintótico de doble escala, aunque la física inicial incluye solo el transporte de calor por mecanismos conductivos. Nuestro modelo escalado de dos ecuaciones derivado se asemeja a esa formulación donde la resistencia térmica entre las fases aumenta.

Para el problema de transporte de calor en el reactor nuclear, se acepta que la celda unitaria pueda ser periódica, lo cual es una suposición a priori en el método asintótico. Sin embargo, en nuestros resultados el efecto de diferentes números adimensionales como el número de Péclet o Reynolds está implícito durante la solución de los problemas de la **Tabla 6.2**, es decir, el esquema es general para diferentes escenarios de flujo y transporte de calor. Mientras tanto, siguiendo la expansión asintótica, el orden de magnitud de los números adimensionales debe asumirse en uno de los primeros pasos de la metodología y puede conducir a diferentes modelos escalados.

6.3. Coeficientes de solución de las desviaciones

La estimación numérica de los coeficientes escalados de transferencia de calor se realiza mediante la solución de los problemas de frontera presentados en la **Tabla 6.2**. Consideramos el flujo turbulento para modelar el movimiento del refrigerante, ya que normalmente se cumplen números de Reynolds grandes en reactores nucleares con velocidades de flujo de alrededor de 5 [m/s] que corres-

ponde a la velocidad de diseño de SFR. En esta parte, utilizamos el software CFD para resolver los campos de velocidad, \mathbf{v}_m y $\langle \mathbf{v}_m \rangle^m$, y los problemas de frontera. Recordamos que cada problema permite el cálculo de coeficientes escalados específicos:

- Problema de frontera 1 resuelve \mathbf{K}_{ff} , \mathbf{K}_{mf} , \mathbf{u}_{ff} , y \mathbf{u}_{mf} .
- Problema de frontera 2 resuelve \mathbf{K}_{fm} , \mathbf{K}_{mm} , \mathbf{u}_{mm} y \mathbf{u}_{fm} .
- Problema de frontera 3 resuelve $\mathbf{a}_v \mathbf{h}$.

Propiedades del combustible: Calor específico 390,98 [J/(kgK)], conductividad térmica 2.529 [W/(mK)] y densidad 10,162.89 [kg/m³].

Propiedades del metal líquido: Calor específico 1269 [J/(kgK)], conductividad térmica 68.8 [W/(mK)], densidad 845 [kg/m³] y Viscosidad $2.5 \cdot 10^{-4}$ [Pa-s].

Las propiedades se consideran constantes porque las propiedades intrínsecas son constantes respecto al operador integral. La barra o *pin* de combustible tiene tres áreas: combustible, espacio libre y revestimiento. El combustible está compuesto por pastillas de (U, Pu) O₂, el espacio libre contiene helio y el revestimiento es de acero reforzado. Las propiedades se calcularon a partir de un promedio ponderado de las propiedades de cada sección.

Las variables de cierre presentan un comportamiento simétrico o asimétrico alrededor de planos ortogonales y periodicidad, según las condiciones planteadas en los problemas de frontera y la geometría del sistema. Este comportamiento contribuye a conformar los coeficientes de transporte escalados, ya que también pueden ser simétricos o asimétricos.

Presentamos resultados que resuelven problemas de cierre en la celda unitaria representativa del subcanal utilizando el método basado en elementos finitos. La **Figura 6.1** muestra la geometría del subcanal 3D empleada para resolver los problemas de frontera, y también presenta el número de elementos de dominio apropiados. Observamos que tal número de elementos tetraédricos es suficiente para asegurar la independencia de los resultados. En la celda representativa, la barra de combustible está encerrada por otras barras y el subcanal actúa como límites. La barra de combustible está representada por los cilindros grises y el área azul entre las barras contiene el metal líquido que fluye en el subcanal.

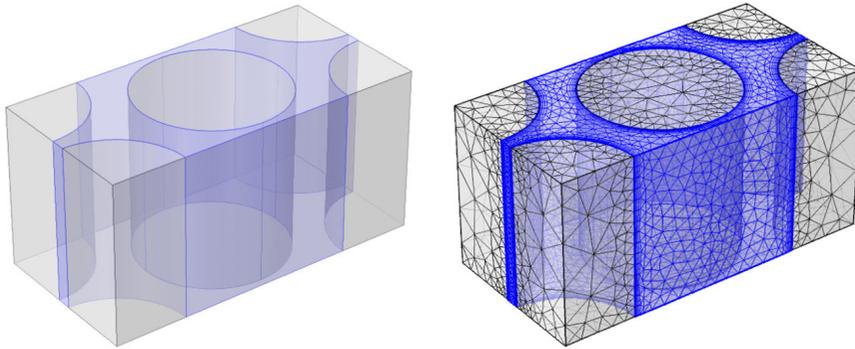


Figura 6.1. Celda unitaria representativa (panel izquierdo) y celda en el dominio computacional con 50595 elementos (panel derecho).

6.3.1. Campos de $\|\mathbf{b}_{ff}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mf}\|$

La norma euclidiana de las variables de cierre $\|\mathbf{b}_{ff}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mf}\|$ se presenta en la **Figura 6.2**. Estas variables se utilizan para obtener los coeficientes de transporte en el combustible. En la **Figura 6.2** se presentan dos tipos de gráficos. En el lado izquierdo, graficamos en la celda unitaria el coeficiente en el límite entre

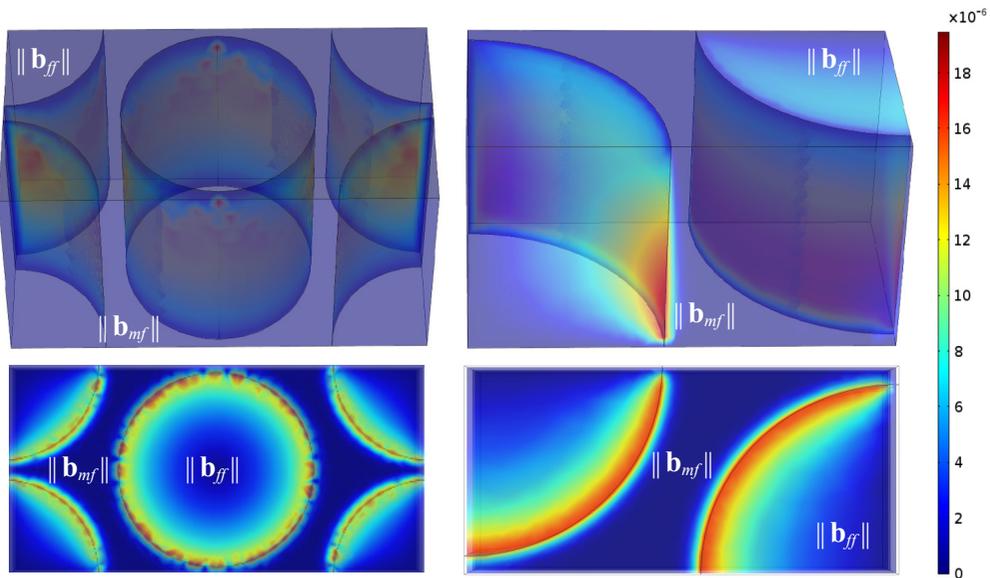


Figura 6.2. Campos de $\|\mathbf{b}_{ff}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mf}\|$ en [m]. Izq.) Celda completa y Der.) Un cuarto de celda.

el combustible y el metal líquido. Dicha ubicación es de interés ya que varios coeficientes escalados dependen explícitamente de la solución allí, y se incluye una representación del coeficiente a lo largo de un plano de corte horizontal central de la **Figura 6.2**. La figura se realizó para medir cuatro planos de corte, con el fin de visualizar el comportamiento de más celdas. En el lado derecho, se muestra la solución en un cuarto de celda. Los resultados se presentan en esta geometría para tener una mejor resolución y un acercamiento de los campos. Es posible observar la periodicidad y simetría de las variables de cierre cuando se proyecta sobre el plano xy . También es evidente que $\|\mathbf{b}_{ff}\|$ es más intenso en la pared del combustible y menos intenso en el centro, mientras que $\|\mathbf{b}_{mf}\|$ permanece con baja intensidad en la masa del fluido y aumenta su intensidad en la interfaz entre el combustible y el metal líquido.

6.3.2. Campos de $\|\mathbf{b}_{fm}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mm}\|$

En la **Figura 6.3**, presentamos la norma euclidiana correspondiente a los coeficientes $\|\mathbf{b}_{fm}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mm}\|$. La tendencia general de estos coeficientes es similar a la presentada por $\|\mathbf{b}_{ff}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mf}\|$, pero las primeras son un orden de magnitud mayores. La proyección de estas variables sobre el plano xy permite observar la periodicidad y simetría de los coeficientes variables en la celda representativa.

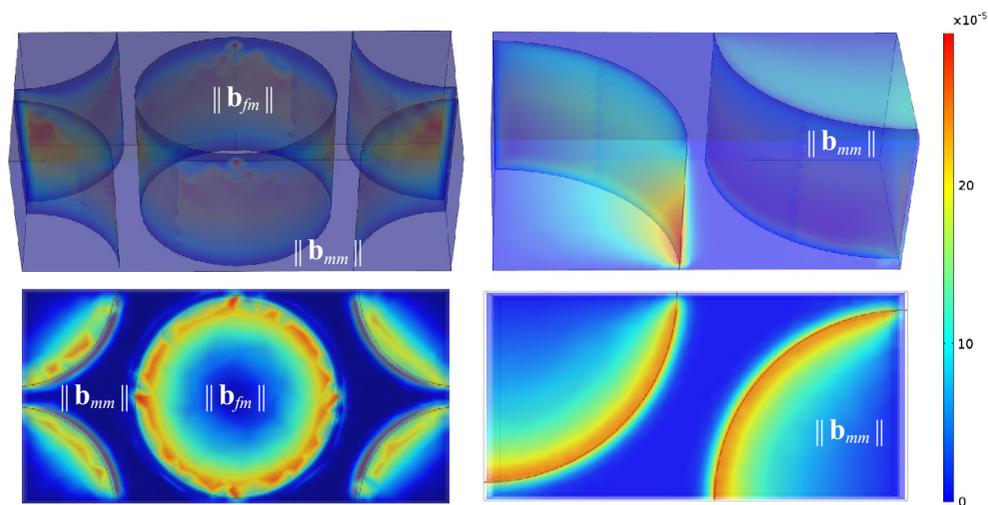


Figura 6.3. Campos de $\|\mathbf{b}_{fm}\|$ y $\|\mathbf{b}_{mm}\|$ en [m]. (Izg.) Celda completa y (Der.) Un cuarto de celda.

6.3.3. Campos de s_f y s_m

La **Figura 6.4** presenta los campos de los coeficientes s_f y s_m que se utilizan para determinar el coeficiente escalado de transporte relacionado con el proceso de transferencia de calor interfacial, y los coeficientes escalados *pseudoconvectivos* u . En este caso, las variables de cierre son simétricas en la celda, y si se proyectan sobre el plano xy es posible observar la periodicidad de la celda.

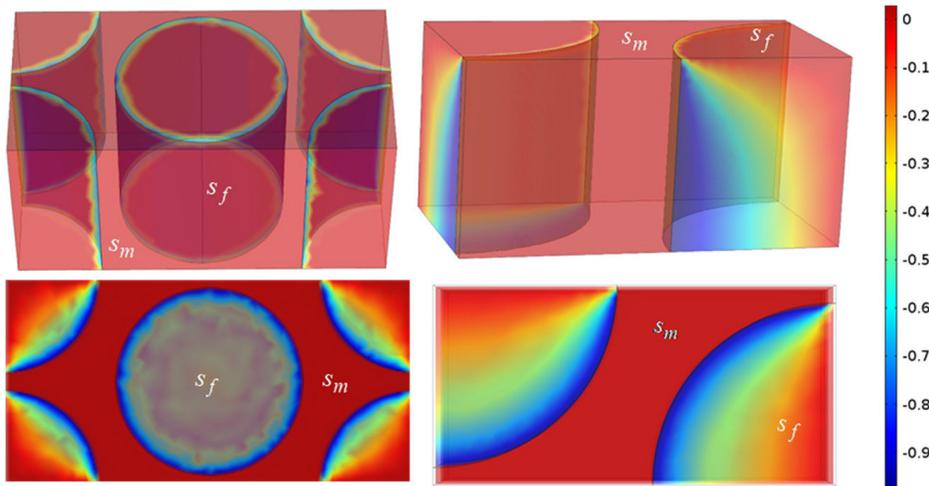


Figura 6.4. Campos de s_f y s_m [adim] (panel izquierdo) Celda completa y Un cuarto de celda (panel derecho).

Es importante destacar que s_f y s_m son al menos tres órdenes de magnitud mayores que las otras variables de cierre. Esto indica que la contribución a las desviaciones de temperatura puede estar dominada por las diferencias de temperatura entre el combustible y el fluido. Por lo tanto, en determinadas circunstancias, la solución formal puede reescribirse de una manera más simplificada siempre que la diferencia de temperatura sea al menos del mismo orden de magnitud que los gradientes locales de temperatura.

6.4. Coeficientes escalados de transporte de calor

En un reactor nuclear, puede haber variaciones en el flujo de entrada debido a un evento como la pérdida de flujo sin protección (ULOF). Es un evento

transitorio que se inicia cuando se pierde la potencia de la bomba primaria o se produce una rotura del eje. Durante la operación de los reactores, la pérdida de fluido circulante es un aspecto clave de la seguridad. En el procedimiento de este trabajo, los coeficientes escalados de transporte de calor se pueden recalcular de acuerdo con el número de Reynolds local para los casos en que la velocidad del fluido disminuye. Sin embargo, el cálculo riguroso de los coeficientes escalados también debe abarcar los efectos dinámicos en la escala de *pin* del combustible, es decir, en el régimen preasintótico. Dentro del método de escalamiento, esto se puede lograr resolviendo los problemas de frontera en el estado transitorio donde las perturbaciones de flujo se suministran como datos de entrada. Este procedimiento se ha aplicado previamente para estimar coeficientes escalados de difusión de neutrones transitorios en reactores nucleares (Aguilar-Madera, Espinosa-Paredes & Molina-Espinosa, 2019).

Para la simulación de cada escenario, es útil calcular los coeficientes escalados variando la velocidad del flujo de enfriamiento. La velocidad mínima está alrededor de 0.6 [m/s], que corresponde a la velocidad establecida en el *benchmark* de incertidumbre en modelado, diseño, operación y análisis de seguridad de SFR (Buiron *et al.*, 2017). Con simulaciones, se evalúan los coeficientes de transporte escalados para diferentes velocidades de flujo que van desde el *benchmark* hasta los 5 m/s.

Las **Tablas 6.3** y **6.4** presentan los coeficientes escalados de **K** y **u** para el combustible *ff*, metal líquido *mm*, los cruzados *fm* y *mf*.

6.4.1. Tensor térmico escalado **K**

Las expresiones de los coeficientes escalados térmicos se obtienen para el combustible, y para el metal líquido, de acuerdo con las expresiones que se presentan en la **Tabla 6.1**. Los problemas de frontera 1 y 2, *i.e.*, con los campos de los coeficientes \mathbf{b}_{ff} , \mathbf{b}_{fm} , \mathbf{b}_{mf} , \mathbf{b}_{mm} (**Tabla 6.2**), son cruciales para calcular el tensor térmico escalado.

De acuerdo con los resultados de la **Tabla 6.3**, es interesante observar que el tensor térmico **K** no presentan diferencias apreciables en sus componentes internos, por lo que el conjunto es prácticamente isótropo.

Los componentes *xx* e *yy* de los coeficientes cruzados \mathbf{K}_{mf} y \mathbf{K}_{fm} son casi 300 veces más pequeños que \mathbf{K}_{mm} , y 20 veces menor que \mathbf{K}_{ff} . Para las conductividades

Tabla 6.3. Componentes del tensor térmico [W/mK] a diferentes velocidades.

v[m/s]	\mathbf{K}_{ff}			\mathbf{K}_{fm}		
	xx	yy	zz	xx	yy	zz
0.6	1.63661	1.63752	1.64462	0.22304	0.1974	0.018045
1	1.63801	1.63849	1.64462	0.1835	0.16993	0.020065
2	1.63969	1.63983	1.64462	0.13624	0.13236	0.02212
3	1.6405	1.64055	1.64462	0.11346	0.11204	0.023055
4	1.64101	1.64103	1.64462	0.09938	0.09877	0.023235
5	1.64136	1.64137	1.64462	0.0896	0.08931	0.02301

v[m/s]	\mathbf{K}_{mf}			\mathbf{K}_{mm}		
	xx	yy	zz	xx	yy	zz
0.6	0.22223	0.19439	0.20831	24.27482	24.17658	24.06443
1	0.18467	0.16816	0.176415	24.26961	24.17021	24.06443
2	0.13897	0.13191	0.13544	24.2518	24.15952	24.06443
3	0.11652	0.11211	0.114315	24.23479	24.15137	24.06443
4	0.10253	0.09906	0.100795	24.22231	24.14375	24.06443
5	0.09277	0.08973	0.09125	24.21297	24.13792	24.06443

del material, el coeficiente escalado de combustible \mathbf{K}_{ff} es aproximadamente 1.5 veces menor que el valor local, mientras que \mathbf{K}_{mm} es aproximadamente 2.8 veces menor que el valor inicial.

Esto significa que la resistencia a la transferencia de calor entre el combustible y el metal líquido cambia considerablemente a gran escala. Esto es de suma importancia, ya que la predicción correcta de la temperatura es crucial para el funcionamiento y la operación de los reactores nucleares en diferentes escenarios transitorios. Los resultados relacionados con las variaciones de la velocidad del refrigerante muestran que los coeficientes escalados permanecen prácticamente invariables.

6.4.2. Vector de pseudovelocidad escalado \mathbf{u}

Las expresiones de los coeficientes escalados del vector pseudovelocidad se obtienen para el combustible, y para el metal líquido con las expresiones

matemáticas que aparecen en la **Tabla 6.2**, a través de los problemas de frontera 1 y 2.

El comportamiento de los coeficientes escalados \mathbf{u} se presenta en la **Tabla 6.4**, denominado en este libro como coeficiente escalado de *pseudovelocidad*, están asociados con el proceso de transporte de calor conductivo-convectivo, y son funciones directamente relacionados con las temperaturas medias intrínsecas y con la velocidad del líquido refrigerante. Por esta razón, los componentes predominantes de \mathbf{u}_{mm} y \mathbf{u}_{mf} son los axiales, *i.e.*, en las componentes ξ .

Comparando los resultados de \mathbf{K} y \mathbf{u} , se puede observar que el orden de magnitud de \mathbf{u}_{ff} y \mathbf{u}_{fm} en las 3 componentes, \mathbf{u}_{mf} y \mathbf{u}_{mm} en los componentes x e y , son pequeños respecto a la componentes ξ . Con respecto a \mathbf{K} , en general es del mismo orden de magnitud en zz para 0.6[m/s] de la componente ξ de \mathbf{u}_{mf} y \mathbf{u}_{mm} . Ambos coeficientes son dominantes en la dirección del fluido.

Tabla 6.4. Componentes del vector de pseudovelocidad [W/m²K].

v [m/s]	\mathbf{u}_{ff}			\mathbf{u}_{fm}		
	xx	yy	$\xi\xi$	xx	yy	$\xi\xi$
0.6	0.01178	0.02431	0.018045	0.1356	0.83146	0.48353
1	0.01334	0.02679	0.020065	0.22099	0.92543	0.57321
2	0.01628	0.02796	0.02212	0.37505	0.9686	0.671825
3	0.01866	0.02745	0.023055	0.48961	0.94776	0.718685
4	0.02088	0.02559	0.023235	0.58227	0.88885	0.73556
5	0.02258	0.02344	0.02301	0.65133	0.82003	0.73568
v [m/s]	\mathbf{u}_{mf}			\mathbf{u}_{mm}		
	xx	yy	$\xi\xi$	xx	yy	$\xi\xi$
0.6	0.24884	0.02472	25.647	0.02007	0.75948	25.647
1	0.22605	0.0381	40.39812	0.04294	0.85544	40.39812
2	0.17714	0.03268	70.48172	0.1568	0.98746	70.48172
3	0.13742	0.00748	91.28708	0.21544	1.1302	91.28708
4	0.11825	0.00654	105.34671	0.20518	1.1702	105.34671
5	0.10098	0.01699	116.65211	0.23684	1.19018	116.65211

6.4.3. Coeficiente escalado de transferencia de calor volumétrico $a_v h$

Se obtiene con el problema de frontera 3 (**Tabla 6.2**). El resultado del coeficiente escalado de transferencia de calor volumétrico se muestra en la **Tabla 6.5**.

Debido a que el volumen de la celda unitaria es muy pequeño, el valor del coeficiente de transferencia de calor es grande, lo que permite que el calor producido en el combustible se transporte al metal líquido. Este parámetro se ve débilmente afectado por la velocidad del fluido, ya que depende principalmente de la diferencia de temperatura fluido-combustible a través del *coeficiente variable*.

6.5. Comparación con el problema directo

Como una manera de validar la definición y el cálculo correcto de los coeficientes escalados, en esta sección, presentamos la comparación de los resultados numéricos obtenidos con el modelo escalado de transferencia de calor dado en la **Tabla 6.1** para un ensamble de combustible, y la simulación numérica directa a escala de *pinas*. El modelo a escala de *pinas* es la formulación local para el proceso de transferencia de calor, que se describe mediante las ecuaciones (5.1) a (5.5), del **Capítulo 5**. El problema de transferencia de calor a escala de *pinas* se plantea en una geometría que incluye varias barras de combustible y está lejos de los límites del núcleo (subensamble) y de los extremos superior e inferior de los conjuntos de combustible como se ilustra en la **Figura 6.5a**. Consideramos condiciones de simetría en los límites externos del conjunto porque está rodeado por otros conjuntos (véase la **Figura 6.5c**). Los valores de calor específico, conductividad y densidad para cada fase se resumen en la **Sección 6.3**.

Tabla 6.5. Coeficiente escalado de transferencia de calor volumétrico.

v [m/s]	$a_v \kappa$ [W/m ³ K]
0.6	2 210230
1	2 210980
2	2 211370
3	2 212730
4	2 213,620
5	2 214,940

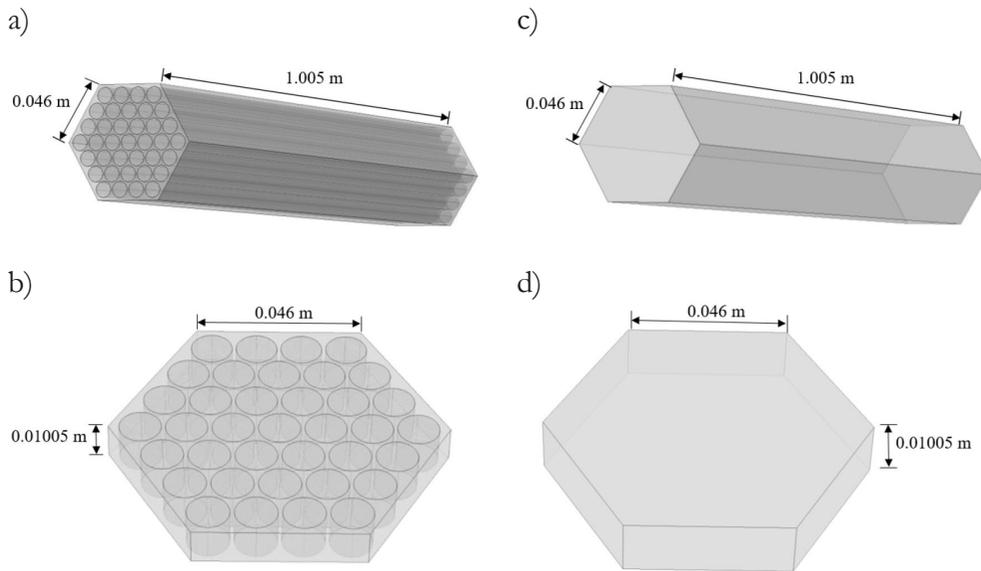


Figura 6.5. a) y b) Combustible a escala de *pin*. c) y d) Combustible a escala de ensamble.

El modelo matemático escalado se aplica en una geometría equivalente de un ensamble de combustible como se ilustra en la **Figura 6.5c**, los valores de los coeficientes escalados que se usaron se presentan en las **Tablas 6.3** y **6.4**.

La velocidad del metal líquido es de 5 [m/s] y la temperatura de entrada es de 668.15 [K], la densidad de potencia se toma como constante en todas las direcciones de la barra de combustible. En el subensamble, la barra central tiene un valor nominal de la densidad de potencia, las barras alrededor de la barra central tienen 0.9 del valor nominal, las barras siguientes tienen 0.8 y las barras en el límite del conjunto tienen 0.7 del valor.

Para el modelo escalado, la densidad de potencia se distribuye uniformemente y se toma como el promedio en el ensamble, que es 0.73 del valor nominal. Resolvemos el modelo a escala de *pin* y el modelo escalado en el dominio que se ilustra en la **Figura 6.5b** y **d**, tomando la décima parte de la longitud del ensamble, además considerando un volumen alejado de los límites axiales y nos centramos en el perfil radial de temperaturas.

En la **Figura 6.6**, se presenta la comparación entre modelo a la escala de *pin* y el modelo a escala de ensamble. Nótese que en el modelo a escala *pin* muestra-

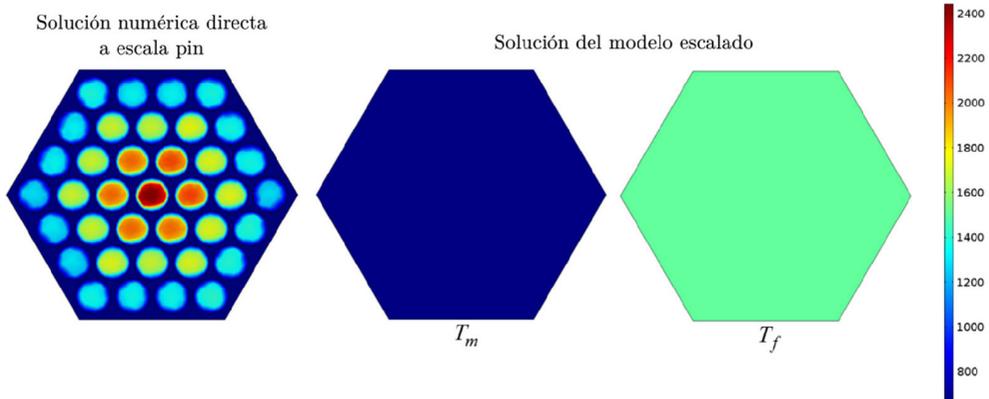


Figura 6.6. Comparación entre las temperaturas del combustible T_f [K] y del metal líquido T_m [K] a escala *pin* y escala de ensamble.

mos un dominio donde es posible distinguir zonas que pertenecen a las barras de combustible y zonas ocupadas por el fluido refrigerante. Por otro lado, en el modelo escalado, todo el dominio está homogeneizado y tenemos que representar gráficamente por separado la distribución de temperatura del fluido refrigerante y las barras de combustible, ya que ambos coexisten en el mismo dominio indistinguible. En la simulación numérica a escala *pin*, la temperatura promedio del combustible es 1498.5 [K] y para el metal líquido el valor promedio es 668.9 [K]. Mientras tanto, la solución numérica del problema escalado arroja 1502.05 [K] para la temperatura del combustible y 669.9 [K] para el metal líquido. Las diferencias entre las predicciones del modelo a escala *pin* y del modelo escalado son 0.2% para el combustible y 1[%] para el metal líquido, respectivamente. En este sentido, se obtuvo un excelente acuerdo mostrando que el modelo escalado arroja resultados comparables con menores recursos de cómputo.

En la **Figura 6.7** se presentan los perfiles de temperatura del combustible T_f y metal líquido refrigerante T_m . Se puede observar la distribución de la temperatura en la dirección axial, que es causada por el movimiento del metal líquido. La temperatura del metal líquido refrigerante aumenta en la dirección axial como consecuencia de la transferencia de calor que se produce mientras la fase fluida se mueve de abajo hacia arriba; el calor se elimina parcialmente del combustible y el refrigerante fresco ingresa por la parte inferior.

La **Figura 6.8** muestra el perfil de temperatura a través de uno de los vértices del ensamble, es decir, se representa con la línea roja en el esquema de la izquierda

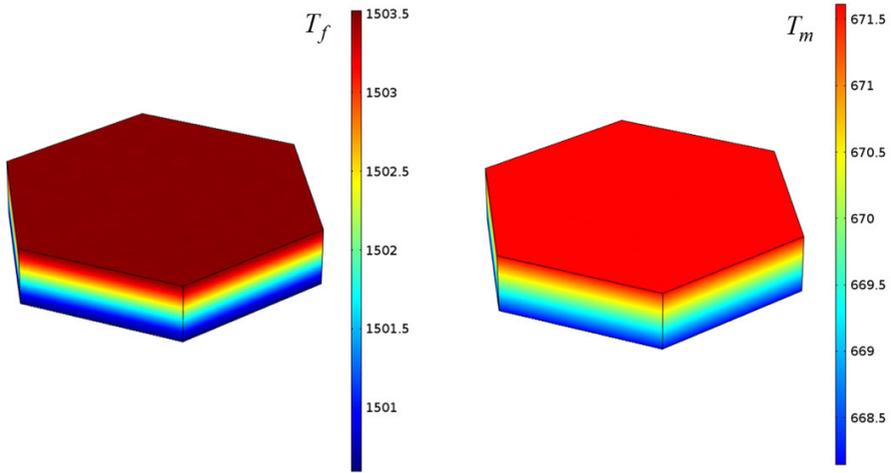


Figura 6.7. Temperatura de combustible T_f [K] y metal líquido T_m [K] a escala de ensamble (modelo escalado).

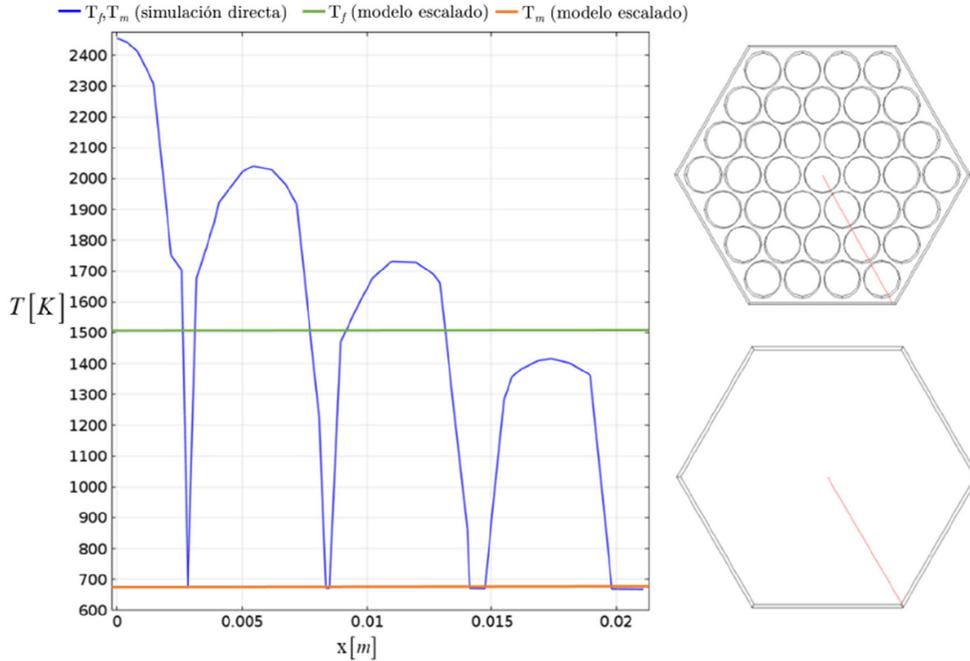


Figura 6.8. Temperaturas (T_f , T_m) a escala de pin (problema directo) y a escala de ensamble (modelo escalado).

de esta figura. En el gráfico, la cresta de las curvas corresponde al centro de las barras de combustible, mostrando que la temperatura máxima está en las barras. Entre las crestas, la curva disminuye correspondiente a la temperatura del metal líquido. Nótese que dentro del camino del combustible la temperatura disminuye gradualmente hasta que se alcanza la interfase barra-fluido. En este punto, la temperatura disminuye abruptamente hasta la temperatura del fluido.

Por otro lado, tomando la misma posición en el ensamble, pero ahora con el modelo escalado, el perfil de temperatura para el combustible y el metal líquido es una línea horizontal. Es un resultado esperado, ya que el modelo escalado promedia las variaciones de temperatura a través de todo el ensamble. Además, en el modelo escalado, la densidad de potencia se distribuye uniformemente en todo el dominio pues la barra de combustible y el fluido se homogeneizan en un dominio equivalente donde los dominios individuales ya no existen.

A través de los resultados numéricos, es importante destacar que la validación de la formulación del modelo escalado aplicando los coeficientes escalados de transferencia de calor, y su comparación con el problema directo en un ensamble de combustible representativo, se observa que el modelo escalado abarca estrechamente los obtenidos con el modelo matemático a escala de *pin*, que es computacionalmente más costoso.

Entonces el objetivo fundamental de un modelo escalado es la representación del núcleo del reactor que aproxime satisfactoriamente resultados *pin a pin* con mucho menor costo computacional que el modelo del problema directo, esto es especialmente importante porque los reactores nucleares están compuestos por cientos de miles de *pines*. Además, como se demostró entre ellos existe una diferencia de 0.2[%] para el combustible y 1[%] para el metal líquido.

ACOPLAMIENTO ESCALADO DE UN SFR

7.1. Preliminares del reactor SFR

Los fenómenos de transferencia de calor son cruciales en el diseño y análisis de seguridad de reactores nucleares debido a los efectos de retroalimentación con los procesos neutrónicos para la generación de energía. Los reactores nucleares son sistemas heterogéneos que contienen cientos de miles de *pinos* de combustible que exhiben distribución de potencia a través del espacio, y las temperaturas entre el fluido refrigerante y los *pinos* son diferentes. La simulación de los procesos de transferencia de calor en reactores nucleares rápidos enfriados por metal líquido con dos ecuaciones de energía escaladas acopladas con un modelo neutrónico de núcleo reflectado para considerar efectos de retroalimentación de las temperaturas del combustible nuclear y del metal líquido, es crucial para el análisis de seguridad.

Los metales líquidos tienen una alta tasa de transferencia de calor debido a su alta conductividad térmica. Sin embargo, son difíciles de manejar debido a su alta corrosión y su violenta reactividad cuando entran en contacto con fluidos como

el agua o el aire. En algunas aplicaciones específicas de transferencia de calor, las ventajas de los metales líquidos superan con creces las desventajas, y se han desarrollado técnicas especiales para su manejo. La utilidad de la alta conductividad térmica adquiere especial importancia en condiciones en las que se necesita una alta transferencia de calor en espacios pequeños, por ejemplo, en pequeños y microreactores nucleares. Otra ventaja de los metales líquidos es que se pueden utilizar en situaciones en las que se requieren altas temperaturas y los líquidos normales no permanecen líquidos, como el agua y otros refrigerantes orgánicos. Estas son algunas de las razones que impulsan el desarrollo de intercambiadores de calor más intensivos y compactos. En los metales líquidos, el número de Prandtl es bastante bajo, alrededor de 0.01, y por lo tanto, para el flujo sobre placas planas, el espesor de la capa límite térmica es considerablemente mayor que la capa límite hidrodinámica.

Comprender las distintas escalas de longitud que se encuentran en los reactores nucleares es crucial para el diseño y el análisis posterior que involucra los procesos neutrónicos, la transferencia de calor y cantidad de movimiento del refrigerante, la transferencia de calor del combustible y los fenómenos termomecánicos, todos estos fenómenos actuando simultáneamente. Un análisis permite establecer las escalas de longitud adecuadas para obtener información importante durante condiciones de operación normales, *i.e.*, cambios de potencia, cambios de flujo de masa, movimiento de barras de control y anormales como pérdida de refrigerante, excursiones de potencia, entre los más importantes. El análisis nuclear tiene como objetivo la seguridad del reactor en cualquier condición de operación.

El reactor nuclear es un sistema heterogéneo, multifísico y multiescalar que contiene numerosos conjuntos de combustible. Cada conjunto contiene múltiples *pin*s de combustible, barras de control y refrigerante, entre otros componentes.

La aproximación de escalamiento es mucho más eficiente computacionalmente que la simulación detallada de todos los componentes del núcleo (*pin a pin*), que emplea modelos directos.

A continuación, se presenta la aplicación del modelo escalado para formular una propuesta novedosa donde el acoplamiento de los procesos de transporte de calor y la dinámica neutrónica son las características principales. El proceso de escalamiento se utiliza para resolver el transporte de calor considerando el reactor como un dominio homogeneizado y evitando simulaciones numéricas directas

computacionalmente costosas; posteriormente, el procedimiento de reducción de escala permite recuperar información de la solución en la macroescala a las escalas de salida para soluciones más refinadas. El objetivo es tener una herramienta de ejecución rápida con capacidades bien detalladas para termofluido que involucra el transporte simultáneo de masa, energía y cantidad de movimiento en el núcleo, interactuando con la transferencia de calor en el combustible y la neutrónica.

El reactor rápido refrigerado por sodio utiliza metal líquido (sodio) como refrigerante en lugar del agua, que se utiliza habitualmente en las centrales nucleares comerciales. El líquido metálico permite que el refrigerante funcione a temperaturas más altas y presiones más bajas que los reactores actuales, lo que mejora la eficiencia y la seguridad del sistema. Este reactor también utiliza un espectro de neutrones rápidos, lo que significa que los neutrones pueden provocar fisión a altas energías, es decir, sin que se ralentice (moderen) primero, como ocurre en los reactores térmicos refrigerados por agua representando la mayoría de los reactores actuales en funcionamiento en todo el mundo.

Las altas energías de los neutrones en un reactor rápido permiten utilizar el plutonio procedente del combustible gastado de los reactores térmicos actuales para producir electricidad. Dado que casi todos los neutrones nacidos de las reacciones de fisión tienen altas energías, hay suficientes neutrones en el reactor para mantener las reacciones en cadena para la generación de energía. Además, es posible utilizar los neutrones que no se necesitan en la reacción en cadena para generar nuevo material fisible a partir de uranio o torio naturales, lo que convierte a los sistemas de neutrones rápidos en una tecnología muy eficiente y prometedora. El SFR es uno de los reactores rápidos refrigerados por metal líquido de cuarta generación de reactores de fisión (Gen-IV). El diseño del SFR puede refrigerarse con sodio o con una aleación de sodio y potasio.

La **Figura 7.1a** muestra el diseño de tipo piscina de un SFR. El concepto de piscina se caracteriza por la presencia del refrigerante de sodio primario en el interior del recipiente del reactor. Por lo tanto, este recipiente principal del reactor encierra las bombas primarias y los intercambiadores de calor intermedios, además de las estructuras internas que rodean el núcleo. Una ventaja de seguridad en el diseño de tipo piscina es que el gran volumen de sodio primario se calienta solo lentamente, incluso si no se extrae energía; por lo tanto, el reactor está efectivamente aislado de las perturbaciones en el equilibrio de la planta. El núcleo del

reactor en SFR es un ensamble de combustible compactado en un revestimiento de acero a través del cual fluye el refrigerante de sodio para extraer calor.

El sistema de transporte de calor consta de circuitos primarios y secundarios de sodio y un circuito vapor-agua que produce la energía eléctrica. La finalidad del circuito primario es transportar la energía térmica generada en el núcleo a los intercambiadores de calor intermedios, de los que recibe calor el circuito secundario de sodio. El circuito secundario, a su vez, transfiere el calor al agua que circula en los generadores de vapor para generar vapor. El circuito vapor-agua es el sistema convencional de generación de electricidad.

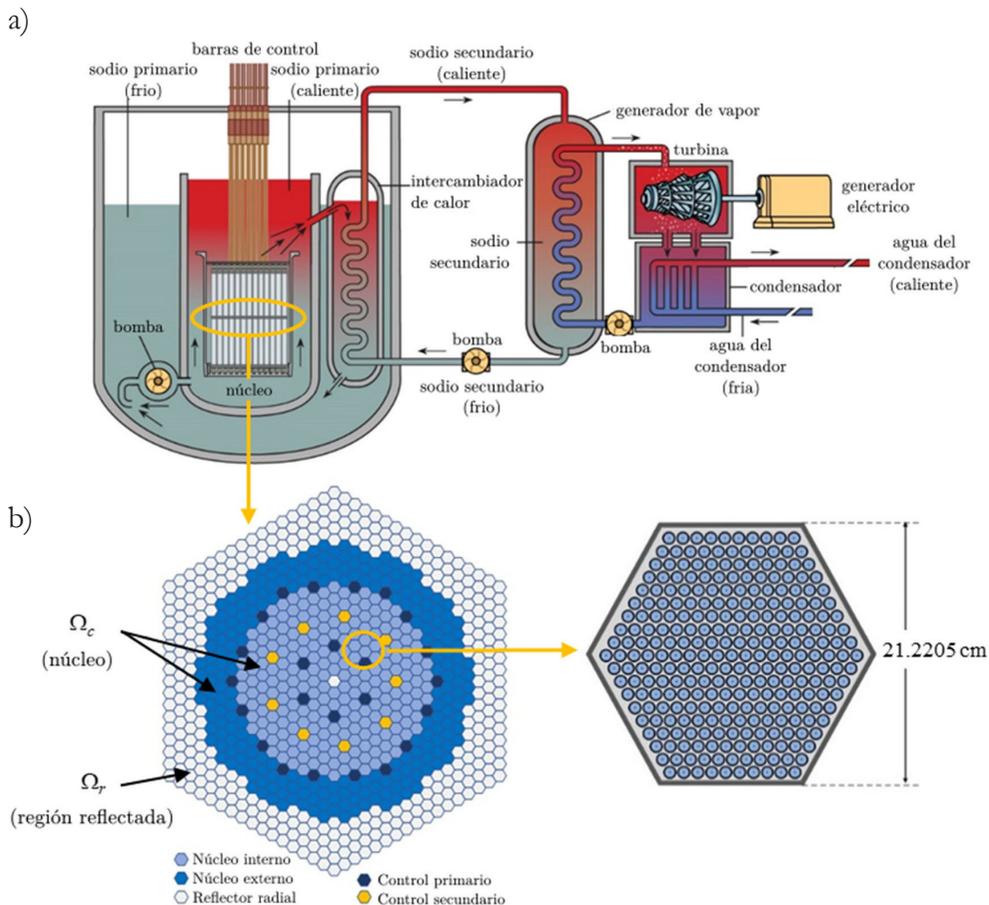


Figura 7.1. (a) Reactor SFR (*Encyclopædia Britannica*, 2021) y (b) Disposición radial del núcleo del SFR (*Facchini et al.*, 1917).

La placa soporte del núcleo facilita la circulación del sodio hacia los subconjuntos del núcleo para remover el calor generado. Las bombas primarias proporcionan la presión necesaria para que el sodio fluya a través de los subensambles del núcleo. En el concepto de tipo piscina, se necesita un recipiente llamado recipiente interno, que separa el sodio caliente y frío en el recipiente principal, que alberga todo el circuito de sodio primario radiactivo. De este modo, el recipiente interno garantiza el flujo deseado a través del intercambiador de calor y las temperaturas de diseño deseadas en las piscinas caliente y fría.

Los ensambles de combustible del SFR son hexagonales y de diferentes tipos. Estos ensambles del núcleo pueden contener varias zonas de enriquecimiento dispuestas para dar zonas de enriquecimiento anulares. Alrededor de las zonas anulares de generación de energía, es posible agregar un anillo reproductor que consiste en elementos de combustible con material fértil. Alrededor de estas zonas, hay un reflector de neutrones cuya función es reducir la fuga de neutrones. Los ensambles del reflector son similares a los ensambles de combustible, pero contienen principalmente acero. Alrededor del reflector, podría haber ensambles adicionales que contengan material de protección contra neutrones; sin embargo, la protección también puede ser una estructura separada. Las barras de control ocupan posiciones de ensambles en la región del núcleo y generalmente se insertan desde arriba.

El núcleo considerado para este análisis se muestra en la **Figura 7.1b**. Incluye dos zonas de enriquecimiento de combustible: núcleo interno y externo. En la zona externa se encuentra el reflector radial. El núcleo consta de 453 ensambles de combustible, 330 ensambles de reflector radial y 33 ensambles de control. Las zonas interna y externa tienen 225 y 228 ensambles de combustible, respectivamente. Las dimensiones de ensambles de combustible también se presentan en la misma figura, contiene 271 *pinos* de combustible. La zona activa del conjunto de combustible tiene una longitud de 1.00 [m]. La potencia térmica del reactor es de 3600 MW y la temperatura del refrigerante de entrada es de 668.15 [K] con una velocidad promedio de alrededor de 5 [m/s]. La temperatura promedio del combustible es de 1500 [K] y 743 [K] para el refrigerante.

7.2. Densidad de potencia

La energía liberada en un reactor de fisión nuclear se distribuye entre varios productos de reacción, caracterizados por diferentes rangos de energía y tiempos de

retardos. La deposición de energía distribuida en el refrigerante y los materiales estructurales del núcleo del reactor representa una cantidad relativamente pequeña de la energía liberada. Esta energía se debe principalmente a la energía de los rayos gamma de fisión, la desintegración beta de los productos de fisión, los neutrinos y las reacciones de no fisión como la captura de neutrones. La tasa total de generación de calor es proporcional a la tasa de fisión ($\Sigma_f \phi_c$). Aquí se considera que la aproximación de una velocidad o grupo de energía de los neutrones representa una descripción promedio si se eligen las secciones eficaces promedio apropiadas, y se puede utilizar para obtener una descripción cuantitativa de un reactor nuclear. Por lo tanto, la generación de energía para el núcleo del reactor viene dada por:

$$P(t) = \langle q_c'''(\mathbf{r}, t) \rangle^f V_c \quad (7.1)$$

La densidad de potencia en el núcleo se puede escribir como:

$$\langle q_c'''(\mathbf{r}, t) \rangle^f = w_f \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi_c(\mathbf{r}, t) \quad (7.2)$$

donde w_f es la energía recuperable liberada de los eventos de fisión, $\Sigma_f(\mathbf{r})$ es la sección eficaz macroscópica de fisión, y $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ es el flujo de neutrones. El flujo de neutrones se puede obtener en un reactor nuclear considerando el modelo de una sola velocidad. Esto significa físicamente que la energía nuclear se genera en el combustible nuclear del núcleo del reactor. Esta ecuación permite acoplar los procesos de transporte en el refrigerante metálico (es decir, termofluido) y la transferencia de calor en el combustible, con los procesos neutrónicos mediante $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ en la región del núcleo.

La cinética neutrónica de un sistema multiplicador reflectado constituye un problema de física matemática que permite describir el proceso de multiplicación en medios no homogéneos, como se ilustra en la **Figura 7.1b**. El modelo de difusión neutrónica para el reactor reflectado en presencia de precursores neutrónicos retardados y con reactividad de retroalimentación está dado por Espinosa-Paredes y Pérez-Valseca (2024).

Región del núcleo (interno y externo):

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_c \nabla^2 \phi_c(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ac} \phi_c(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{v} \left(\frac{\rho(\mathbf{r}, t) + \rho_{ext}(\mathbf{r}) - \beta}{\Lambda} - \frac{1}{\ell_n} \right) \phi_c(\mathbf{r}, t) \\ + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \end{aligned} \quad (7.3)$$

Región reflectada:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi_r(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_r \nabla^2 \phi_r(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ar} \phi_r(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{r} \in \Omega_r \quad (7.4)$$

Precursores de neutrones:

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i v \Sigma_f \phi_c(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, 2, \dots, G \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (7.5)$$

Condiciones iniciales:

$$\text{C.I.1} \quad \phi_c(\mathbf{r}, 0) = \phi_{c0}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (7.6)$$

$$\text{C.I.2} \quad \phi_r(\mathbf{r}, 0) = \phi_{r0}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_r \quad (7.7)$$

$$\text{C.I.3} \quad C_i(\mathbf{r}, 0) = \frac{\beta_i v \Sigma_f}{\lambda_i} \phi_c(\mathbf{r}, 0), \quad i = 1, 2, \dots, G, \quad \text{y} \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (7.8)$$

Condiciones de frontera:

$$\text{C.F.2} \quad \phi_c(\mathbf{r}, t) = \phi_r(\mathbf{r}, t) \quad \Omega_c \cap \Omega_r \quad (7.9)$$

$$\text{C.F.3} \quad -\mathbf{n}_{cr} \cdot D_c \nabla \phi_c(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{n}_{cr} \cdot D_r \nabla \phi_r(\mathbf{r}, t) \quad \Omega_c \cap \Omega_r \quad (7.10)$$

$$\text{C.F.4} \quad \phi_r(\mathbf{r}_{re}) = 0 \quad (7.11)$$

donde Ω_c representa el dominio del núcleo del reactor, incluyendo las regiones de ensamblajes internas y externas, \mathbf{r}_{re} es el vector de posición externo que incluye la longitud extrapolada, *i.e.*, dominio más allá de la zona reflectora.

La distribución inicial del flujo de neutrones en este trabajo se aproxima considerando un núcleo de reactor paralelepípedo rectangular finito, dado por:

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \phi_{\max} \cos\left(\frac{\pi x}{x_{eff}}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{y_{eff}}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{H_{eff}}\right), \quad \text{para} \quad \Omega_c \cup \Omega_r \quad (7.12)$$

donde x_{eff} , y_{eff} y H_{eff} son dimensiones extrapoladas del núcleo del reactor, y ϕ_{max} es función de la potencia térmica P_x :

$$\phi_{max} = \frac{3.8758P_x}{w_f \Sigma_f V_x} \quad (7.13)$$

El volumen del núcleo se calcula considerando las dimensiones efectivas, *i.e.*, $V_x = x_{eff} y_{eff} H_{eff}$. La densidad de potencia es crucial para acoplar el termofluido, la transferencia de calor en el combustible con el proceso de neutrones a través del término $\phi_0(\mathbf{r})$, como una condición inicial idónea.

Para obtener los parámetros nucleares involucrados en las ecuaciones anteriores, definimos un modelo 3D detallado del SFR y realizamos un análisis con el código Monte Carlo Serpent. Como se mencionó anteriormente, en este ejercicio se simula un núcleo alimentado con MOX de 3600 MW. El caso seleccionado es uno de los núcleos definidos en el “SFR Benchmark Task Force of OECD/NEA Working Party on Reactor Systems (WPRS)” (Blanchet, Buiron, Nicolas, Kim & Taiwo, 2017). Este subgrupo de OECD/NEA es un esfuerzo internacional para mejorar el análisis de incertidumbre en el modelado para el diseño, operación y análisis de seguridad de los SFR (SFR-UAM) que agrupa a varios países que trabajan juntos para definir las mejores prácticas en el análisis de reactores de neutrones rápidos, incluida la generación de parámetros nucleares (Rimpault *et al.*, 2017).

Serpent es un código estocástico que resuelve la ecuación de transporte de neutrones en un enfoque de energía continua y produce parámetros neutrónicos para toda la configuración o algunas regiones. Los métodos de Monte Carlo proporcionan soluciones aproximadas a una variedad de problemas matemáticos mediante la realización de experimentos de muestreo estadístico. Se basan en una colección de diferentes métodos que realizan muchas simulaciones utilizando números aleatorios y probabilidades para obtener una aproximación de la respuesta a cualquier problema. En los cálculos de transporte de neutrones, la aplicabilidad de las técnicas de Monte Carlo surge del hecho de que las secciones eficaces macroscópicas pueden interpretarse como una probabilidad de interacción por unidad de distancia recorrida por un neutrón. Por lo tanto, en el método de Monte Carlo se genera un conjunto de historias de neutrones siguiendo neutrones individuales a través de colisiones sucesivas. Las ubicaciones de las colisiones reales y los resultados de dichas colisiones, por ejemplo, la dirección y

la energía del neutrón (o neutrones) emergentes, se determinan a partir del rango de posibilidades mediante conjuntos de números aleatorios.

Del-Valle-Gallegos *et al.* (2018) presenta una descripción completa del código Serpent utilizado, donde también se presenta brevemente una descripción de la metodología para la generación de secciones transversales (XS). En la **Tabla 7.1** se presentan los parámetros nucleares calculados con Serpent.

Tabla 7.1. Parámetros nucleares calculados con Serpent.

Región del núcleo

$$D_c = 1.4303 \text{ [cm]}, \Sigma_a = 0.004835 \text{ [1/cm]}, \Sigma_f = 0.001782 \text{ [1/cm]},$$

$$v_n = 88.46 \times 10^6 \text{ [cm/s]}, w_f = 208.087 \text{ [MeV]}, \nu = 2.92 \text{ [neutrones]}.$$

Región del reflector

$$D_r = 1.5162 \text{ [cm]}, \Sigma_a = 0.001842 \text{ [1/cm]}, \nu_n = 33.330 \times 10^6 \text{ [cm/s]}.$$

Cinética neutrónica

$$\lambda_1 = 0.0127095 \text{ [1/s]}, \lambda_2 = 0.0301051 \text{ [1/s]}, \lambda_3 = 0.112269 \text{ [1/s]},$$

$$\lambda_4 = 0.327525 \text{ [1/s]}, \lambda_5 = 1.23099 \text{ [1/s]}, \lambda_6 = 8.1784 \text{ [1/s]},$$

$$\beta_1 = 6.75 \times 10^{-5}, \beta_2 = 6.66 \times 10^{-4}, \beta_3 = 5.11 \times 10^{-4},$$

$$\beta_4 = 1.43 \times 10^{-3}, \beta_5 = 6.43 \times 10^{-4}, \beta_6 = 1.7 \times 10^{-4}; \beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i = 0.0028881.$$

El tiempo medio de generación de neutrones para SFR

$$\Lambda = 4.48274 \times 10^{-7} \text{ [s]}.$$

7.3. Ecuaciones de gobierno a escala del reactor

El problema directo o local, constituye las ecuaciones de energía de un *pin* de combustible y su metal líquido circundante. De esta manera, la ecuación de energía local para un *pin* de combustible y su metal líquido circundante se escaló espa-

cialmente hasta el ensamble de combustible para representar el núcleo completo del reactor. El procedimiento de escalamiento de la escala de *pin* a escala del núcleo del reactor se realiza integrando sobre un volumen representativo dentro de un ensamble de combustible. El modelo escalado contiene dos ecuaciones de energía acopladas y tres problemas de frontera que permiten calcular numéricamente los coeficientes escalados.

Los problemas de frontera consisten en problemas de valor límite, cuya solución debe llevarse a cabo en una geometría representativa del conjunto de combustible. Los problemas de frontera se resolvieron numéricamente para obtener los *coeficientes variables*, con las que finalmente se obtienen los coeficientes escalados relacionados con la conductividad y la transferencia de calor por convección se presentan en el **Capítulo 6**.

Las ecuaciones de transporte de calor escaladas para describir el comportamiento del reactor contienen dos ecuaciones de energía acopladas:

Combustible:

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \mathbf{u}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{u}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \\ + \nabla \cdot [\mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m] - a_v h (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m) + \varepsilon_f \langle q_c''(\mathbf{r}, t) \rangle^c \end{aligned} \quad (7.14)$$

Sodio:

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C p)_m \varepsilon_m \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m) = \mathbf{u}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{u}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f \\ + \nabla \cdot [\mathbf{K}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{K}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f] - a_v h (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \end{aligned} \quad (7.15)$$

En estas ecuaciones ε_f y ε_m son las fracciones de volumen del combustible nuclear y del sodio, respectivamente. Los coeficientes escalados de estas ecuaciones tienen un significado representativo según el mecanismo de transporte de calor: \mathbf{K} es el tensor de coeficiente térmico escalado, \mathbf{u} es el vector de *pseudovelocity* asociado con los procesos de transporte de calor conductivo-convectivo, y $a_v h$ es el coeficiente de transferencia de calor volumétrico que depende principalmente de la diferencia de temperatura entre el fluido y el combustible. El término \mathbf{u} , está

directamente relacionada con las temperaturas medias intrínsecas y la velocidad del líquido refrigerante.

Los coeficientes escalados se obtuvieron en el **Capítulo 6** en función de la velocidad del flujo de enfriamiento. La magnitud de la velocidad mínima es de alrededor de 0.6 [m/s], que corresponde a la velocidad establecida en el parámetro de incertidumbre en el modelado, diseño, operación y análisis de seguridad de los SFR, siendo la magnitud de la velocidad nominal de alrededor de 5 [m/s].

En la **Figura 7.2** se presentan algunos componentes de los coeficientes efectivos del tensor de conductividad térmica. En dichos gráficos es posible observar un componente zz prácticamente constante para los coeficientes relacionados con el metal; los componentes xx y yy restantes dependen significativamente de la velocidad del fluido.

La **Figura 7.3** muestra los vectores de *pseudovelocidad* \mathbf{u} . Estos gráficos demuestran la influencia de la velocidad del fluido sobre la convección del metal líquido; en este caso, el coeficiente asociado al metal sufre la mayor dependencia con la velocidad del fluido.

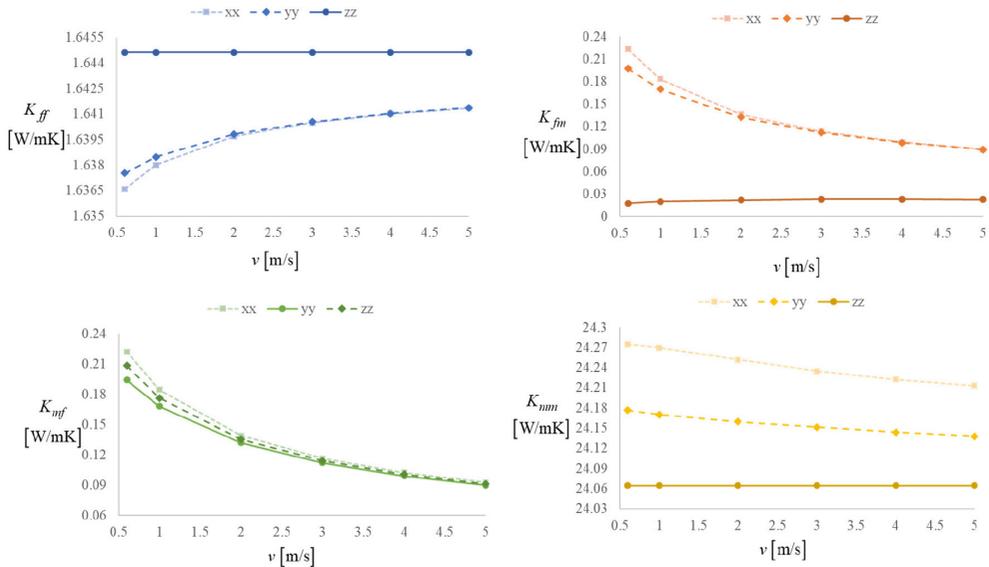


Figura 7.2. Coeficiente escalado relacionados con los tensores térmicos [W/(m·K)] como función de la velocidad del sodio.

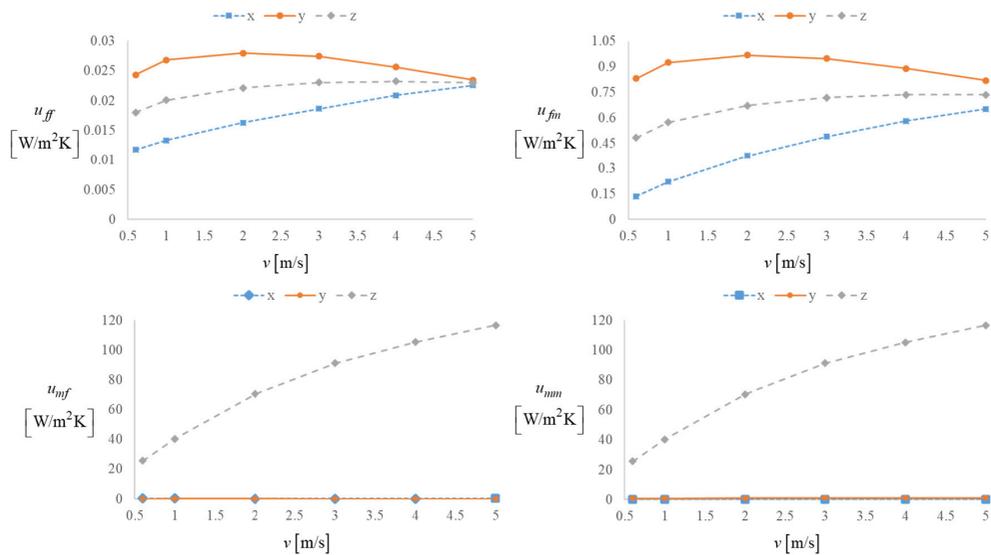


Figura 7.3. Coeficientes escalados relativos a los vectores de pseudovelocidad [W/(m²K)] como función de la velocidad del sodio.

Encontramos que el coeficiente de transferencia de calor volumétrico es alrededor de:

$$a_v h [\text{W}/(\text{m}^3 \text{K})] = 2\,213\,000 \quad (7.16)$$

Este parámetro se ve débilmente afectado por la velocidad del fluido, ya que depende principalmente de la diferencia de temperatura entre el fluido y el combustible.

En el **Capítulo 6**, se presentan las capacidades predictivas del modelo escalado de transferencia de calor dado por (7.14) y (7.15), que se evaluaron mediante comparación con simulaciones numéricas directas. La transferencia de calor y los procesos neutrónicos interactúan fuertemente a través de la densidad de potencia $\langle q'''(\mathbf{r}, t) \rangle^f$, que es de origen nuclear y requiere el tratamiento de la física de los reactores nucleares para describir las interacciones de los neutrones y los fenómenos de retroalimentación.

7.4. Reactividad inherente

El modelo de reactividad aplicado en este trabajo considera cuatro contribuciones para calcular la reactividad total $\rho(\mathbf{r}, t)$: la reactividad externa $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$ debido a barras de control, reactividad debida a efectos de expansión del sodio $\rho_m(\mathbf{r}, t)$ como función de la temperatura del sodio, reactividad debida a expansión del combustible $\rho_f(\mathbf{r}, t)$ y reactividad por efecto Doppler $\rho_D(\mathbf{r}, t)$ como función de la temperatura de combustible. Es importante mencionar que el coeficiente de expansión del combustible considera también los efectos de expansión en el revestimiento. Entonces la reactividad total está dada por:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_m(\mathbf{r}, t) + \rho_f(\mathbf{r}, t) + \rho_D(\mathbf{r}, t) \quad (7.17)$$

donde:

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \alpha_m \left(\langle T_m(\mathbf{r}, t) \rangle^m - \langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m \right) \quad (7.18)$$

$$\rho_f = \alpha_f \left(\langle T_f(\mathbf{r}, t) \rangle^f - \langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f \right) \quad (7.19)$$

$$\rho_D(\mathbf{r}, t) = \alpha_D \ln \left(\frac{\langle T_f(\mathbf{r}, t) \rangle^f}{\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f} \right) \quad (7.20)$$

El subíndice 0 se refiere a un valor de referencia, que pueden ser condiciones nominales del reactor SFR. Los coeficientes de reactividad se presentan en la **Tabla 7.2**.

7.5. Acoplamiento nuclear-termo-fluido

El diagrama de acoplamiento nuclear con los fenómenos físicos no nucleares de un núcleo reflectado considera tres módulos principales: (a) módulo acoplado y

Tabla 7.2. Coeficientes de reactividad (Waltar, Todd & Tsvetkov, 2011).

α_m [pcm/K]	α_f [pcm/K]	α_D [pcm]
-0.455	-0.2625	-834

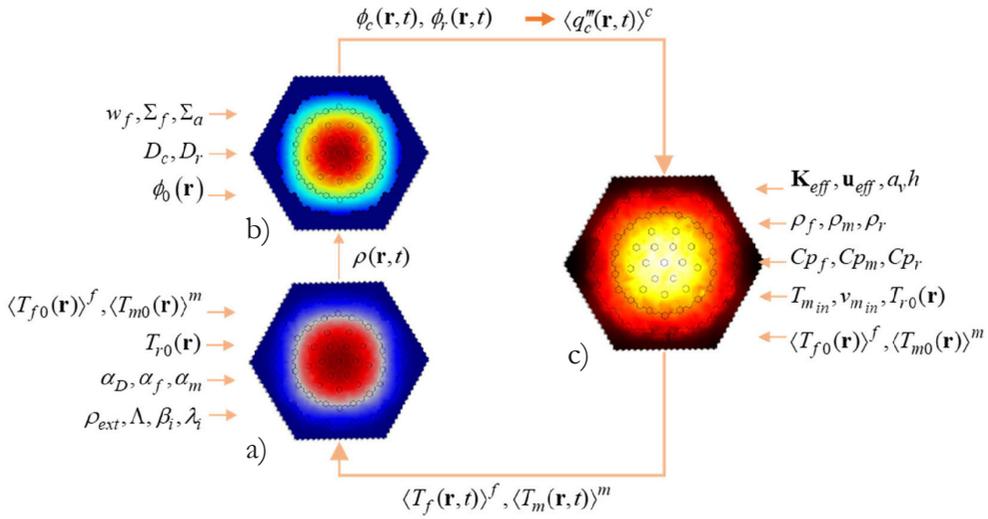


Figura 7.4. Acoplamiento-escalado del reactor SFR.

retroalimentación, (b) módulo neutrónico y (c) módulo de transferencia de calor del combustible y termofluido del sodio, como se ilustra en la **Figura 7.4**.

Como se presenta en la **Figura 7.4a**, los campos de temperatura que se requieren como condiciones iniciales son: $\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f$ y $\langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m$ y parámetros nucleares, para calcular las reactividades $\rho(\mathbf{r}, t)$, adicional a la reactividad externa ρ_{ext} como se mencionó anteriormente debido al movimiento de barras de control.

La condición inicial del flujo de neutrones $\phi_0(\mathbf{r})$ se aproxima considerando un núcleo de reactor paralelepípedo rectangular finito, dado por (7.12) y los parámetros nucleares son necesarios para calcular el flujo neutrónico en la región del $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ y región del reflector $\phi_r(\mathbf{r}, t)$, el cual está representado en la **Figura 7.4b**. Para calcular el campo de temperaturas del combustible $\langle T_f \rangle^f$ y el sodio $\langle T_m \rangle^m$ con el modelo escalado, primero es necesario evaluar la densidad de potencia $\langle q^m(\mathbf{r}, t) \rangle^f$. Después se aplica las condiciones iniciales $\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f$ y $\langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m$, y los coeficientes escalados de transferencia de calor, y propiedades físicas como se ilustra en la **Figura 7.4c**. Estas temperaturas, a su vez, se retroalimentan al modelo acoplado-escalado para recalculer el valor de reactividad y el flujo de neutrones en cada región y obtener la densidad de potencia actualizado.

SIMULACIÓN ESCALADA DEL REACTOR SFR

8.1. Implementación

La implementación en computadora, del modelo escalado de transferencia de calor y el modelo neutrónico del núcleo reflejado en geometría 3D, se llevó a cabo con CFD. Este software se basa en subrutinas de elementos finitos con discretización avanzada y procedimientos iterativos para encontrar la solución numérica de un conjunto complicado de ecuaciones diferenciales parciales.

La geometría considerada incluye las zonas del núcleo interno y externo, la zona del reflector y las barras de control primarias y secundarias, como se ilustra en la **Figura 8.1a**. Todo el dominio discretizado contiene 46441 elementos tetraédricos como se muestra en la **Figura 8.1b**. El error absoluto en el cálculo con dicha discretización de malla es 1.6×10^{-14} , mientras que la convergencia se alcanzó en dos iteraciones.

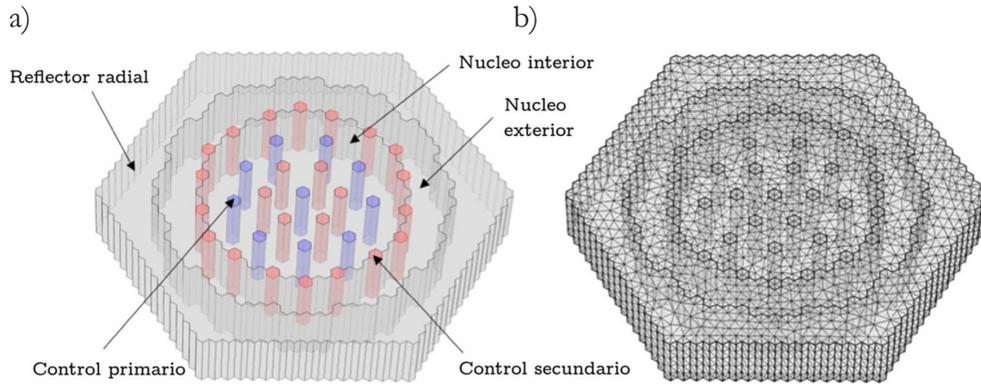


Figura 8.1. (a) Geometría del núcleo reflectado, (b) Dominio computacional: 46441 elementos tetraédricos.

8.2. Solución en estado estacionario

A continuación, se presentan los resultados numéricos de la implementación de los modelos neutrónicos y de transferencia de calor. A partir de la distribución inicial del flujo de neutrones, se calcula el flujo de neutrones considerando las características del combustible y del refrigerante del SFR. El flujo de neutrones se calcula para el 100[%] y el 75[%] de la potencia.

En la **Figura 8.2** se muestra el comportamiento del flujo de neutrones, siendo máximo en el centro del núcleo, eventualmente disminuye debido a la geometría y materiales del núcleo. Inicialmente, el flujo neutrónico es cero en el área externa del núcleo, correspondiente a la zona del reflector. Para el 75[%] de la potencia, el flujo de neutrones disminuye dos órdenes de magnitud con respecto al valor máximo para el 100[%] de la potencia nominal.

Los neutrones retardados se originan a partir de la desintegración radiactiva de los núcleos producidos en la fisión y, por lo tanto, son diferentes para cada material fisil. Estos son emitidos algún tiempo apreciable después de la fisión, por fragmentos de fisión. En la **Figura 8.2**, se presenta la contribución de los precursores de neutrones retardados para el 100[%] y el 75[%] de la potencia; esta proyección xy se encuentra en el centro del núcleo, $z = 0.5 H_{eff}$.

La densidad de potencia obtenida partir del flujo de neutrones, es esencial para determinar el campo de temperaturas del combustible y temperatura del sodio con el modelo escalado de dos temperaturas.

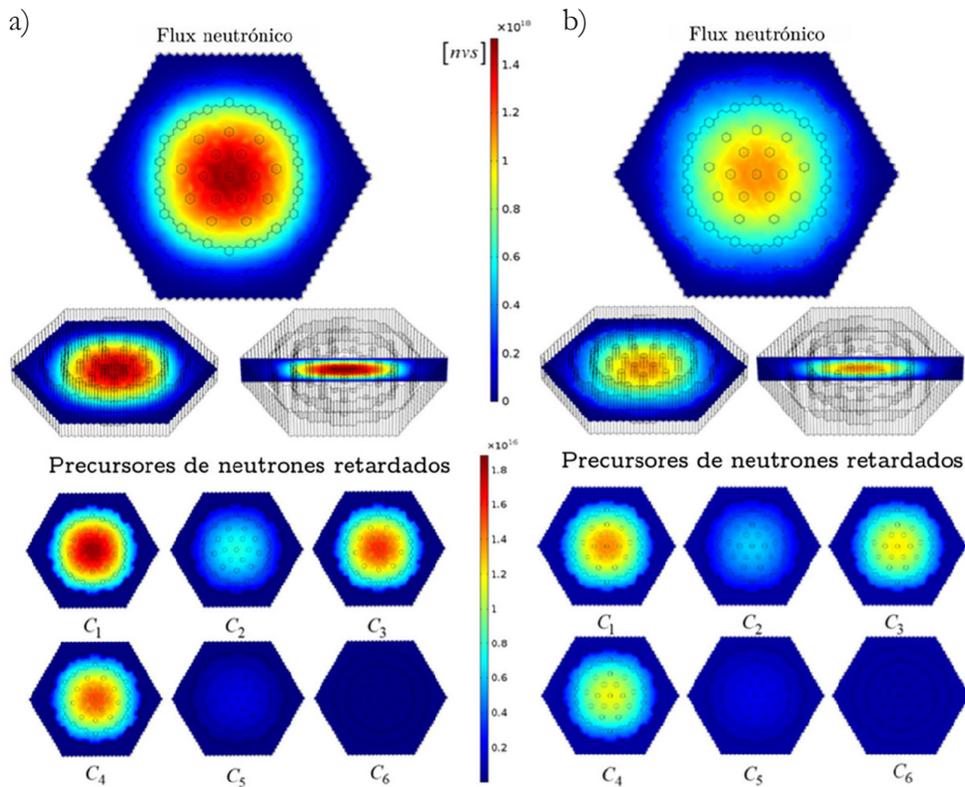


Figura 8.2. Flujo neutrónico [nvs] y precursores de neutrones [$1/\text{cm}^3$] del SFR
(a) 100[%] de potencia y (b) 75[%] de potencia.

En la **Figura 8.3**, se representan gráficamente las temperaturas del combustible y del refrigerante para el 100[%] y el 75[%] de la potencia. Es evidente que la temperatura máxima se produce en el centro del núcleo, que está alrededor de los 2000 [K]. La temperatura promedio del combustible al 100[%] de la potencia es de 1449 [K], una unidad por debajo del valor de referencia de diseño 1500 [K], mientras que para el 75[%] de la potencia nominal es de 1253.93 [K].

En la misma figura, para la temperatura del sodio, se traza la proyección de la temperatura en el plano xy para tres posiciones de altura diferentes en el núcleo: $z = 0, 0.5 H_{eff}$ y H_{eff} para observar la distribución de la temperatura en función de la velocidad y la posición del fluido. El valor promedio de la temperatura exterior es de 813.63 [K], cinco unidades inferiores que el valor de diseño, es decir, 818.15 [K], y al 75 [%] de la potencia la temperatura es de 777.26 [K].

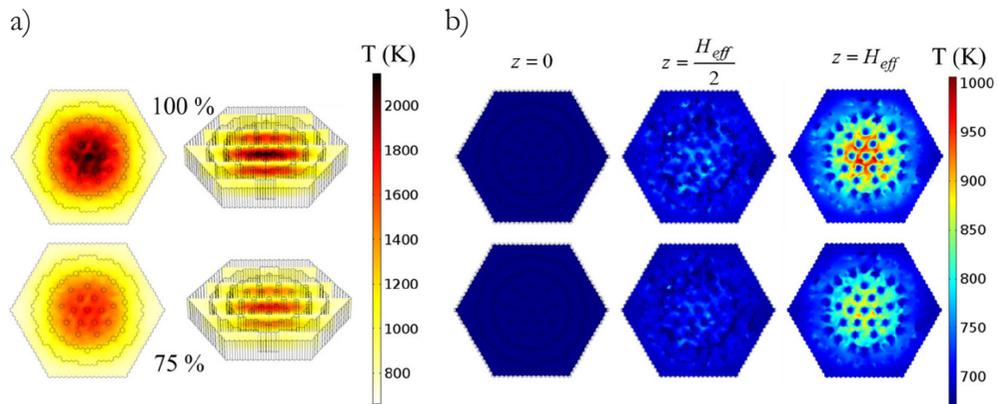


Figura 8.3. Temperaturas a 100[%] y 75[%] de potencia: (a) Combustible y (b) Sodio.

Una vez implementados los modelos neutrónicos y de transferencia de calor, realizamos experimentos numéricos para diferentes reactividades que corresponden a los siguientes tres escenarios:

- Cambio global en reactividad
- Cambio de reactividad en el sistema de control secundario,
- Cambio de reactividad en un grupo barras de control.

El cambio de reactividad puede ser positivo o negativo que permite analizar los cambios en el flujo de neutrones, temperaturas del combustible y temperaturas del sodio.

El cambio de reactividad se inserta a través del término $\rho_{ext}(\mathbf{r})$ y los resultados mantienen el perfil de potencia en todas las direcciones, es decir, radial, axial y azimutal. En este escenario, la temperatura promedio del combustible varió alrededor de 100[°C] y la del sodio 10 [°C], respecto al valor en estado estacionario.

Se puede observar en esta tabla que ante una inserción de reactividad global de 1000 [pcm], la potencia aumenta un 10[%]. Por el contrario, al disminuir la reactividad -1000 [pcm], la potencia disminuyó un 12[%] de la potencia nominal.

8.3. Reactividad del sistema de control secundario

El segundo experimento numérico está dedicado a los cambios de reactividad en el sistema de control secundario. La **Figura 8.4** presenta la reactividad en el núcleo del reactor, el valor inicial de estado estable de reactividad (figura central), la inserción de la reactividad positiva de 20000 [pcm] (figura superior) y una reactividad negativa de -50000 pcm (figura inferior) en el sistema de control secundario.

El cambio de reactividad se realiza solo en conjuntos específicos, lo que provoca variaciones en el flujo de neutrones y en la distribución de las temperaturas del combustible y del refrigerante. Para el caso de inserción positiva, el flujo de neutrones aumenta en los alrededores de las barras de control, mientras que para una inserción negativa, el flujo de neutrones disminuye alrededor de los ensambles del sistema de control.

En la **Figura 8.4** también se representa el comportamiento de las temperaturas del combustible y del sodio cuando cambia la reactividad del sistema de control secundario. A diferencia del primer experimento, en este caso la distribución de temperaturas no es uniforme. Esto se observa principalmente en la distribución de temperatura del combustible. Al aumentar la reactividad, la temperatura del combustible aumenta, y con una inserción de reactividad

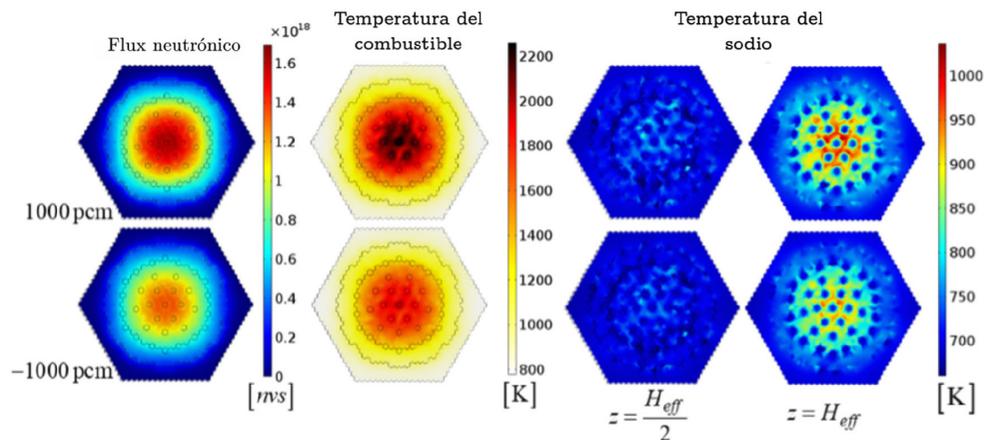


Figura 8.4. Reactividad del sistema de control secundario.

Tabla 8.1. Reactividad en el sistema secundario.

Reactividad [pcm]	Temperatura de sodio [K]	Temperatura promedio de combustible [K]	Flujo neutrónico máximo [nvs]	Flujo neutrónico promedio [nvs]	Potencia térmica [MW]
*0	811.87	1439.73	1.51064E+18	3.43112E+17	3601.61
+20000	830.45	1535.48	2.08446E+18	3.88842E+17	4057.58
-50000	790.72	1330.10	1.38352E+18	2.91456E+17	3081.62

*Estado estable

negativa la temperatura disminuye debido a la reducción del flujo de neutrones. Estos cambios en la temperatura del combustible impactan directamente en la temperatura del sodio.

En la **Tabla 8.1** se presentan la temperatura del núcleo, el flujo de neutrones y la potencia. En este caso, el cambio en la potencia es relevante. No obstante, la temperatura promedio del combustible no cambia significativamente.

8.4. Reactividad por barras de control

El tercer experimento se refiere a simular una inserción de reactividad debido al movimiento de una barra de control. En este caso, la reactividad agregada en el caso positivo es de 30000 [pcm] y negativo de -50000 [pcm]. La **Figura 8.5** muestra la reactividad en el núcleo y la barra de control seleccionada. En el lado izquierdo de la figura, es posible observar el impacto de la reactividad en el flujo de neutrones.

Como se esperaba, el flujo de neutrones no es uniforme alrededor de la barra modificada. El cambio en la reactividad de un conjunto genera variaciones en las temperaturas del combustible y del sodio. El mapa de la distribución de temperaturas presentado en la **Figura 8.5** muestra que la temperatura del combustible está más influenciada por el cambio de reactividad en una barra de control que en el refrigerante. De esta manera, es posible observar el impacto de los cambios de reactividad en el núcleo del reactor nuclear sin necesidad de utilizar muchas herramientas computacionales y memoria.

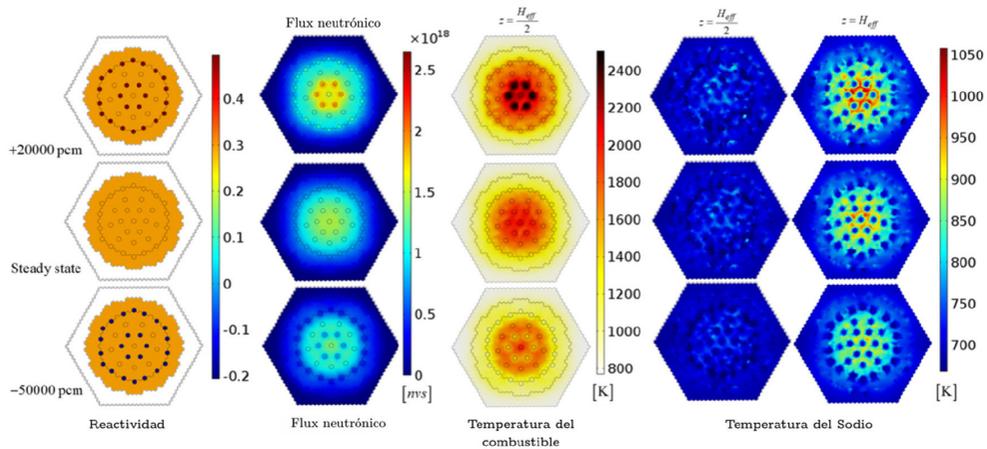


Figura 8.5. Reactividad en barras de control.

Tabla 8.2. Reactividad en barra de control.

Reactividad [pcm]	Temperatura de sodio [K]	Temperatura promedio de combustible [K]	Flujo neutrónico máximo [nvs]	Flujo neutrónico promedio [nvs]	Potencia térmica [MW]
*0	811.87	1439.73	1.51064E+18	3.43112E+17	3601.61
+30000	813.54	1452.15	2.06422E+18	3.47109E+17	3642.30
+50000	810.75	1431.37	1.50998E+18	3.40443E+17	3574.12

*Estado estable

En la **Tabla 8.2** se presentan las temperaturas del combustible y del sodio, el flujo neutrónico y la potencia. En este caso las variaciones en la potencia y las temperaturas promedio son relativamente pequeñas.

8.5. Flujo neutrónico asimétrico

En la **Figura 8.6** se representan las secciones transversales del núcleo para observar el efecto del cambio de reactividad en una barra de control sobre el flujo de neutrones. Se observa el impacto en la distribución del flujo de neutrones. La distribución asimétrica del flujo de neutrones es evidente cuando el cambio de

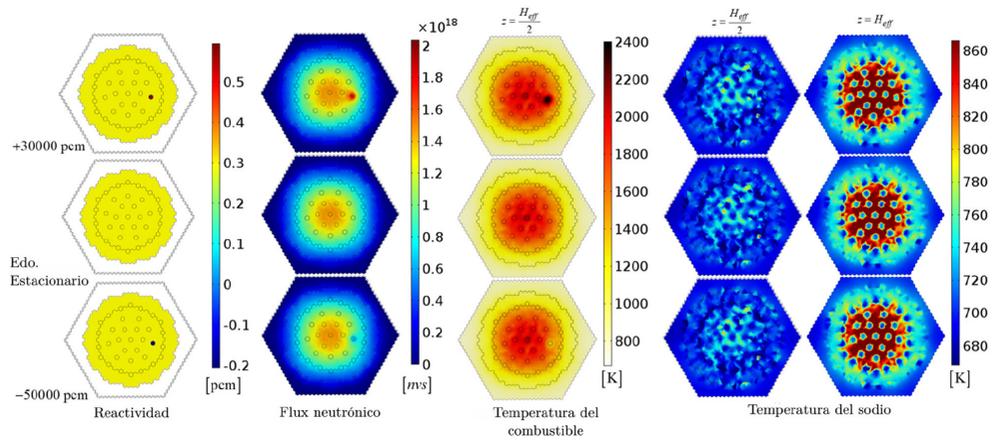


Figura 8.6. Flujo neutrónico asimétrico.

reactividad es positivo o negativo, siendo más notoria cuando es positivo. En la parte inferior de esta figura se presentan los perfiles del flujo neutrónico. Como se esperaba con este experimento numérico, el flujo cambia apreciablemente dependiendo de la reactividad insertada y su posición. En el caso del lado izquierdo, la inserción es positiva, lo que aumenta el flujo neutrónico en esa región. En el caso del lado derecho, la inserción es negativa, lo que lleva a una disminución del flujo neutrónico.

8.6. Análisis a escalas inferiores

Los modelos matemáticos acoplados se emplean dentro de un procedimiento llamado *downscaling* que significa reducción de escala, que representa una metodología novedosa con alcances más allá de los problemas convencionales en procesos de transporte de calor en reactores nucleares. El proceso de *downscaling* nos permite aumentar el grado de resolución en el núcleo del reactor, ya que considera la escala del conjunto de combustible y la de los *pin*s individuales en la escala más pequeña, es decir, un solo *pin* de combustible rodeado de metal líquido. Este punto es crucial para analizar los puntos calientes en el núcleo del reactor.

El modelo de transferencia de calor escalado-acoplado con el modelo neutrónico, implementado en un esquema 3D del núcleo para un SFR se combinan para obtener la distribución de temperatura del combustible y del sodio. Este conjunto de modelos permite conocer el comportamiento completo del núcleo

y la distribución del flujo neutrónico, además de las temperaturas del combustible y del sodio. Si un área dada del núcleo presenta una perturbación, como se muestran en la sección anterior, es posible observar el efecto en el núcleo utilizando menos recursos computacionales y tiempo. Sin embargo, los resultados proporcionados por el modelo escalado permiten examinar solo la distribución de las temperaturas del sodio y del combustible en el núcleo, lo que aproxima el flujo de neutrones y los comportamientos de transferencia de calor a escalas inferiores, es decir, temperaturas del combustible, holgura (el espacio entre capas), el revestimiento y los materiales de la estructura. En términos de fidelidad de los resultados, la resolución se modera en cierto sentido con el modelo escalado.

Con el objetivo de obtener una mayor resolución del fenómeno a escalas inferiores, se introduce aquí el concepto de proceso de *downscaling* para obtener resultados a nivel de ensamble y de barras de combustible en términos del proceso de transferencia de calor. La fidelidad significa resaltar la precisión de los resultados a escalas más pequeñas. En el proceso de *downscaling*, se obtiene más fidelidad con la reducción de la escala de observación, lo que lleva a utilizar modelos de transferencia de calor específicos para cada escala. De este modo, a partir de los resultados a escala, la información se envía a la siguiente escala inferior y se utiliza para obtener nuevos resultados válidos a esa escala.

El proceso de *downscaling* es un procedimiento conceptual, donde la distribución de potencia se pasa directamente de una escala a otra escala. Para el caso en estudio, el proceso de *downscaling* involucra tres escalas de análisis:

- (i) El núcleo del reactor es la primera escala,
- (ii) La segunda escala es el nivel del ensamble de combustible,
- (iii) La última escala es la barra de combustible, que utiliza un modelo de transferencia de calor desarrollado a partir del análisis del subcanal.

Para los niveles de ensamble y barra, la información del flujo neutrónico se envía desde el modelo del núcleo. Para la escala de ensamble, se utilizó el modelo escalado de ecuaciones, mientras que, para la escala de barra de combustible, las ecuaciones utilizadas para obtener las temperaturas están dadas por:

Modelo de transferencia de calor en las pastillas de combustible:

$$\left(\rho_f C_{p_f}\right) \frac{\partial T_f}{\partial t} = k_f \nabla^2 T_f + q'''(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{r} \in \Omega_f \quad (8.1)$$

La densidad de potencia $q'''(\mathbf{r}, t)$ se obtiene del modelo neutrónico en la posición correspondiente de análisis.

Las condiciones de frontera son,

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}''_f = \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}''_g \quad \Omega_f \cap \Omega_g \quad (8.2)$$

Las condiciones iniciales son,

$$T_f(\mathbf{r}, 0) = T_f(\mathbf{r}) \quad \mathbf{r} \in \Omega_f \quad (8.3)$$

Holgura (gap):

En la región de la holgura se encuentra el gas helio, donde debido a la diferencia de temperaturas puede producirse convección natural. En esta región el modelo de transferencia de calor viene dado por:

$$\rho_g C_{p_g} \frac{\partial T_g}{\partial t} + \rho_g C_{p_g} \mathbf{v}_g \cdot \nabla T_g - k_g \nabla^2 T_g = 0 \quad \mathbf{r} \in \Omega_g \quad (8.4)$$

donde \mathbf{v}_g es el vector de velocidad del helio en la holgura. Para la ecuación de balance de cantidad de movimiento, se desprecian los efectos convectivos, lo que conduce a un modelo de flujo laminar dado por:

$$\rho_g \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \Delta P + \rho g - \mu_g \nabla^2 \mathbf{v}_g \quad \mathbf{r} \in \Omega_g \quad (8.5)$$

donde ΔP es la caída de presión, g es la aceleración de la gravedad y μ es la viscosidad del helio. En el fenómeno de convección natural, la fuerza motriz del movimiento es de tipo térmico, es decir, la ecuación de cantidad de movimiento está acoplada con la ecuación de energía. Usando la aproximación de Boussinesq, se obtiene:

$$\rho_g \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \Delta P + \rho g \beta (T - T_\infty) - \mu_g \nabla^2 \mathbf{v}_g \quad \mathbf{r} \in \Omega_g \quad (8.6)$$

donde T_∞ es la temperatura del helio.

Las condiciones de frontera son:

$$\mathbf{v}_m = 0 \quad \text{en} \quad \Omega_f \cap \Omega_g, \Omega_g \cap \Omega_c \quad (8.7)$$

$$q_f'' = h_g(T_f - T_g) \quad \Omega_f \cap \Omega_g \quad (8.8)$$

$$q_g'' = h_g(T_c - T_g) \quad \Omega_g \cap \Omega_c \quad (8.9)$$

donde h_g es el coeficiente de transferencia de calor.

Las condiciones iniciales son:

$$T_g(\mathbf{r}, 0) = T_g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_g \quad (8.10)$$

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{r}, 0) = \mathbf{v}_g(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_g \quad (8.11)$$

Modelo del revestimiento:

En la sección de revestimiento, la transferencia de calor se modela considerando transporte molecular:

$$\left(\rho_c C_{p_c}\right) \frac{\partial T_c}{\partial t} = k_c \nabla^2 T_c \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (8.12)$$

Condición de frontera:

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_g'' = \mathbf{n} \cdot \mathbf{q}_c'', \quad \Omega_g \cap \Omega_c \quad (8.13)$$

Condición inicial:

$$T_c(\mathbf{r}, 0) = T_c(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (8.14)$$

Modelo del metal líquido:

El modelo del refrigerante incluye los balances de transferencia de calor y cantidad de movimiento:

$$\rho_m \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = -\nabla \cdot (P\mathbf{I}) + \rho_m \mathbf{g} - \mu_g \nabla^2 \mathbf{v}_m \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (8.15)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0 \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (8.16)$$

$$\rho_m C_{p_m} \frac{\partial T_m}{\partial t} + \rho_m C_{p_m} \mathbf{v}_m \cdot \nabla T_m - k_m \nabla^2 T_m = 0 \quad \mathbf{r} \in \Omega_m \quad (8.17)$$

Condiciones de frontera:

$$\mathbf{v}_m = \mathbf{v}_{m0}, \quad q'' = 0, \quad T_m = T_{in} \quad \text{en} \quad z = 0 \quad (8.18)$$

$$P = P_{atm} \quad \text{en} \quad z = L \quad (8.19)$$

$$q'' = h_m (T_m - T_\infty), \quad \Omega_c \cap \Omega_m \quad (8.20)$$

Condiciones iniciales:

$$\mathbf{v}_m(\mathbf{r}, 0) = \mathbf{v}_m(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_m \quad (8.21)$$

$$T_m(\mathbf{r}, 0) = T_m(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_m \quad (8.22)$$

8.7. Método de reducción de escala

La metodología que a continuación se presenta surge de la necesidad de realizar un análisis de seguridad con mayor grado de fidelidad, especialmente en los focos calientes que se pueden apreciar a simple vista a la escala del núcleo del reactor. Sin embargo, es una metodología heurística y no tiene una comprobación matemática rigurosa, desarrollarla representa una gran contribución.

La metodología seguida está basada en los siguientes pasos:

Paso 1 Localizar el área de interés, a escala de ensamble contenida en el núcleo del reactor.

- Paso 2** Recopilar información sobre la densidad de potencia a través del campo de flujo neutrónico, combustible y temperaturas a escala de ensamble.
- Paso 3** Utilizar la información obtenida en el punto anterior como condiciones iniciales en el modelo a escala de ensamble de combustible.
- Paso 4** A la escala de ensamble, localizar el *pin* de combustible de interés.
- Paso 5** Recopilar información de la densidad de potencia como se mencionó anteriormente en el Paso 2 pero a escala de *pin*.
- Paso 6** Emplear la información a nivel de ensamble en el modelo de *pin* y luego utilizar dicha información como condiciones iniciales para calcular los perfiles de temperatura del combustible, el espacio entre las barras, el revestimiento y el metal.

En el **Paso 1**, es crucial para el análisis *downscale* porque los resultados obtenidos a la escala de reactor como por ejemplo la **Figura 8.6** se puede identificar, la región que presenta un interés específico de analizar, que puede ser en picos de potencia. Entonces este primer paso puede ser analizado a la escala del reactor cuyos resultados son obtenidos con los modelos y los coeficientes escalados de transferencia de calor.

Este proceso permite utilizar los valores a escala del núcleo del reactor para obtener las temperaturas a escala de ensamble y de barra de combustible, conservando información valiosa como las propiedades escaladas incluidas en el modelo escalado.

En la **Figura 8.7** se presentan los niveles en cada escala y la dirección que sigue la información durante el procedimiento de reducción de escala o *downscale*. En el lado más a la izquierda, a partir del modelo escalado se genera la distribución de temperaturas de combustible y sodio.

Esta información se utiliza a nivel de subensamble para evaluar las temperaturas de escalado. Después de eso, para conocer la información a nivel de barra de combustible es necesario desarrollar y resolver un modelo matemático de cada sección de la barra de combustible para obtener las temperaturas de la pastilla de combustible, el espacio entre barras (*gap*), revestimiento (*clad*) y el sodio. A este nivel de escala, el procedimiento de reducción de escala utiliza el modelo de subcanal promedio.

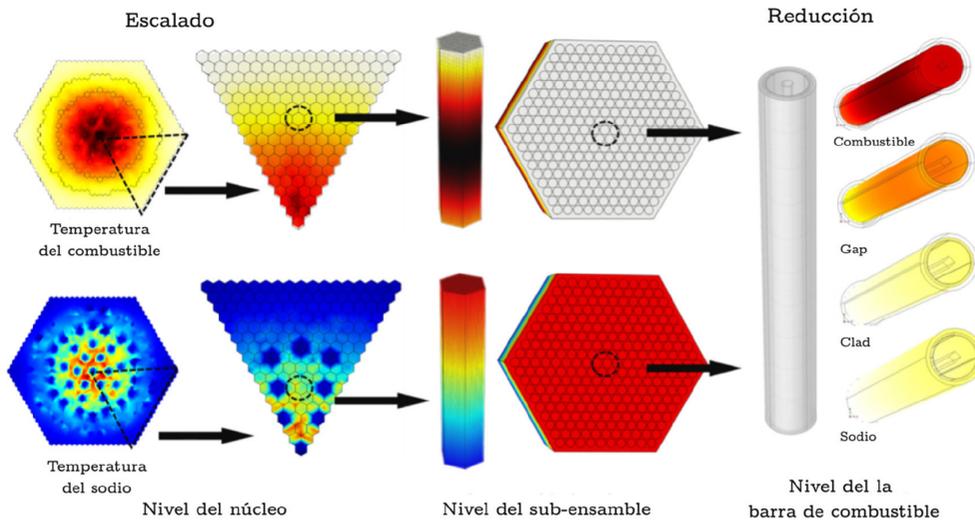


Figura 8.7. Proceso de reducción de escala del núcleo del reactor.

La **Figura 8.8** muestra la distribución de temperatura del combustible y del sodio en el ensamble de combustible, obtenida mediante el modelo escalado de transferencia de calor. En el perfil de temperatura del combustible se refleja la distribución de potencia, teniendo el máximo en la mitad de la altura del subconjunto. En

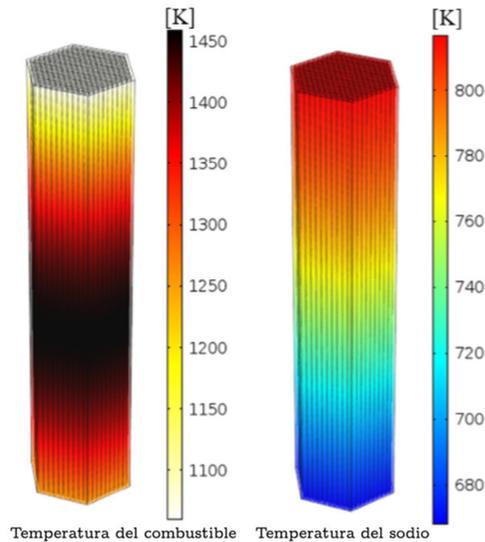


Figura 8.8. Temperaturas del combustible y del sodio en el ensamble de combustible.

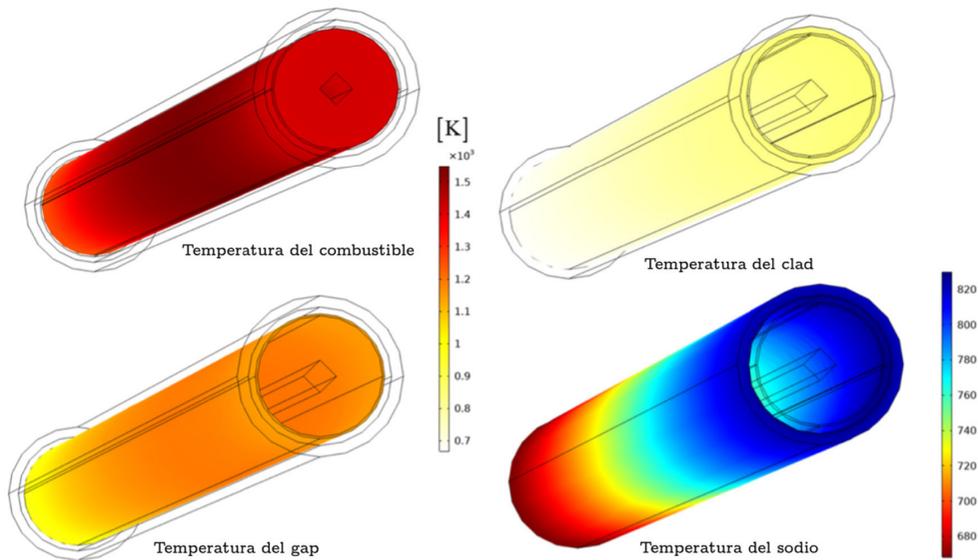


Figura 8.9. Perfiles de temperatura de combustible, holgura, encamisado y sodio.

cambio, para el sodio la temperatura máxima se obtiene en la parte superior de su altura. Se destaca que los valores obtenidos son cercanos a los valores de diseño.

Con la información del ensamble, se evalúa directamente la distribución de temperaturas del combustible, encamisado, holgura y sodio. En la **Figura 8.9** presentamos estos perfiles de temperatura, que provienen de la información del comportamiento a escala del núcleo del reactor. Las temperaturas obtenidas están en el margen de los valores de diseño. Los recursos computacionales demandados para obtener estos resultados son mucho mayores que los utilizados para los resultados del modelo escalado.

8.8. Resolución

Para aumentar el grado de resolución en el análisis de temperaturas y neutrónico, se utiliza un procedimiento de reducción de escala para migrar información a través del núcleo del reactor a escalas inferiores. Se considera la escala de un conjunto de combustible y el problema directo con varios *pin*s hasta la escala más pequeña, es decir, un *pin* de combustible y su metal líquido circundante. Este punto es de particular importancia para analizar puntos calientes en el núcleo del

reactor. En los experimentos numéricos de reactividad, se mostró que los resultados numéricos obtenidos por modelos de escala aumentada permiten observar el comportamiento del núcleo utilizando menos recursos computacionales, y es posible identificar aquellas zonas que necesitan un análisis detallado bajo escenarios de excursiones de potencia o reducción de refrigerante. Con el procedimiento de reducción de escala, la fidelidad de los resultados aumenta para variables de interés como las distribuciones de temperatura y el flujo de neutrones en escalas más bajas, *e.g.*, en los alrededores de una sola barra de combustible. La conjunción del modelo acoplado de escala aumentada con el modelo de núcleo reflectado neutrónico, y el procedimiento de reducción de escala posterior es una metodología novedosa con alcance más allá de los problemas de los procesos de transporte de calor.

SIMULACIÓN MULTIFÍSICO Y MULTIESCALA DEL REACTOR CEFR

9.1. Reactor CEFR

Como se mencionó anteriormente el método de escalamiento, permite el desarrollo de modelos que describen fenómenos a escala de reactor, comenzando desde la escala mínima que corresponde a una celda, compuesta por un *pin* de combustible nuclear y el refrigerante asociado. En principio, la metodología de escalamiento permite una alta fidelidad en la descripción de fenómenos multifísicos y multiescala. El resultado principal es el modelo de dos ecuaciones escaladas de no equilibrio para describir la distribución de temperatura del combustible y el refrigerante. Estos modelos de escalamiento se describen en términos de coeficientes escalados de transferencia de calor, para el Reactor Rápido Experimental Refrigerado con Sodio (CEFR). El uso de los nuevos modelos/metodología propuestos produce buenos resultados con tiempos computacionales más bajos en comparación con los códigos de Dinámica de Fluidos Computacional para simulaciones *pin a pin*, lo que resulta útil cuando los cálculos deben realizarse un gran número de veces, *e.g.*, para análisis de sensibilidad, análisis de transitorios, otras aplicaciones como

los analizadores de planta y para el entrenamiento de operadores en simuladores de alcance total.

El uso de herramientas CFD para el análisis térmico es una práctica muy extendida en el campo de la ingeniería nuclear, debido a su capacidad de gestionar geometrías complejas. Desafortunadamente, este tipo de herramientas tienen la desventaja de tener un alto costo computacional y ser muy sensibles al tamaño de la celda, la longitud del paso de tiempo o la elección del solucionador, lo que puede llevar a un gran proceso iterativo para seleccionar los parámetros correctos para un resultado convergente. Considerando estas desventajas, un solucionador térmico simplificado, pero efectivo podría representar una opción interesante para el análisis térmico de un modelo de núcleo del reactor 3D completo.

El reactor rápido experimental chino (CEFR) es un reactor rápido refrigerado por sodio (SFR) de tipo piscina de 65 [MWt] construido y operado por el Instituto Chino de Energía Atómica (CIAE) y es el primer reactor rápido en China, que alcanzó la criticidad por primera vez en 2010 (Huo, 2019). Antes de las pruebas de arranque, el CEFR pasó por una serie de experimentos que incluyeron la carga de combustible y la criticidad, la medición del valor de las barras de control, las mediciones de los coeficientes de reactividad y las mediciones de las láminas activadas. En los últimos años, se ha publicado un *benchmark* organizado por el OIEA y el CIAE, en el que se invita a participantes de todo el mundo compartiendo metodologías y resultados. Como en el *benchmark* los participantes tienen acceso a datos de diseño detallados y resultados experimentales, esta es una gran oportunidad para probar nuevas metodologías o códigos.

El CEFR se ha modelado y simulado utilizando diferentes códigos, el análisis termohidráulico del CEFR se realizó utilizando el código de análisis de subcanales SUBCHANFLOW. La simulación de transitorios del reactor experimental se ha desarrollado utilizando el código termohidráulico transitorio, para analizar varios accidentes base de diseño como LOFA protegido, LOHS y RIA. En algunos trabajos se ha aplicado un enfoque de porosidad para modelar el núcleo del reactor. En otros trabajos se han llevado a cabo investigaciones del fenómeno de flujo tridimensional y las características de transferencia de calor en el ensamble de combustible.

En capítulos anteriores se ha utilizado una metodología de análisis multiescala basada en la teoría del método de escalamiento para resolver el proceso termohidráulico como una opción para los modelos CFD completos. Esta metodología

se ha utilizado con éxito para resolver un SFR de grandes dimensiones, y los resultados mostraron un buen rendimiento en comparación con una solución CFD. En el caso del CEFR, el núcleo es relativamente pequeño e incluye diferentes tipos de conjuntos como control y fuente de neutrones. Se espera que tenga gradientes de flujo de neutrones importantes y no sea tan suave como en el gran núcleo estudiado anteriormente. Este trabajo pretende probar esta metodología en estas circunstancias.

Para acoplar los modelos de transferencia de calor escalados con un modelo cinético neutrónico simplificado, es necesario obtener el flujo de neutrones y la distribución de potencia, junto con parámetros como el coeficiente de difusión D_c , las secciones eficaces macroscópicas de absorción Σ_a y fisión Σ_f , la velocidad de los neutrones v_n , el número de neutrones por fisión ν y la potencia generada por la fisión ω_f . Todos estos parámetros deben calcularse para cada zona donde se resuelve el modelo. Los parámetros cinéticos puntuales se obtienen con el código estocástico Serpent (Leppänen *et al.*, 2015) modelando el núcleo heterogéneo 3D completo y agrupando cada tipo de subconjunto en una zona, es decir, todos los conjuntos de combustible se agrupan en una zona, todos los subconjuntos de blindaje en otra zona, y así sucesivamente. El conjunto de datos cinéticos puntuales se genera para cada zona agrupada y se extrae de la salida de Serpent con una herramienta de posprocesamiento desarrollada para este propósito. Las dos principales diferencias entre el estudio neutrónico realizado anteriormente y este son 1) en el estudio anterior se trató todo el núcleo como un todo, y solo se consideró un conjunto de parámetros para el modelo de cinética puntual. Por lo tanto, en este capítulo, estos parámetros se calculan para cada zona: combustible, control, reflector y blindaje, y 2) el gran núcleo estudiado anteriormente tiene una distribución de flujo de neutrones más uniforme, lo que permite implementar la difusión o la cinética puntual sin perder mucha precisión en comparación con el transporte. En este capítulo, el tamaño relativamente pequeño del núcleo y la presencia de posiciones de barras de control (incluso cuando se extraen) y otros tipos de ensamblajes hacen que este sea un núcleo altamente heterogéneo, lo que genera altos gradientes de flujo de neutrones, considerado como un buen candidato para probar la metodología presentada en este libro.

En el estudio anterior del SFR, se trató todo el núcleo como un todo, por lo que solo se consideró un conjunto de parámetros para el modelo cinético, para el reactor CEFR estos parámetros se calculan para cada zona, es decir, combustible, control, reflector y blindaje. El núcleo estudiado anteriormente consistía

en un arreglo más grande que tenía una distribución de flujo de neutrones más uniforme, esto hizo posible implementar cinética de difusión o puntual sin perder mucha precisión en comparación con el transporte. El tamaño relativamente pequeño del núcleo del CEFR y la presencia de posiciones de barras de control (incluso cuando se extraen) y otros tipos de ensamblajes hacen que este sea un núcleo altamente heterogéneo, lo que genera altos gradientes de flujo de neutrones.

9.2. Características de diseño del reactor CEFR

Los principales parámetros, geometría y material del CEFR, se presentan en **Tabla 9.1**. El núcleo del CEFR consta de 79 ensamblajes de combustible FA, 8 barras de control CR: 3 barras de seguridad, 3 barras de compensación y 2 barras reguladoras; 394 ensamblajes reflectores RA: 39 Tipo A y 355 Tipo B; 230 ensamblajes de blindaje SA y 1 ensamblaje de fuente de neutrones NS.

En la **Figura 9.1**, se ilustra un esquema conceptual longitudinal en la dirección axial de cada tipo de ensamblaje y la sección transversal en el plano medio del núcleo, modelado en código Serpent.

Cada ensamblaje del núcleo contiene diferentes zonas axiales, y cada zona axial tiene su propia geometría y materiales. En cuanto a la envolvente del ensamblaje, incluye un embudo inferior que encaja en el espaciador de rejilla debajo del núcleo, el cual se simplifica y no es considerado en el modelado matemático. En la **Tabla 9.2** muestra los componentes principales.

Tabla 9.1. Parámetros del sistema del reactor CEFR (Huo et al., 2019).

Parámetro	Valor
Potencia térmica [MW]	65
Flujo neutrónico máximo [nvs]	3.2×10^{15}
Temperatura de entrada [K]	663.15
Temperatura de salida [K]	803.15
Longitud activa del núcleo [m]	0.45
Diámetro activo del núcleo [m]	0.6

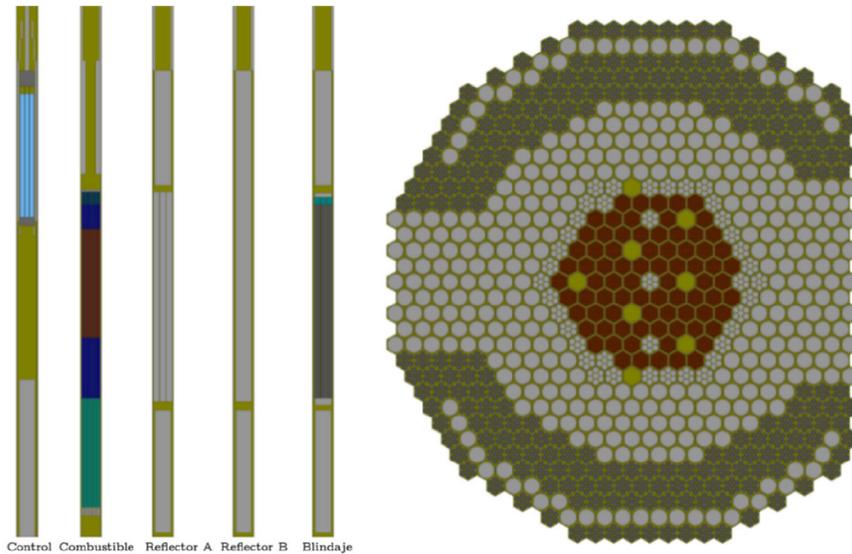


Figura 9.1. Disposición axial y radial del núcleo del MCER.

La envoltura hexagonal que cubre la mayor parte de la longitud del ensamble consta de una pared de acero inoxidable con longitudes de cara a cara interna y externa de 5.66 [cm] y 5.90 [cm] respectivamente. Entre las envolturas de ensambles adyacentes, hay un espacio de 0.2 [cm] en el que fluye el sodio. Lo que hay dentro de la envoltura dependerá del tipo de conjunto y su zona axial.

Tabla 9.2. Descripción de regiones dentro de la envoltura hexagonal.

Zona	Material	*Diámetro externo	Num of Pines	Pin Pitch
Blindaje inferior (excepto FAs)	SS	5.2 [cm]	1	N/A
Barras de control	B ₄ C	1.22 [cm]	7	1.55[cm]
Barras de combustible	UO ₂ (Combustible activo)			
	UO ₂ (Blanket)	0.51 [cm]	61	0.695[cm]
	He (Plenum)			
Reflector A	SS	2.0 [cm]	7	2.07 [cm]
Reflector B	SS	5.2 [cm]	1	N/A

*No incluye encamisado

9.3. Modelado neutrónico del reactor CERF

El núcleo del reactor CERF fue modelado en Serpent, que consiste en una reconstrucción 3D totalmente detallada del núcleo basada en las especificaciones dadas y la **Figura 9.1** fue generada con este modelo.

Es importante destacar que las especificaciones que se muestran en el documento técnico de referencia y en la sección anterior, corresponden a una temperatura de 293[K], para adaptarlas a la temperatura de operación de 523[K] se recalculan todas las dimensiones.

Para simplificar estos cálculos de expansión térmica se consideró que todos los materiales se expanden con el mismo coeficiente de expansión lineal α , que corresponde al valor del Acero Inoxidable, material presente en todo tipo de ensamble. De la misma manera, las densidades se recalcularon considerando esta expansión y manteniendo intactas las masas; a excepción del refrigerante de sodio líquido cuya densidad se calcula mediante una correlación dada en las especificaciones técnicas.

Originalmente, se pretendía utilizar un refinamiento espacial separando cada zona del núcleo en anillos concéntricos, pero este refinamiento, si bien proporciona información más detallada sobre el núcleo, también conduce a una cantidad relativamente alta de datos para manejar para el solucionador neutrónico.

Para evitar manejar una gran cantidad de datos, el modelo final utilizado consta de solo 5 zonas:

Zona 1 Fuente de neutrones

Zona 2 Combustible

Zona 3 Barras de control

Zona 4 Reflector

Zona 5 Blindaje

No obstante, consideramos reemplazar la fuente de neutrones por un reflector. Una segunda decisión tomada fue la utilización de un solo tipo de ensamble reflector, en este caso se utilizó el reflector tipo B por ser más abundante en el núcleo original. La **Figura 9.2** se ilustra como se modeló el núcleo del reactor CERF.

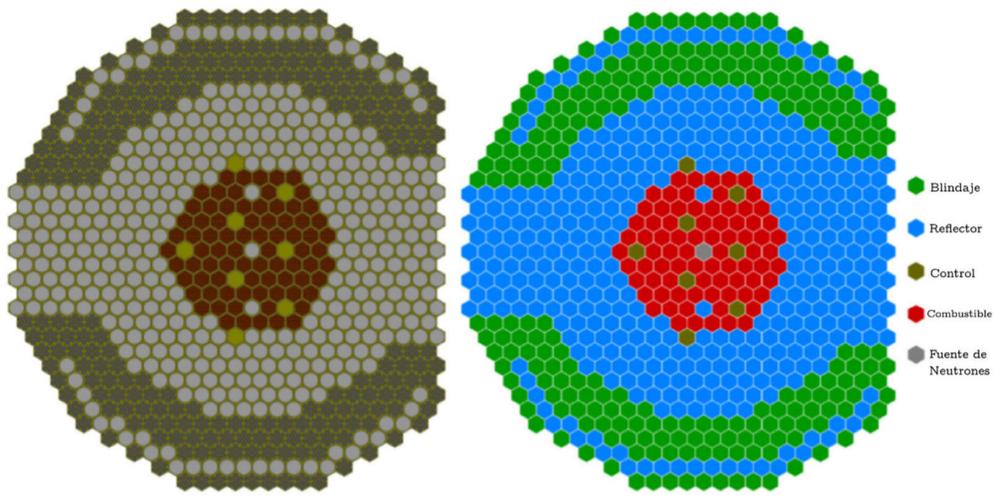


Figura 9.2. Núcleo simplificado del reactor CEFR.

Como la información generada con Serpent está destinada para un modelo cinético-neutrónica, se tuvieron que realizar algunas simplificaciones para colapsar los datos:

Simplificación 1 Todos los diferentes ensambles tienen diferentes zonas axiales, cada una de ellas con diferente contenido y materiales, los datos macroscópicos se calculan considerando todas las interacciones en toda la longitud, por lo que solo se calcula un conjunto de datos por cada tipo de ensamble.

Simplificación 2 Respecto al espectro de energía, los datos se calcularon para un solo grupo de energía (que cubre de 0 a 20 [MeV]), por lo que no se consideran grupos de energía.

La biblioteca de secciones transversales microscópicas (XS) utilizada es la biblioteca de energía continua JEFF 3.1.1 (Santamarina *et al.*, 2019), y la versión utilizada del código es Serpent v2.1.30. De forma predeterminada, el código Serpent calcula datos para 8 precursores de neutrones retardados diferentes cuando se utiliza la biblioteca de datos JEFF.

Como se mencionó anteriormente, los datos requeridos para el solucionador neutrónico y generados por Serpent, fueron el coeficiente de difusión D_c , la ab-

sorción macroscópica (Σ_a), la fisión macroscópica (Σ_f), la inversa de la velocidad del neutrón ν_n^{-1} , la energía generada por fisión ω_f y el número de neutrones generados por fisión ν , el tiempo de generación de neutrones Λ y la vida útil del neutrón ℓ_n .

Los parámetros calculados para cada región, y datos relacionados con los precursores de neutrones retardados en la región del combustible y los datos relacionados con los precursores de neutrones retardados en la región del combustible, son presentados en la **Tabla 9.3** y **Tabla 9.4**.

Tabla 9.3. Datos macroscópicos para cada región del núcleo del reactor CERF.

Parámetro	Combustible	Fuente de Neutrones	Reflector	Control	Blindaje
D_c [cm]	1.683280	1.487450	1.221830	2.677460	1.029670
Σ_a [1/cm]	7.34136E-03	8.88564E-04	1.74116E-03	2.78158E-03	1.60403E-02
ν_n^{-1} [s/cm]	5.45490E-09	4.74390E-09	1.63276E-08	5.36991E-09	1.65396E-08
Σ_f [1/cm]	5.01666E-03	-	-	-	-
ω_f [MeV]	2.02436E+02	-	-	-	-
ν [n/fisión]	2.507510	-	-	-	-
Λ [s]	2.84509E-07	-	-	-	-
ℓ_n [s]	2.95630E-07	-	-	-	-

Tabla 9.4. Datos de precursores de neutrones retardados.

Precursor	β_{ef}	λ [s ⁻¹]
1	2.42728E-04	1.24667E-02
2	1.02680E-03	2.82917E-02
3	7.01849E-04	4.25244E-02
4	1.41694E-03	1.33042E-01
5	2.24927E-03	2.92467E-01
6	7.61021E-04	6.66488E-01
7	6.74241E-04	1.63478E+00
8	2.26202E-04	3.55460E+00

Las simplificaciones realizadas en el modelo neutrónico se realizaron con el fin de reducir el número de tiempos de cálculo y el tamaño de los datos a manejar, ya que el tiempo de cálculo de los parámetros macroscópicos es proporcional al número de regiones donde se calculan. Neutrónicamente, estas simplificaciones no tienen impacto en el cálculo de la reactividad y el bajo número de zonas del reactor hace más simple el modelo.

9.4. Coeficientes de reactividad

La condición nominal para este conjunto de ejercicios fue el núcleo con 79 FA insertados con todos los CR en una posición de 500 [mm], que significa que hay una diferencia de altura de 500 [mm] entre el lado inferior de la región del absorbedor de control y la parte inferior de la región activa a una temperatura de operación de 523 [K].

Se necesitan tres coeficientes de reactividad diferentes para el modelo multiescala:

- Coeficiente Doppler: α_D
- Coeficiente de expansión del refrigerante: α_C
- Coeficiente de expansión del combustible: α_F

Para el coeficiente Doppler, la temperatura de todo el núcleo se cambió de la temperatura nominal 523 [K] a 493, 508, 538 y 553[K]. Se consideraron todos los efectos relacionados con el cambio de temperatura, es decir, expansión del material, modificación de densidades, interpolación de la biblioteca microscópica XS a la temperatura dada. El coeficiente Doppler se calculó trazando la curva de reactividad en función de la temperatura y utilizando el método de mínimos cuadrados.

Para el coeficiente de expansión del sodio, además de caso nominal las temperaturas consideradas son las mismas que el caso del combustible, *i.e.*, 493, 508, 538 y 553[K]. Para este conjunto de experimentos, el cambio de temperatura del refrigerante solo afecta su densidad y considerando la temperatura para la interpolación XS microscópica. Es importante mencionar que la geometría del núcleo se consideró constante, es decir, la misma que a temperatura nominal. De manera similar al coeficiente de reactividad de expansión del combustible, el coeficiente de expansión del refrigerante se calculó obteniendo la pendiente con el método de mínimos cuadrados.

Tabla 9.5. Coeficientes de reactividad para el reactor CEFR.

Coeficiente	Valor
α_D [pcm]	-2108.4664
α_F [pcm/K]	-0.827373
α_C [pcm/K]	-1.488001

En la **Tabla 9.5** se muestran los coeficientes de reactividad calculados. Al compararlos con los encontrados en la literatura para otros reactores rápidos refrigerados por sodio, se observa que los valores están en el mismo orden de magnitud, lo que da confianza en el uso del modelo propuesto.

9.5. Modelo multifísico y multiescala del reactor CEFR

Como se mencionó anteriormente, para analizar un modelo heterogéneo completamente en 3D se puede utilizar un código CFD que resuelva un conjunto de ecuaciones diferenciales *pin a pin*, pero esta opción requeriría altos costos computacionales y no es posible utilizarla cuando los recursos computacionales son limitados o para aplicaciones en tiempo real. Por esta razón, el uso de la metodología basada en modelado escalado mejora el tiempo de simulación con buena fidelidad en resultados.

El modelo escalado de dos ecuaciones se derivó matemáticamente en el **Capítulo 5**, y se puede consultar el **Capítulo 8** para su aplicabilidad.

Para calcular los coeficientes escalados de transferencia de calor se aplica la metodología del **Capítulo 6**, donde se propone una solución formal de las desviaciones espaciales de las temperaturas, y los coeficientes de la solución de las desviaciones espaciales se obtiene al resolver tres problemas de valores límite. En la **Tabla 9.6**, se presentan los valores de los coeficientes escalados de transferencia de calor que describen el núcleo del reactor CEFR.

La densidad del coeficiente de transferencia de calor obtenido es:

$$a_v h [\text{W}(\text{m}^3 \text{K})] = 2.75 \quad (9.1)$$

Tabla 9.6. Coeficientes escalados de transferencia de calor para el reactor CEFR.

Subíndices	$\ \mathbf{K}\ $ [W/(mK)]	$\ \mathbf{u}_{rr}\ $ [W/(m ² K)]
<i>rr</i>	2.520950126	0.016763982
<i>rm</i>	0.148075269	0.5314444638
<i>mr</i>	0.150300996	173.2569166
<i>mm</i>	47.81755287	173.2590709

Como se mencionó en el **Capítulo 6**, este coeficiente escalado se ve afectado débilmente por la velocidad del sodio y depende principalmente de la diferencia de temperaturas entre el sólido y el fluido:

La transferencia de calor en el combustible a escala del reactor y los procesos neutrónicos interactúan fuertemente a través de la densidad de potencia:

$$\langle q'''(\mathbf{r}, t) \rangle^r = w_f \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi_c(\mathbf{r}, t) \quad (9.2)$$

donde $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ es el flujo neutrónico en el dominio activo del núcleo del reactor. Para obtenerlo se considera un modelo de un grupo de energía, *i.e.*, una velocidad del neutrón. Esto significa físicamente que la energía nuclear se genera en el combustible del núcleo del reactor. Esta ecuación permite acoplar los procesos de transporte del sodio y la transferencia de calor en el combustible con los procesos neutrónicos, por medio de $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ en la región del núcleo. El modelo de difusión de neutrones con términos de reactividad se presentó en **Capítulo 7** y los parámetros neutrónicos utilizados se pueden consultar en las **Tabla 9.3** y **Tabla 9.4**. La derivación matemática del modelo de difusión de neutrones con efectos de reactividad se presenta en Espinosa-Paredes y Pérez-Valseca (2024).

9.6. Acoplamiento multifísico y multiescala del reactor CEFR

El acoplamiento de la transferencia de calor y el modelo neutrónico se realiza a través de la retroalimentación de reactividad. Se consideran cuatro contribuciones de reactividad: (1) externa $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$ debido a barras de control, (2) expansión del sodio $\rho_m(T_m(\mathbf{r}, t))$, (3) expansión del combustible $\rho_f(T_f(\mathbf{r}, t))$, y (4) efecto Doppler. La reactividad está dada por:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_{ext}(\mathbf{r}, t) + \rho_m(\mathbf{r}, t) + \rho_f(\mathbf{r}, t) + \rho_D(\mathbf{r}, t) \quad (9.3)$$

donde:

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \alpha_m \left(\langle T_m(\mathbf{r}, t) \rangle^m - \langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m \right) \quad (9.4)$$

$$\rho_f = \alpha_f \left(\langle T_f(\mathbf{r}, t) \rangle^f - \langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f \right) \quad (9.5)$$

$$\rho_D(\mathbf{r}, t) = \alpha_D \ln \left(\frac{\langle T_f(\mathbf{r}, t) \rangle^f}{\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f} \right) \quad (9.6)$$

El subíndice 0 es un valor de referencia que pueden ser las condiciones nominales del reactor CEFR. Los valores de los coeficientes de reactividad obtenidos con Serpent se presentan en la **Tabla 9.6**.

9.7. Implementación

El modelo de transferencia de calor escalado y el modelo neutrónico se implementan en geometría 3D en el software tipo CFD. La geometría del reactor incluye la zona de combustible, los conjuntos de control y tres anillos de la zona del reflector, como se muestra en la **Figura 9.3a**. El dominio computacional consta de 18 959 elementos, como se muestra en la **Figura 9.3b**.

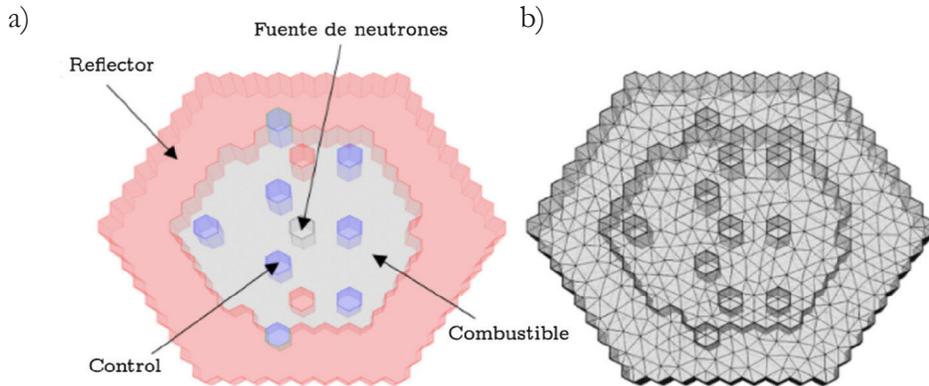


Figura 9.3. a) Núcleo del reactor CEFR, b) Dominio computacional con 18959 elementos.

La densidad de potencia $\langle q'''(\mathbf{r}, t) \rangle'$ es crucial para acoplar el termofluido nuclear con el proceso neutrónico a través de $\phi_c(\mathbf{r}, t)$. Estas ecuaciones se modelaron con el fin de calcular el perfil inicial del flujo neutrónico. Además, el modelo se implementó en las respectivas regiones del núcleo 3D, considerando los parámetros neutrónicos de cada región.

9.8. Simulaciones en estado estacionario

En esta sección se presentan las simulaciones en condiciones de estado estacionario. En la **Figura 9.4**, se presenta el flujo de neutrones al 100[%] de potencia, es decir condiciones de operación nominal del reactor CEFR.

En esta figura se puede observar la dependencia de la distribución del flujo neutrónico con la geometría y la fuente de neutrones debido a los eventos de fisión. El valor máximo del flujo neutrónico se observa en la parte izquierda del núcleo, y disminuye en la parte exterior del mismo. La inhomogeneidad en el mapa de flujo de neutrones se debe a la configuración en el núcleo, *i.e.*, en la **Figura 9.1** se puede observar que el núcleo no es simétrico verticalmente, los conjuntos combustibles están distribuidos de manera diferente en los lados derecho e izquierdo, además, los conjuntos de control no son simétricos. Estas diferencias en la distribución generan una respuesta diferente en el flujo de neutrones.

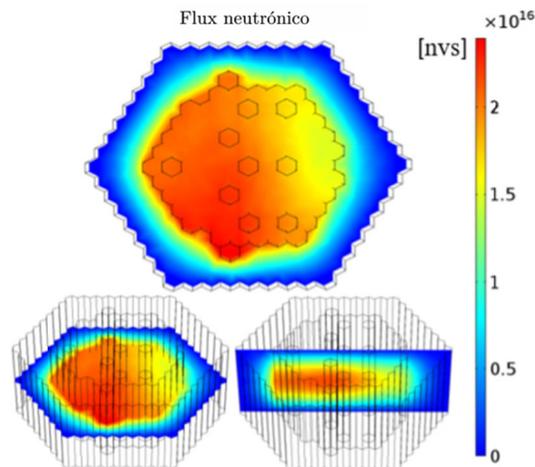


Figura 9.4. Flujo neutrónico a 100[%] de potencia nominal.

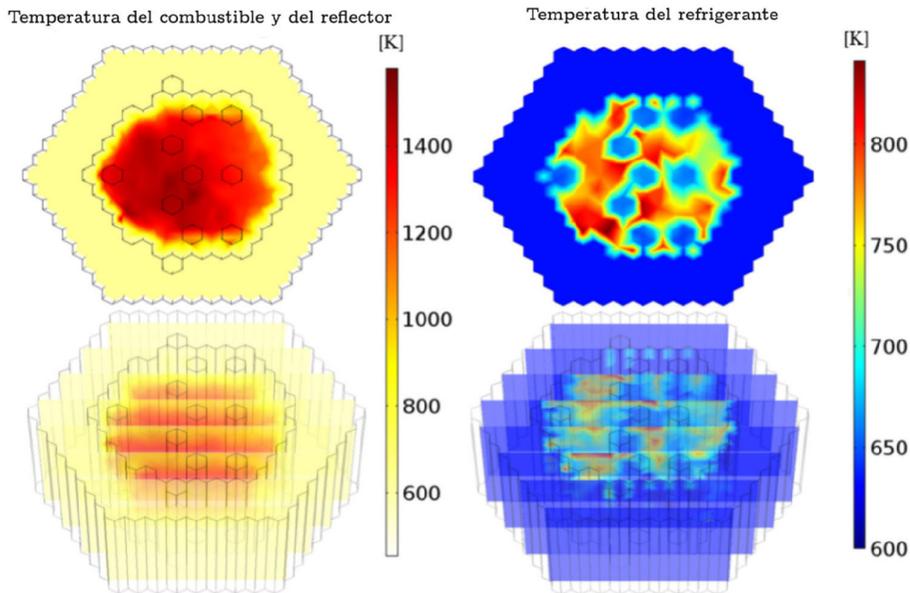


Figura 9.5. Temperaturas del combustible, reflector y refrigerante.

Bajo estas condiciones, las temperaturas del combustible, reflector y sodio se presentan en la **Figura 9.5**.

Se obtiene que la temperatura promedio del combustible es de 1484 [K], dieciséis grados por debajo de la temperatura de diseño representando el 1.06[%]. La temperatura máxima es de 1500[K] sin representar algún riesgo en la integridad del reactor. En el caso de la temperatura del sodio, la temperatura de entrada es de 633.15 [K] según la temperatura de diseño, y la temperatura promedio de salida es de 794.5 [K], que corresponde a cinco grados por debajo de la temperatura de diseño, y error de 0.06 [%]. Las temperaturas obtenidas son aceptables de acuerdo con las normas internacionales de simulación.

9.9. Simulación de un UTOP

Uno de los transitorios importantes a evaluar en un reactor nuclear es el *Unprotected-Transient Over Power* (UTOP), donde se simula una inserción de reactividad positiva. En este trabajo se realiza la inserción de 10.3 [pcm], con el fin de comparar los resultados con el trabajo de Manmam, Yun y Zhijian (2013). La inserción

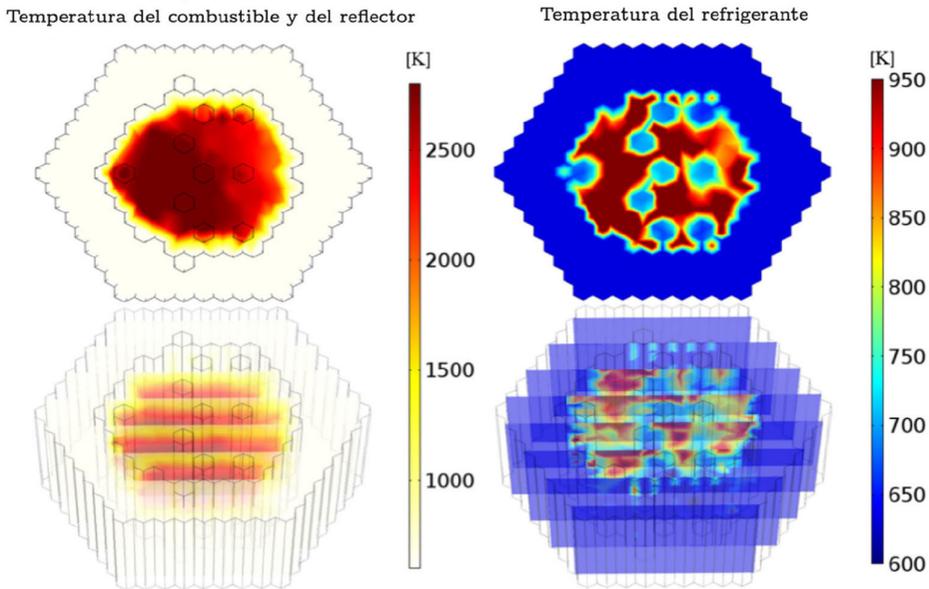


Figura 9.6. Distribución de temperaturas durante ULOF.

de reactividad es global, es decir la inserción a través del término $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$. En la **Figura 9.6**, se presentan las temperaturas del combustible, reflector y refrigerante bajo el evento ULOP. La temperatura máxima del combustible obtenida es 2846 [K], y la temperatura reportada es 2850 [K] que representa un error relativo de 0.14[%]. La temperatura máxima de salida del refrigerante es 943.85 [K], y la temperatura reportada en la literatura es 946.48 [K] que corresponde a un error de 0.27[%]. La temperatura promedio de salida del refrigerante es 882.13 [K]. Las temperaturas obtenidas también respetan los límites presentados en el trabajo previos (*e.g.*, Wu, Li, Yu, Qiu, Su & Tian, 2013).

9.10. Reactividad por barras de control

El modelo desarrollado permite simular la inserción de reactividad en barras de control. En esta sección se presentan los resultados de la inserción positiva y negativa.

En este caso, la simulación del movimiento de las barras de control aumenta y disminuye el parámetro global de manera uniforme, este es un punto importante

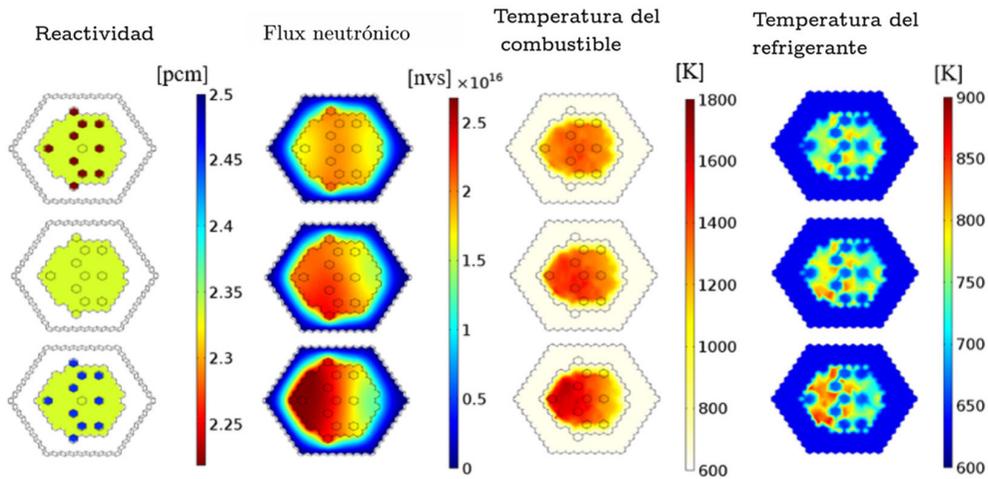


Figura 9.7. Inserción de reactividad.

porque el diseño de las posiciones de las barras de control fue desarrollado para manejar el control del reactor a través de las barras de control sin abruptos.

En la **Figura 9.7** se puede observar el cambio en el comportamiento del flujo de neutrones, temperatura del combustible y temperatura del refrigerante. La inserción de reactividad considerada fue de 0.1[%] de la reactividad en estado estacionario. Con una inserción negativa de reactividad, el flujo de neutrones disminuye y en consecuencia la temperatura del combustible y del refrigerante.

En caso de inserción de reactividad positiva, el flujo de neutrones aumenta, provocando un incremento de la temperatura del combustible y del refrigerante. En este caso, la temperatura media del combustible es de 1832 [K] y la máxima de 1936 [K], ambas por debajo de la temperatura límite de seguridad. En el caso del refrigerante, la temperatura máxima de salida es de 863 [K].

Si consideramos el movimiento de uno de los ensambles de control, por inserción de una reactividad negativa en el núcleo, esta inserción genera una modificación en el flujo neutrónico y, por tanto, un cambio en el combustible y el refrigerante.

En la **Figura 9.8** se presenta la simulación de la inserción de reactividad negativa en un ensamble de control. La reactividad es del 1[%] de la reactividad en estado estacionario. Es posible observar el flujo en el núcleo y el diferente comporta-

miento alrededor del conjunto de control. El cambio en la reactividad impacta la temperatura del combustible, que disminuye alrededor del conjunto de control y, en consecuencia, la temperatura del refrigerante también disminuye.

Es importante simular este tipo de escenario, ya que la inserción de reactividad cambia abruptamente el comportamiento de la temperatura y podría generar inestabilidad en el reactor.

Se pudo demostrar que el método para acoplamiento multifísico y multiescala para simular el comportamiento de la transferencia de calor y los fenómenos neutrónicos se puede aplicar para el análisis y diseño de reactores, en este caso se

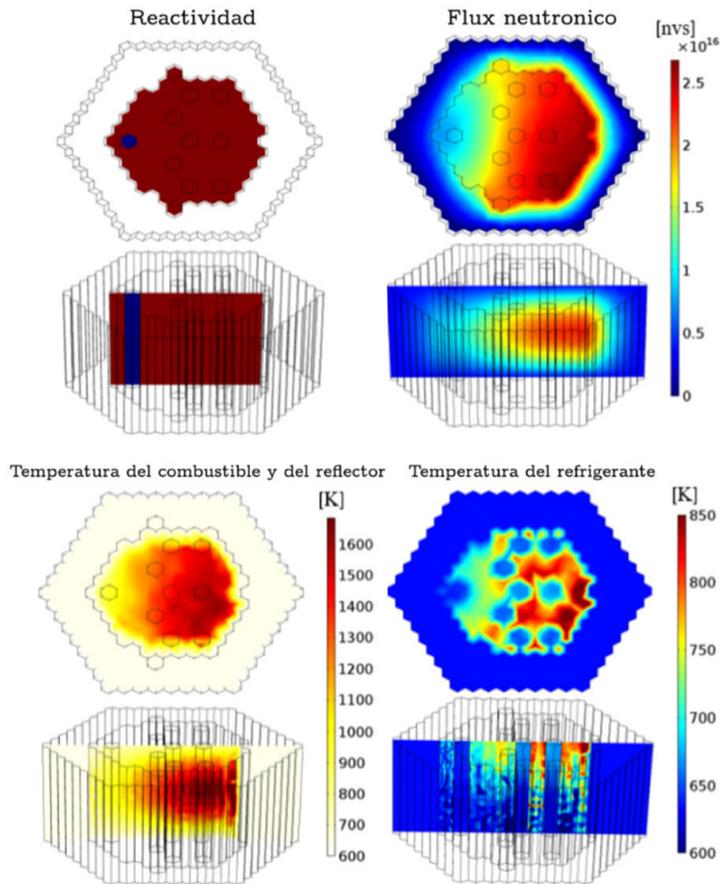


Figura 9.8. Inserción de reactividad negativa en un ensamble de control.

aplicó para el reactor CEFR. El modelo incluye ecuaciones de energía acopladas a mayor escala y un modelo de difusión neutrónica para estimar las variables críticas: el campo de flujo de neutrones, temperaturas en combustible y sodio. Es importante mencionar que la metodología presentada en este libro con modelos escalados, para simular el núcleo de un reactor en 3D es importante para evitar plataformas computacionales con altos recursos computacionales para aplicaciones en *in situ*.

FLUJO EN DOS FASES EN REACTORES DE SALES FUNDIDAS

10.1. Reactores nucleares de sales fundidas

El modelado del proceso de transferencia de calor en un reactor nuclear de sales fundidas (MSR) es un desafío debido a la distribución no uniforme del material combustible y la presencia de flujo en dos fases. El desarrollo de herramientas teóricas para calcular los parámetros escalados y la distribución de la temperatura es esencial para garantizar la seguridad del reactor.

El reactor nuclear de sales fundidas surgió como un experimento en reactores de aviones en Estados Unidos, donde un prototipo funcionó por un tiempo en 1954. Durante la década de 1960, el Laboratorio Nacional de Oak Ridge diseñó y operó una unidad experimental. Surgieron varios diseños para este tipo de reactores, con combustible sólido o líquido y espectro de neutrones rápido o térmico, siendo el más destacado el reactor rápido de sales fundidas (MSFR) que fue desarrollado y estudiado en 1997 por el Centro Nacional de Investigación Científica (CNRS) en Francia.

Los reactores MSFR son una de las tecnologías más ambiciosas en los sistemas de cuarta generación. Esta tecnología prescinde de elementos combustibles sólidos y, en su lugar, utiliza una mezcla de sales de haluro que contienen el material fisible, de una mezcla de uranio y torio.

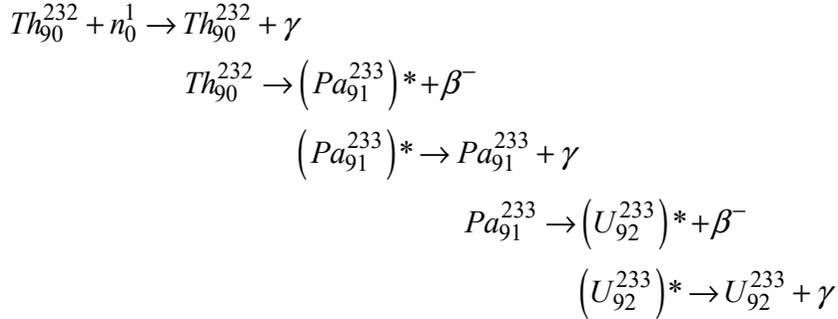
En estas tecnologías, la inyección de burbujas de helio que induce flujo en dos fases se aplica para extraer productos de fisión insolubles en sal, pero también existe la presencia de gas debido a los productos de fisión. Debido al creciente interés industrial y científico en los reactores de cuarta generación en el contexto de la seguridad y la eficiencia, donde los desarrollos matemáticos son valiosos y proporcionan información en el proceso a través de modelos que abarcan la física a diferentes escalas del MSFR. El método de escalamiento es una forma de bajo costo y alta precisión para representar el comportamiento a escala de medición experimental o instrumentación en energía nuclear, procesos químicos y geoenergía. Este método permite escalar, desde la escala del continuo a la escala del sistema en estudio, con coeficientes que representan propiedades físicas a esa escala.

La motivación de este capítulo es abordar el desafío de modelar con precisión el transporte de calor en un tipo específico de reactor nuclear de sales fundidas en presencia de burbujas de helio. Al utilizar el método de escalamiento, el estudio tiene como objetivo desarrollar un modelo escalado de dos ecuaciones que capture los fenómenos de transporte de calor entre el helio disperso en la sal fundida. La investigación se centra en escalar las ecuaciones locales a la escala del reactor, considerando los parámetros operativos de un MSFR específico con una potencia de salida de 3000 [MWt] y 1300 [MWe], que utiliza una mezcla de combustible LiF-ThF₄-²³³UF₄ y un ciclo de combustible de torio-uranio. El reactor trabaja a una temperatura de entrada de 923[K], alcanzando una temperatura máxima de 1023[K] con un volumen total de sal combustible de 18 [m³]. Es importante mencionar que la contribución de un modelo matemático escalado en flujo en dos fases es el desarrollo de correlaciones y conocimientos valiosos para códigos computacionales, para optimización, diseño y operación.

10.2. Fenómenos multifísicos y multiescala

El núcleo de un MSR contiene una mezcla de sales que incluye fluoruro de litio, tetrafluoruro de torio como material fértil y tetrafluoruro de uranio como

material fisil, *i.e.*, $\text{LiF-ThF}_4\text{-}^{233}\text{UF}_4$. Dichos materiales interactúan a través de la siguiente reacción en cadena:



La mezcla de sales representa el combustible del reactor como una fase continua con dos componentes en estado líquido, que recircula dentro del núcleo. Además de la fase continua, existe una fase dispersa compuesta por burbujas de helio. Las burbujas inyectadas ayudan a extraer productos de fisión insolubles (Kr, Xe, He y partículas metálicas) a través de efectos de flotación para evitar la contaminación de la mezcla de sales. La coexistencia de flujo en dos fases dentro del núcleo del reactor implica fenómenos multifísicos simultáneamente. En este sentido, la dinámica multifluida ocurre debido al movimiento de fluidos (líquido y gas). La transferencia de masa tiene lugar debido a la extracción de fragmentos de fisión insolubles, y el transporte de energía surge del calor generado en el núcleo del reactor de origen nuclear, por procesos neutrónicos. Sin embargo, a pesar de la importancia fundamental de todos los procesos de transporte multifísico y multiescala, este capítulo se centra solo en la transferencia de calor en condiciones de flujo en dos fases.

10.3. Ecuaciones locales de transporte de calor

Las ecuaciones locales que rigen el proceso de transferencia de calor, considerando el intercambio de calor en flujo en dos fases de una mezcla de sales de combustible y burbujas de helio, se dan mediante el siguiente problema de valor límite:

Sal fundida:

$$\rho_l c_{p_l} \frac{\partial T_l}{\partial t} + \rho_l c_{p_l} \nabla \cdot (\mathbf{v}_l T_l) = k_l \nabla \cdot (\nabla T_l) + q'''(\mathbf{r}, t) \quad (10.1)$$

Helio:

$$\rho_b C_{p_b} \frac{\partial T_b}{\partial t} + \rho_b C_{p_b} \nabla \cdot (\mathbf{v}_b T_b) = k_b \nabla \cdot (\nabla T_b) \quad (10.2)$$

Transporte de calor interfacial:

$$T_l = T_b \quad \text{en} \quad A_{bl} \quad (10.3)$$

$$\mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla T_l = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla T_b \quad \text{en} \quad A_{bl} \quad (10.4)$$

Condiciones iniciales: $T_l = T_{l0}(\mathbf{r})$ y $T_b = T_{b0}(\mathbf{r})$, en $t = 0$.

En estas ecuaciones A_{bl} es la superficie entre la sal fundida y el helio, y q''' es la densidad de potencia generada en el combustible líquido. Los subíndices l y b representan sal fundida y helio, respectivamente.

10.4. Modelo escalado de transporte de calor en un reactor MSR

Como se ha mencionado a lo largo de este libro, el método de escalamiento es una metodología que se puede aplicar a sistemas multicomponentes de geometría arbitraria, que puede involucrar el transporte simultáneo de momento, calor y masa a través de varias escalas. Este método permite obtener modelos escalados a partir de ecuaciones válidas a escala microscópica o continua, donde los coeficientes escalados del medio representan la conexión entre escalas.

Considerando un volumen representativo V , que contiene helio disperso en la sal fundida que puede ser localizado en cualquier punto de núcleo del reactor. Las longitudes características de tamaño satisfacen las siguientes escalas:

$$\ell_l, \ell_b \ll V^{1/3} \ll L_c \quad (10.5)$$

donde ℓ_l , ℓ_b y L_c son los tamaños característicos del espacio entre las burbujas de helio, burbujas y el núcleo del reactor, respectivamente. Estos tamaños característicos se ilustran en la **Figura 10.1**.

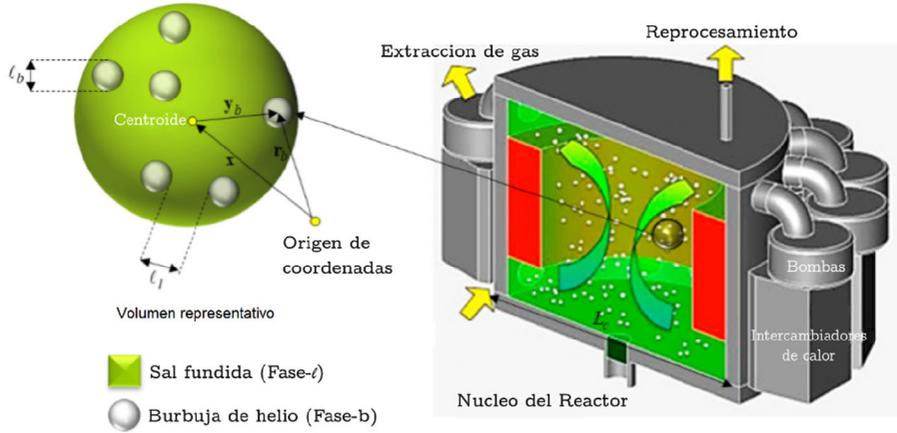


Figura 10.1. Reactor MSFR (Adaptado Daber et al., 2020). Tamaños característicos, vectores de posición y vectores normales unitarios.

En el sistema gas-líquido, utilizamos el método de escalamiento para derivar las ecuaciones que rigen el transporte de calor para ambas fases. Entonces, aplicando el procedimiento de escalamiento (**Capítulo 5**) a las ecuaciones locales de transporte de calor, se puede demostrar que las ecuaciones escaladas son:

Sal fundida:

$$\begin{aligned}
 & (\rho Cp)_l \varepsilon_l \frac{\partial \langle T_l \rangle^l}{\partial t} + (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\varepsilon_l \langle T_l \rangle^l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\varepsilon_l \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \tilde{T}_l \rangle^l) = -k_l \nabla \langle T_l \rangle^l \cdot \nabla \varepsilon_l \\
 & + \frac{k_l}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \tilde{T}_l dA + k_l \nabla \cdot (\varepsilon_l \nabla \langle T_l \rangle^l) + \nabla \cdot \frac{k_l}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \tilde{T}_l dA + \varepsilon_l \langle q'' \rangle^l - (\rho Cp)_l \langle T_l \rangle^l \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} \quad (10.6)
 \end{aligned}$$

Helio:

$$\begin{aligned}
 & (\rho Cp)_b \varepsilon_b \frac{\partial \langle T_b \rangle^b}{\partial t} + (\rho Cp)_b \nabla \cdot (\varepsilon_b \langle T_b \rangle^b \langle \mathbf{v}_b \rangle^b) + (\rho Cp)_b \nabla \cdot (\varepsilon_b \langle \tilde{\mathbf{v}}_b \tilde{T}_b \rangle^b) \\
 & = -k_b \nabla \langle T_b \rangle^b \cdot \nabla \varepsilon_b + \frac{k_b}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \tilde{T}_b dA + k_b \nabla \cdot (\varepsilon_b \nabla \langle T_b \rangle^b) + \nabla \cdot \frac{k_b}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \tilde{T}_b dA \quad (10.7) \\
 & - (\rho Cp)_b \langle T_b \rangle^b \frac{\partial \varepsilon_b}{\partial t}
 \end{aligned}$$

donde:

$$T_l = \langle T_l \rangle^l + \tilde{T}_l, \quad T_b = \langle T_b \rangle^b + \tilde{T}_b \quad \text{y} \quad \mathbf{v}_l = \langle \mathbf{v}_l \rangle^l + \tilde{\mathbf{v}}_l \quad (10.8)$$

La diferencia fundamental entre ambas ecuaciones escaladas es que $\varepsilon_b \langle q^m \rangle^b = 0$. Es importante observar que la fracción volumen de la fase gas y el combustible, no es constante, *i.e.*, es función de la posición y el tiempo.

10.5. Ecuaciones de las desviaciones espaciales

Las ecuaciones escaladas dependen de las desviaciones espaciales e intrínsecas de las temperaturas de la sal fundida y helio. Estas son dos ecuaciones con cuatro variables dependientes, por lo que el problema matemático está mal condicionado y hay grados de libertad indeterminados. Las ecuaciones faltantes corresponden a aquellas expresiones que permiten calcular las variables de desviación espacial. Para establecer las ecuaciones que rigen las desviaciones espaciales y sus condiciones de contorno correspondientes, se restan las ecuaciones escaladas en las ecuaciones locales. Además, después de aplicar un análisis de orden de magnitud el resultado es

$$\begin{aligned} & (\rho Cp)_l \frac{\partial \tilde{T}_l}{\partial t} + (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l \tilde{T}_l) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_l \langle T_l \rangle^l) - \varepsilon_l^{-1} (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \tilde{T}_l \rangle \\ & = \nabla \cdot (k_l \nabla \tilde{T}_l) + \varepsilon_l^{-1} k_l \nabla \varepsilon_l \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l - \frac{\varepsilon_l^{-1} k_l}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \tilde{T}_l dA + \tilde{q}^m + (\rho Cp)_l \langle T_l \rangle^l \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} \end{aligned} \quad (10.9)$$

Es oportuno señalar que el problema del valor límite de las desviaciones espaciales de la temperatura se resuelve en una celda unitaria formada por un cubo de combustible líquido que contiene una burbuja esférica de helio en el centro (véase la **Figura 10.3**). En la celda unitaria, la fracción de volumen es constante y cuasi estacionaria. Entonces:

$$\begin{aligned} 0 = & -(\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l \tilde{T}_l) - (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_l \langle T_l \rangle^l) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \tilde{T}_l \rangle^l \\ & + \nabla \cdot (k_l \nabla \tilde{T}_l) - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \tilde{T}_l dA \end{aligned} \quad (10.10)$$

De manera análoga se aplica para el helio:

$$0 = -(\rho Cp)_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b \tilde{T}_b) + \nabla \cdot (k_b \nabla \tilde{T}_b) - \frac{k_b}{V_b} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \tilde{T}_b dA \quad (10.11)$$

Debido a la consideración del flujo volumétrico uniforme, las desviaciones de la velocidad del gas son despreciables, *i.e.*, $\tilde{\mathbf{v}}_b \approx 0$.

Sustituyendo las desviaciones espaciales, en las condiciones locales de transporte interfacial, se obtiene las condiciones de frontera:

$$\text{C.F.1} \quad \tilde{T}_l = \langle T_b \rangle^b + \tilde{T}_b - \langle T_l \rangle^l \quad \text{en} \quad A_{bl} \quad (10.12)$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \tilde{T}_l = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \langle T_b \rangle^b + \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \tilde{T}_b - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \langle T_l \rangle^l \quad \text{en} \quad A_{bl} \quad (10.13)$$

10.6. Solución de las desviaciones espaciales

El problema de valores a la frontera definido en la sección anterior, se identifican términos no homogéneos (desde un punto de vista matemático) $\langle T_b \rangle^b - \langle T_l \rangle^l$, $\langle \nabla T_b \rangle^b$ y $\langle \nabla T_l \rangle^l$. Estos términos representan fuentes macroscópicas a escala del reactor que evitan que las desviaciones \tilde{T}_l y \tilde{T}_b sean cero como una solución trivial. En el caso contrario se presenta una solución no trivial que consiste en proponer una solución para las desviaciones de temperatura. Para tal propuesta se utiliza el método de superposición, que consta de una solución general y una particular. Considerando que las fuentes de microescala se comportan como constantes en función de la restricción de escala de longitud, las soluciones generales para las desviaciones de temperatura de cada fase se definen por:

$$\tilde{T}_l = \mathbf{b}_{ll} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l + \mathbf{b}_{lb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b - s_l \left(\langle T_l \rangle^l - \langle T_b \rangle^b \right) \quad (10.14)$$

$$\tilde{T}_b = \mathbf{b}_{bl} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l + \mathbf{b}_{bb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b + s_b \left(\langle T_b \rangle^b - \langle T_l \rangle^l \right) \quad (10.15)$$

donde \mathbf{b}_{ll} , \mathbf{b}_{lb} , \mathbf{b}_{bl} , \mathbf{b}_{bb} son vectores y s_l , s_b son escalares definidos como *coeficientes variables*. Esos vectores y escalares cuantifican la contribución de cada fuente macroscópica a las desviaciones espaciales de la temperatura en cada fase.

10.7. Coeficientes de solución de las desviaciones

Utilizamos las desviaciones para cada temperatura y las condiciones de contorno para obtener la forma condicionada de la ecuación escalada de transporte de

energía. En consecuencia, la solución propuesta se sustituye en las ecuaciones de las desviaciones.

Para la sal fundida se obtiene:

$$\begin{aligned}
0 = & \left[-(\rho Cp)_l (\nabla \cdot (\mathbf{v}_l \mathbf{b}_{ll}) + \tilde{\mathbf{v}}_l) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{ll} \rangle^l - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ll} dA + \nabla \cdot (k_l \nabla \mathbf{b}_{ll}) \right] \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l \\
& + \left[-(\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l \mathbf{b}_{lb}) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{lb} \rangle^l - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{lb} dA + \nabla \cdot (k_l \nabla \mathbf{b}_{lb}) \right] \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b \\
& + \left[(\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l s_l) - (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l s_l \rangle^l + \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla s_l dA - \nabla \cdot (k_l \nabla s_l) \right] (\langle T_l \rangle^l - \langle T_b \rangle^b)
\end{aligned} \quad (10.16)$$

De esta ecuación se deduce que los problemas particulares asociados a cada fuente a macroescala deben satisfacer:

$$0 = -(\rho Cp)_l (\nabla \cdot (\mathbf{v}_l \mathbf{b}_{ll}) + \tilde{\mathbf{v}}_l) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{ll} \rangle^l - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ll} dA + \nabla \cdot (k_l \nabla \mathbf{b}_{ll}) \quad (10.17)$$

$$0 = -(\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l \mathbf{b}_{lb}) + (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{lb} \rangle^l - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{lb} dA + \nabla \cdot (k_l \nabla \mathbf{b}_{lb}) \quad (10.18)$$

$$0 = (\rho Cp)_l \nabla \cdot (\mathbf{v}_l s_l) - (\rho Cp)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l s_l \rangle^l + \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla s_l dA - \nabla \cdot (k_l \nabla s_l) \quad (10.19)$$

En forma similar para el helio, se obtiene:

$$0 = -(\rho Cp)_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b \mathbf{b}_{bl}) - \frac{k_b}{V_b} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{bl} dA + \nabla \cdot (k_b \nabla \mathbf{b}_{bl}) \quad (10.20)$$

$$0 = -(\rho Cp)_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b \mathbf{b}_{bb}) - \frac{k_b}{V_b} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{bb} dA + \nabla \cdot (k_b \nabla \mathbf{b}_{bb}) \quad (10.21)$$

$$0 = -(\rho C p)_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b s_b) - \frac{k_b}{V_b} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla s_b dA + \nabla \cdot (k_b \nabla s_b) \quad (10.22)$$

Ahora, sustituyendo las soluciones de las desviaciones en las condiciones de transporte interfacial se obtiene:

$$\text{C.F1} \quad 0 = (\mathbf{b}_{bl} - \mathbf{b}_{ll}) \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l + (\mathbf{b}_{bb} - \mathbf{b}_{lb}) \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b + (s_b - s_l + 1) (\langle T_b \rangle^b - \langle T_l \rangle^l) \quad (10.23)$$

Una vez más, para una solución no trivial se deben cumplir las siguientes condiciones en la interfaz líquido-gas: $\mathbf{b}_{ll} = \mathbf{b}_{lb}$, $\mathbf{b}_{bl} = \mathbf{b}_{bb}$ y $s_l = s_b + 1$. La segunda condición de contorno se escribe como:

$$\begin{aligned} \text{C.F2} \quad 0 = & [\mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \mathbf{b}_{bl} - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \mathbf{b}_{ll} - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \mathbf{I}] \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l \\ & + [\mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \mathbf{b}_{bb} - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \mathbf{b}_{lb} + \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \mathbf{I}] \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b \\ & + [\mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla s_b - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla s_l] (\langle T_b \rangle^b - \langle T_l \rangle^l) \end{aligned} \quad (10.24)$$

de donde $\mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \mathbf{b}_{ll} = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \mathbf{b}_{bl} - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \mathbf{I}$, $\mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \mathbf{b}_{bb} = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \mathbf{b}_{lb} - \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \mathbf{I}$ y $\mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla s_l = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla s_b$.

Las expresiones matemáticas generalizadas de los problemas de frontera para obtener los *coeficientes variables* se presentan en la **Tabla 10.1**. Cada problema incluye cuatro ecuaciones: una asociada a la sal fundida, otra asociada al helio y dos relacionadas con las condiciones de contorno interfaciales.

10.8. Celda representativa

Cada problema presentado en la **Tabla 10.1** ha sido programado en celdas unitarias representativas y resuelto numéricamente. La dinámica de fluidos en flujo bifásico en el MSFR es esencial para la transferencia de calor por convección y para determinar la distribución de la fracción de burbujas. En este sentido, se supone una distribución del tamaño de las burbujas con una desviación estándar pequeña, de modo que solo un tamaño de burbuja característico define la fase gaseosa. Para resolver el problema de frontera en la celda unitaria, utilizamos una burbuja rodeada de combustible fluido.

Tabla 10.1. Problemas de frontera para los coeficientes de solución de las desviaciones.

$$0 = -(\rho C p)_l [\nabla \cdot (\mathbf{v}_l \alpha_l) + \delta_1] + (\rho C p)_l \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \alpha_l \rangle^l - \frac{k_l}{V_l} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \alpha_l dA + \nabla \cdot (k_l \nabla \alpha_l)$$

$$0 = -(\rho C p)_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b \alpha_b) - \varepsilon_b^{-1} \frac{k_b}{V} \int_{A_{bl}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \alpha_b dA + \nabla \cdot (k_b \nabla \alpha_b), \text{ Helio}$$

$$\alpha_l = \alpha_b + \delta_2$$

$$\mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \nabla \alpha_l = \mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \nabla \alpha_b + \delta_3, \text{ en } A_{bl}, \text{ y Condiciones de periodicidad}$$

Problema	Definición de α y δ	Coficiente de solución
1	$\alpha_l = \mathbf{b}_{ll}, \alpha_b = \mathbf{b}_{bl}, \delta_1 = \tilde{\mathbf{v}}, \delta_2 = 0, \delta_3 = -\mathbf{n}_{lb} \cdot k_l \mathbf{I}$	\mathbf{b}_{ll} y \mathbf{b}_{bl}
2	$\alpha_l = \mathbf{b}_{lb}, \alpha_b = \mathbf{b}_{bb}, \delta_1 = 0, \delta_2 = 0, \delta_3 = -\mathbf{n}_{lb} \cdot k_b \mathbf{I}$	\mathbf{b}_{lb} y \mathbf{b}_{bb}
3	$\alpha_l = s_l, \alpha_b = s_b, \delta_1 = 0, \delta_2 = 1, \delta_3 = 0$	s_l y s_b

La solución se basa en elementos finitos con discretización avanzada y procedimientos iterativos para encontrar la solución numérica. El dominio discretizado completo contiene 92849 elementos triangulares con una calidad de elemento promedio de 0.6688. Estas características proporcionaron soluciones numéricas independientes del dominio computacional con tiempos de cálculo tolerables, ya que se probaron otras densidades de elementos finitos para evaluar el cálculo de conductividades térmicas efectivas para las fases líquida y gaseosa. En la **Figura 10.2** se presenta la celda con el dominio discretizado, donde el tamaño de la burbuja corresponde a las condiciones de operación nominales.

Observamos que el porcentaje de error relativo respecto a la malla normal no supera el 0.1[%]. En consecuencia, el método principal y ampliamente utilizado para verificar la exactitud de cualquier solución numérica es el principio de consistencia. Este principio afirma que la solución numérica se aproxima a la solución exacta a medida que el número de nodos se acerca al infinito, *i.e.*, los operadores discretos convergen a operadores continuos.

Se destaca que el problema de flujo para encontrar las velocidades locales está desacoplado de los problemas de frontera, esto facilita la solución numérica de

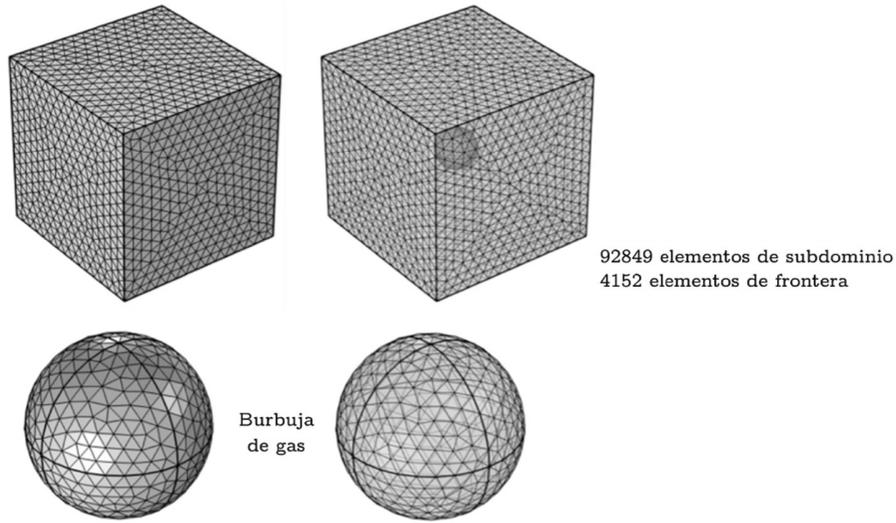


Figura 10.2. Malla para resolver los problemas de flujo local en una celda periódica.

forma segregada. En la solución de los problemas de frontera para estimar los *coeficientes variables*, se encontró un error absoluto de 3.7×10^{-10} , y la convergencia se alcanzó en dos iteraciones.

Los problemas también necesitan las desviaciones espaciales de la velocidad del líquido y el intrínseco de las velocidades de fase. En el caso de la fase líquida, el campo de velocidad proviene del modelo de flujo turbulento $\kappa - \epsilon$, ya que están presentes altos números de Reynolds en el núcleo del reactor. En el caso de la fase gaseosa, la velocidad intrínseca surge de la aplicación de conceptos de flujo relativo que define la velocidad de burbuja incluso en un régimen de flujo no completamente desarrollado (Wallis, 1969):

$$v_{bl} = \sqrt{2} \left(\frac{g \sigma_s (\rho_l - \rho_b)}{\rho_l^2} \right)^{1/4} (1 - \epsilon_b)^{1.75} \tag{10.25}$$

donde g es la gravedad $9.81 \text{ [m/s}^2\text{]}$, σ_s es la tensión interfacial 0.2 [N/m] , ρ_l es la densidad de la sal $4125 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ y ρ_b es la densidad del helio $0.1 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. En condiciones nominales, la fracción volumen ϵ_b en el núcleo es de 0.0067 . El análisis se lleva a cabo para tiempos cortos, en los que no están presentes los productos de fisión que surgen debido a la transmutación y generan un impacto a nivel mo-

lecular. Como los productos de fisión son gases nobles o partículas metálicas con fuerzas de cohesión mucho menores que la sal del combustible, las variaciones de la tensión interfacial no son relevantes. La velocidad relativa se calcula mediante

$$v_r = \frac{v_{bl}}{(1 - \varepsilon_b)} \quad (10.26)$$

Considerando una velocidad de la sal fundida v_l de 2.78 [m/s], en la **Tabla 10.2** se presenta la velocidad de la burbuja de helio v_b como función de la fracción volumen del helio.

La celda unitaria es un cubo de combustible fluido con una burbuja en el centro de diámetro igual a 0.0024 [m]. El diámetro d_b se estimó utilizando la ley de energía isotérmica $d_b = d_0(p_0/p)^{1/3}$, los valores de referencia considerados son: $d_0 = 0.003$ [m], $p_0 = 0.101325$ [MPa], y presión del reactor de $p = 0.200$ [MPa]. Para esas dimensiones, la fracción de volumen de burbujas de helio en el núcleo corresponde a 0.0067[%].

La **Figura 10.3** muestra la velocidad local del líquido en la celda unitaria para la condición de operación nominal. En este caso se obtiene un perfil simétrico alrededor de la burbuja, y la velocidad máxima del líquido se desarrolla en la región detrás de la burbuja a medida que asciende en el reactor. Es pertinente mencionar aquí que otros fenómenos relacionados con el campo de velocidad de flujo podrían afectar significativamente la solución de los problemas, en consecuencia, el valor numérico de los coeficientes efectivos. De hecho, el alto número de Reynolds, la deformación de las burbujas, el desprendimiento de la estela y la interacción entre burbujas vecinas definitivamente merecen un análisis exhaustivo.

Tabla 10.2. Velocidad de la burbuja de helio.

ε_b	v_{bl} [m/s]	v_r [m/s]	v_b [m/s]
0.002	0.2081	0.2085	2.9885
0.0067	0.2064	0.2078	2.9878
0.0100	0.2052	0.2073	2.9873
0.0400	0.1944	0.2026	2.9826
0.0800	0.1805	0.1962	2.9762
0.1000	0.1737	0.1930	2.9730

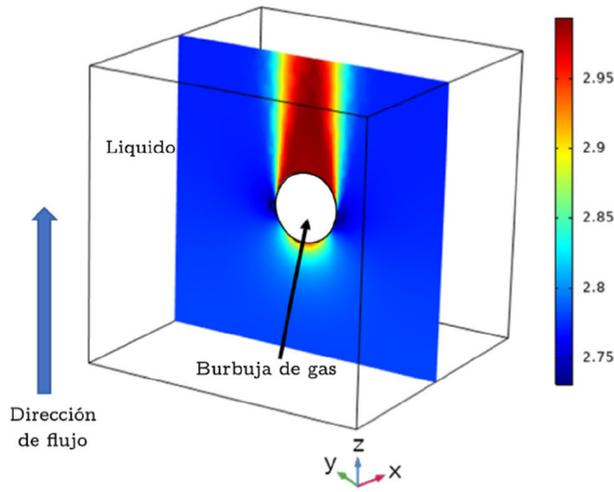


Figura 10.3. La velocidad local del líquido [m/s] alrededor de una burbuja de gas.

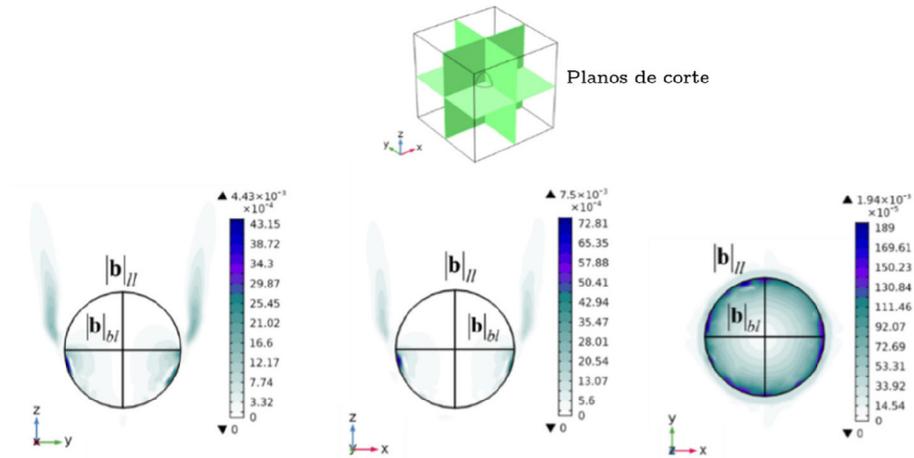


Figura 10.4. Solución del problema 1 [m].

En la **Figura 10.4** el campo de coeficientes variables asociadas al problema 1 se grafica como una variable global, *i.e.*, se grafica la norma:

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{b_{ll,x}^2 + b_{ll,y}^2 + b_{ll,z}^2}, & \text{sal fundida} \\ \sqrt{b_{bl,x}^2 + b_{bl,y}^2 + b_{bl,z}^2}, & \text{helio} \end{cases} \quad (10.27)$$

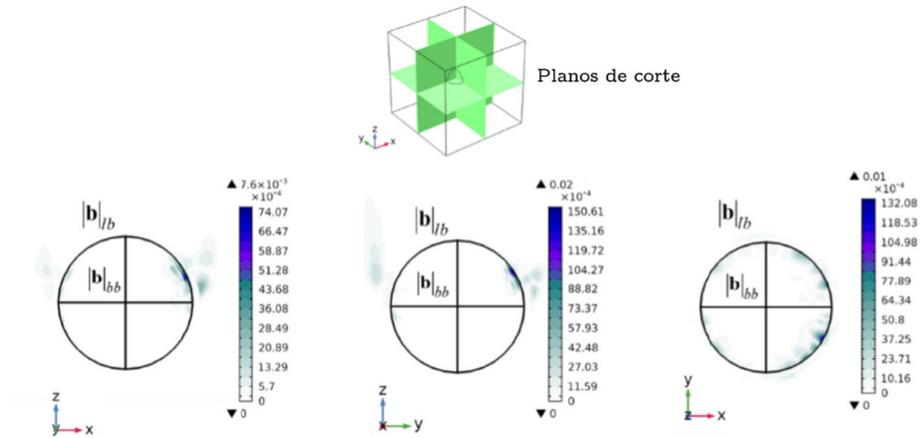


Figura 10.5. Solución del problema 2 [m].

Aquí $b_{ll,x}$ se refiere al elemento x del vector \mathbf{b}_{ll} , etc. Siguiendo la misma definición de variables globales, en la **Figura 10.5** se muestra la solución de los coeficientes variables del problema 2 y en la **Figura 10.6** corresponde al problema 3.

En general, observamos distribuciones altamente no simétricas de los campos. Además, notamos que la magnitud de \mathbf{b}_{ll} , \mathbf{b}_{lb} , \mathbf{b}_{bl} y \mathbf{b}_{bb} asociadas con gradientes espaciales, es mucho menor (casi tres órdenes de magnitud) que s_l y s_b vinculadas

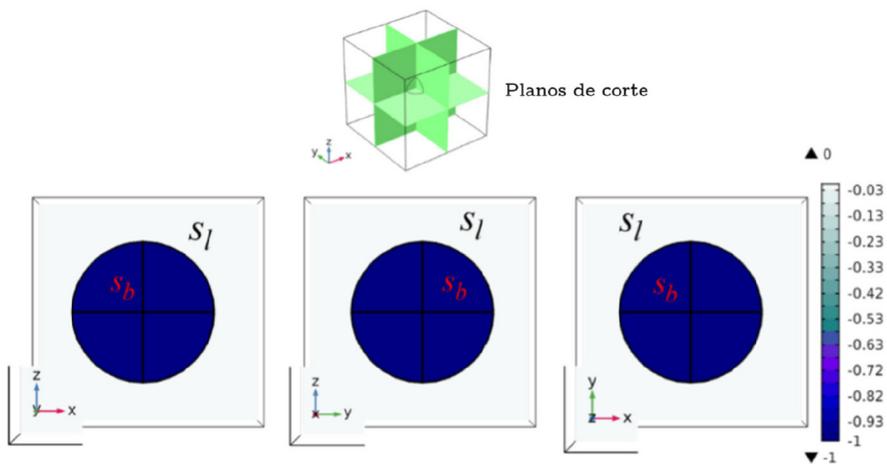


Figura 10.6. Solución del problema 3 [adimensional].

con la diferencia de temperatura entre la sal fundida y el helio. Este resultado implica que la diferencia de temperatura entre el combustible líquido y el gas helio contribuye a una proporción significativa en las desviaciones de temperatura en ambas fases. Además, la distribución no simétrica del campo indica que la desviación de temperatura no es homogénea en la superficie de la burbuja.

Cada coeficiente de la solución formal (columna 3 de la **Tabla 10.1**), se puede interpretar como la contribución a la desviación de temperatura en la fase de combustible líquido o gaseoso. Consecuentemente, \mathbf{b}_{ij} para $i, j = l, b$ son contribuciones de gradientes espaciales y s_k para $K = l, b$ es la contribución de diferencia de temperaturas entre la sal fundida y el helio sobre las desviaciones de temperatura de cada fase; \mathbf{b}_{ll} es la contribución de los gradientes espaciales en la fase líquida sobre la desviación de temperatura para la misma fase, \mathbf{b}_{lb} es la contribución de los gradientes espaciales en la fase gaseosa a la desviación espacial en la fase líquida, \mathbf{b}_{bl} es la contribución del gradiente espacial en la fase líquida a la desviación espacial en la fase gaseosa, y \mathbf{b}_{bb} representa el efecto de los gradientes espaciales en la fase gaseosa sobre la desviación de la temperatura en la misma fase.

De acuerdo con la **Figura 10.4**, los coeficientes \mathbf{b}_{ll} y \mathbf{b}_{bl} presentan en los planos de corte verticales mayores contribuciones que en el plano horizontal, donde la interfase líquido-gas presenta los mayores valores. Se observa que \mathbf{b}_{ll} es pequeña y uniforme y su valor mayor se encuentra en la interfase gas-líquido. Este último comportamiento es similar al observado para \mathbf{b}_{lb} en **Figura 10.5**. La contribución de \mathbf{b}_{lb} en los tres planos de corte se presentan pequeñas regiones donde se intensifica esta variable, siendo para la mayoría uniforme y pequeña. En general \mathbf{b}_{ll} se intensifica en la interfase, con mayor acumulación en la dirección del flujo y es más dispersa en las otras direcciones.

El coeficiente cruzado, \mathbf{b}_{ij} , Muestra una distribución no simétrica alrededor de la burbuja. Su intensidad depende en gran medida de la dirección del flujo, como se muestra en **Figura 10.5** a través de los planos xy , $y\zeta$ y ζx , la magnitud es más intensa a lo largo del eje ζ en comparación con la dirección horizontal. El valor máximo se encuentra en la interfaz entre el fluido combustible y la burbuja de helio. Comparando las **Figuras 10.4** y **10.5**, es evidente que las magnitudes de \mathbf{b}_{bb} y \mathbf{b}_{lb} son un orden de magnitud mayor que \mathbf{b}_{ll} y \mathbf{b}_{bl} . Estos coeficientes determinan la contribución de $\nabla\langle T_l \rangle^l$ y $\nabla\langle T_b \rangle^b$ sobre las desviaciones espaciales, y sus magnitudes son indicativas de cuál de ellas predomina.

De acuerdo con la **Figura 10.6**, los coeficientes escalares s_l y s_b varían ampliamente, siendo la burbuja el lugar con el valor más alto (1) y la fase líquida con los más pequeños. Estos coeficientes muestran un comportamiento casi uniforme en el volumen del fluido y dentro de la burbuja, y se intensifican en algunos puntos de la interfaz. Como estos coeficientes están relacionadas con las diferencias de temperatura entre el helio de la burbuja y el líquido combustible, y su magnitud es mucho mayor que los otros coeficientes, es evidente que las desviaciones de temperatura dependen principalmente de s_l y s_b .

Los resultados muestran que los coeficientes de la solución de las desviaciones presentan valores máximos en la interfase burbuja-líquido. Estos coeficientes están fuertemente influenciados por las interacciones en esta zona, *i.e.*, los gradientes de temperatura de las fases líquida y gaseosa y las diferencias de temperatura. Las desviaciones de temperatura en ambas fases dependen principalmente de la diferencia de temperatura entre fases y, en menor medida, de los gradientes espaciales.

10.9. Ecuaciones escaladas de transporte de energía

Las ecuaciones escaladas de transporte de calor para combustible líquido y helio se obtienen agrupando términos y al dotarlos de significado físico a la escala del reactor.

Modelo escalado para el combustible líquido:

$$\begin{aligned} & \varepsilon_l (\rho C p)_l \frac{\partial \langle T_l \rangle^l}{\partial t} - (\rho C p)_l \langle T_l \rangle^l \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial t} + (\rho C p)_l \nabla \cdot (\varepsilon_l \langle \mathbf{v}_l \rangle^l \langle T_l \rangle^l) + k_l \nabla \varepsilon_l \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l \\ & = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{ll} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l + \mathbf{K}_{lb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b] + \mathbf{u}_{ll} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l + \mathbf{u}_{lb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b - a_v h (\langle T_l \rangle^l - \langle T_b \rangle^b) + \varepsilon_l \langle q_l^m \rangle^l \end{aligned} \quad (10.28)$$

Modelo escalado para el helio:

$$\begin{aligned} & (\rho C p)_b \varepsilon_b \frac{\partial \langle T_b \rangle^b}{\partial t} - (\rho C p)_b \langle T_b \rangle^b \frac{\partial \varepsilon_b}{\partial t} + (\rho C p)_b \varepsilon_b \nabla \cdot (\langle \mathbf{v}_b \rangle^b \langle T_b \rangle^b) + k_b (\nabla \varepsilon_b) \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b \\ & = \nabla \cdot [\mathbf{K}_{bb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b + \mathbf{K}_{bl} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l] + \mathbf{u}_{bb} \cdot \nabla \langle T_b \rangle^b + \mathbf{u}_{bl} \cdot \nabla \langle T_l \rangle^l - a_v h (\langle T_b \rangle^b - \langle T_l \rangle^l) \end{aligned} \quad (10.29)$$

Tabla 10.3. Coeficientes escalados de transferencia de calor para un reactor MSR.

Sal fundida	Helio
$\mathbf{K}_{ll} = k_l \left(\varepsilon_l \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} \mathbf{b}_{ll} dA \right) - (\rho C p)_l \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{ll} \rangle$	$\mathbf{K}_{bb} = k_b \left(\varepsilon_b \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} \mathbf{b}_{bb} dA \right)$
$\mathbf{K}_{lb} = \frac{k_l}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} \mathbf{b}_{lb} dA - (\rho C p)_l \langle \tilde{\mathbf{v}}_l \mathbf{b}_{lb} \rangle$	$\mathbf{K}_{bl} = \frac{k_b}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} \mathbf{b}_{bl} dA$
$\mathbf{u}_{ll} = (\rho C p)_l \langle \tilde{\mathbf{v}}_l s_l \rangle + k_l \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ll} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} s_l dA \right)$	$\mathbf{u}_{bb} = k_b \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{bb} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} s_b dA \right)$
$\mathbf{u}_{lb} = -(\rho C p)_l \langle \tilde{\mathbf{v}}_l s_l \rangle + k_l \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla \mathbf{b}_{lb} dA + \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} s_l dA \right)$	$\mathbf{u}_{bl} = k_b \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{bl} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} s_b dA \right)$
$\alpha_v h = -k_l \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{lb} \cdot \nabla s_l dA \right)$	$\alpha_v h = k_b \left(\frac{1}{V} \int_{A_{lb}} \mathbf{n}_{bl} \cdot \nabla s_b dA \right)$

En la **Tabla 10.3** se presentan los coeficientes escalados de transferencia de calor como función de los coeficientes variables. Es importante destacar que la sal fundida en el término de desviaciones espaciales aparece en los tensores de coeficientes escalados, que representa que los efectos de conducción a la escala del reactor estas desviaciones contribuyen en el transporte de calor, en el caso del helio estas desviaciones son despreciables por la uniformidad del tamaño de las burbujas, y que todas ellas se desplazan a la misma velocidad. También significa que la variable local de velocidad del gas es igual a la velocidad intrínseca del helio, *i.e.*, $\mathbf{v}_b \approx \langle \mathbf{v}_b \rangle^b$.

10.10. Coeficientes escalados de transporte de energía

Como se puede observar, los coeficientes escalados dependen de los coeficientes de las soluciones de las desviaciones espaciales de temperatura. Las **Figuras 10.7** y **10.8** muestra el comportamiento de los coeficientes escalados vs la fracción volumen del helio ε_b . Se muestran los componentes en las direcciones principales, xx , yy y zz , ya que los cruzados son mucho más pequeños. El comportamiento del

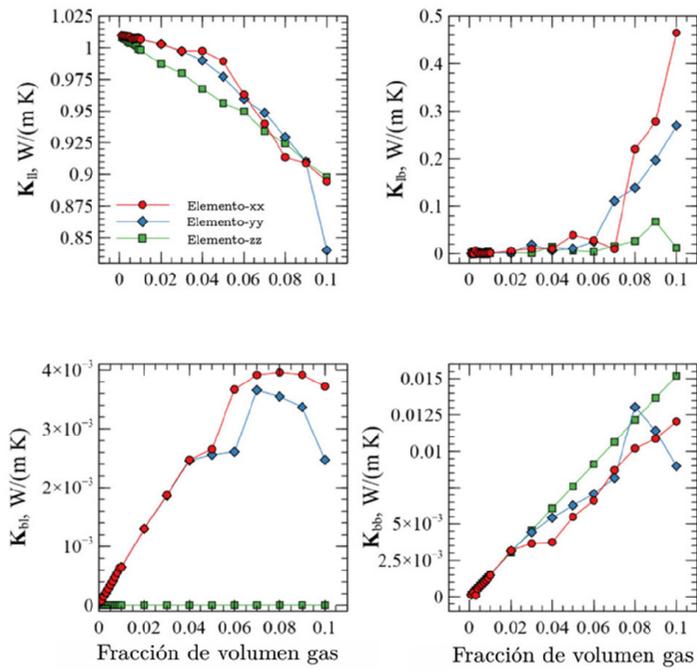


Figura 10.7. Tensores térmicos escalados para combustible líquido y helio.

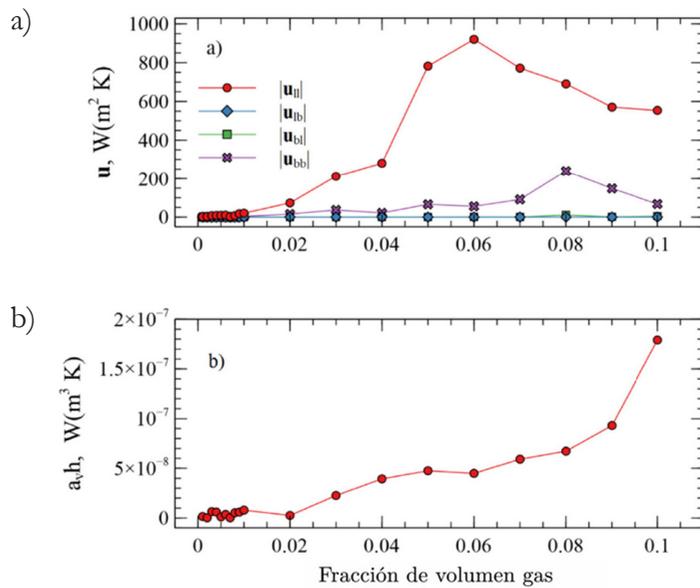


Figura 10.8. Coeficientes escalados: (a) convectivos; b) transferencia de calor interfacial.

componente vertical del tensor $\mathbf{K}_{ll}(K_{ll,zz})$, corresponde a la conductividad térmica efectiva de la fase líquida; también incluye la contribución de las desviaciones espaciales en la velocidad del fluido que se conoce como término de dispersión. Este coeficiente disminuye a medida que aumenta la fracción de volumen de la fase gaseosa. En sentido inverso, el componente vertical del tensor $\mathbf{K}_{bb}(K_{bb,zz})$ aumenta a medida que lo hace la fracción de volumen. Nótese que, en general, los elementos horizontales, xx e yy , siguen la misma tendencia que el elemento vertical, con algunas diferencias para fracciones de volumen de helio más altas.

Los componentes verticales de los tensores de conductividad efectiva cruzados, $\mathbf{K}_{lb}(K_{lb,zz})$ y $\mathbf{K}_{bl}(K_{bl,zz})$, aumenta a medida que lo hace la fracción de volumen hasta aproximadamente 0.07, entonces el coeficiente \mathbf{K}_{bl} disminuye mientras \mathbf{K}_{lb} aumenta exponencialmente. El elemento vertical de \mathbf{K}_{bl} es insignificante en comparación con los componentes horizontales, mientras que en el caso de \mathbf{K}_{lb} todos sus componentes principales presentan un orden de magnitud similar, sin embargo, para todos los casos mostrados se cumplieron los cálculos de anisotropía.

En la **Figura 10.8a** presenta el comportamiento de los vectores escalados convectivos \mathbf{u}_{bb} , \mathbf{u}_{bl} , \mathbf{u}_{ll} y \mathbf{u}_{lb} . Por ejemplo, la norma se define como $|\mathbf{u}_{ll}| = \sqrt{u_{ll,xx}^2 + u_{ll,yy}^2 + u_{ll,zz}^2}$. Se encontró que las desviaciones de la velocidad del fluido no son relevantes en estos coeficientes efectivos. En general, el coeficiente relacionado con el combustible líquido, \mathbf{u}_{ll} predomina, y la tendencia es a aumentar a medida que la fracción de volumen de gas lo hace hasta aproximadamente 0.06. Los vectores cruzados \mathbf{u}_{lb} y \mathbf{u}_{bl} despliegan valores insignificantes.

Finalmente, el coeficiente escalado $a_v h$ da información sobre el calor transferido de una fase a otra. En este coeficiente es esencial la retroalimentación entre fases. Según el comportamiento mostrado en **Figura 8b**, la capacidad de transferencia de calor se produce cuando la fracción de volumen de gas aumenta, y lo hace de forma exponencial a medida que aumenta la presencia de helio dentro del reactor nuclear.

Los parámetros escalados más relevantes se ajustaron a correlaciones empíricas como funciones de la fracción de volumen de helio, para facilitar su implementación en programas informáticos (**Tabla 10.4**). Las siguientes expresiones son válidas para la condición de operación nominal discutida anteriormente, y para fracciones de volumen de gas que van desde 0.0 a 0.1. El error cuadrático medio máximo de estas correlaciones es 0.009 para $K_{lb,xx}$.

Tabla 10.4. Correlaciones empíricas de la conductividad escalada: \mathbf{K} [W/(mK)].

$$K_{ll,xx} = 1.0181 - 1.1259 \varepsilon_b;$$

$$K_{ll,yy} = 1.0204 - 1.2649 \varepsilon_b;$$

$$K_{ll,zz} = 1.0100 - 1.0861 \varepsilon_b$$

$$K_{bl,xx} = -1.1211 \times 10^{-4} + 0.0897 \varepsilon_b - 0.6099 \varepsilon_b^2 + 1.2212 \varepsilon_b^3;$$

$$K_{bl,yy} = 9.6399 \times 10^{-5} + 0.0490 \varepsilon_b + 0.4258 \varepsilon_b^2 - 6.5757 \varepsilon_b^3;$$

$$K_{bl,zz} \approx 0$$

$$K_{lb,xx} = 1.7125 \times 10^{-3} + (7.2735 \times 10^{-3})^{-(\ln \varepsilon_b + 2.1488)};$$

$$K_{lb,yy} = -5.5027 \times 10^{-5} + (0.0369)^{-(\ln \varepsilon_b + 1.9120)};$$

$$K_{lb,zz} = 1.1052 \times 10^{-3} + (0.16374)^{-(\ln \varepsilon_b + 0.4566)}$$

$$a_v h \text{ [W/(m3K)]} = 1.1582 \times 10^{-8} + 7.4105 \times 10^{-5} \varepsilon_b^{2.7098}$$

10.11. Comparación de la conductividad térmica

Para evaluar la capacidad de predicción de las correlaciones empíricas propuestas anteriormente, presentamos en la **Figura 10.9** la comparación de la conductividad térmica escalada calculada con las correlaciones y con la calculada a través de la metodología de campo de fases (Hu *et al.*, 2009).

La conductividad térmica escalada ha sido normalizada con la conductividad térmica del material que rodea la burbuja de gas. Destacamos que Hu *et al.* (2009) estimaron una conductividad térmica única utilizada en modelos de equilibrio térmico local, mientras que el modelo térmico escalado contiene 4 tensores térmicos. Además, para hacer una comparación adecuada, la conductividad térmica escalada única equivalente se calcula de acuerdo con:

$$\mathbf{K}_{eff} = \mathbf{K}_{ll} + \mathbf{K}_{lb} + \mathbf{K}_{bl} + \mathbf{K}_{bb} \quad (10.30)$$

Cabe señalar que se observa una buena concordancia incluso para fracciones de volumen de gas mayores. Es notable la precisión de las predicciones obtenidas para casos de fracciones de volumen de gas pequeñas, que son condiciones que

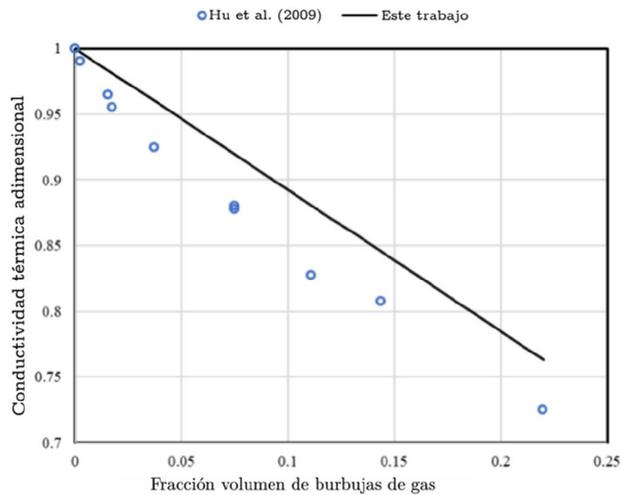


Figura 10.9. Comparación de predicciones de la conductividad térmica escalada.

se esperan con más frecuencia durante el funcionamiento de este tipo de reactor nuclear.

10.12. Experimentos numéricos

Una vez que se dispone de los coeficientes escalados de transferencia de calor, el modelo escalado está listo para modelar y simular el núcleo del reactor MSR. Cada coeficiente contribuye a través de diferentes efectos al fenómeno de transferencia de calor y permite conocer la temperatura de las fases considerando el efecto del gradiente espacial y la diferencia de temperatura sobre las desviaciones de temperatura de las fases líquida y gaseosa. La geometría del núcleo para la solución del modelo es un cilindro de 2.25[m] de largo y 2.25[m] de diámetro, donde circulan sales fundidas y burbujas de helio. Las burbujas de gas se encuentran dispersas en el fluido y distribuidas uniformemente en la sección transversal del núcleo del reactor. Además de la geometría, se consideran condiciones de contorno adiabáticas, valores iniciales de temperatura y las condiciones de tipo Dirichlet en la entrada. Para esto último, se utilizan parámetros nominales de operación como la temperatura de la sal combustible y de las burbujas de helio en la entrada, equivalentes a 923[K]. La **Tabla 10.5** presenta las propiedades fisicoquímicas del $\text{LiF-ThF}_4\text{-}^{233}\text{UF}_4$ utilizado en los experimentos numéricos.

Tabla 10.5. Propiedades fisicoquímicas de $\text{LiF-ThF}_4\text{-}^{233}\text{UF}_4$.

Propiedad	Correlación	973.15 [K]	Validez [K]
ρ [kg/m ³]	$4094 - 0.882 (T_{[\text{K}]} - 1008)$	4125	[890 - 1120]
ν [m ² /s]	$5.54 \times 10^{-8} e^{3689/T_{[\text{K}]}}$	2.46×10^{-6}	[890 - 1120]
k [W/mK]	$0.928 + 8.397 \times 10^{-5} \times T_{[\text{K}]}$	1.0097	[890 - 1120]
C_p [J/kg K]	$-1.111 + 0.000278 \times 10^3 \times T_{[\text{K}]}$	1594	[868 - 907]

El modelo escalado del combustible líquido contiene el término densidad de potencia $\langle q_l'' \rangle^l$ que no es uniforme:

$$\langle q_l'' \rangle^l(z) = \langle q_l'' \rangle_0^l \text{sen} \left(\frac{\pi z}{2.25} \right) \quad (10.31)$$

donde $\langle q_l'' \rangle_0^l$ es la densidad de potencia con un valor de 7.7378×10^8 [W/m³], siendo el valor máximo.

En la **Figura 10.10a** se representa gráficamente la temperatura en la coordenada axial para una fracción de volumen de gas de 0.0067. Mientras tanto, la **Figura 10.10b** muestra la distribución de temperatura para una fracción de volumen de gas mayor de 0.1. En ambos casos, el perfil de temperatura mantiene cualitativamente la misma distribución, con la temperatura más alta en la parte exterior

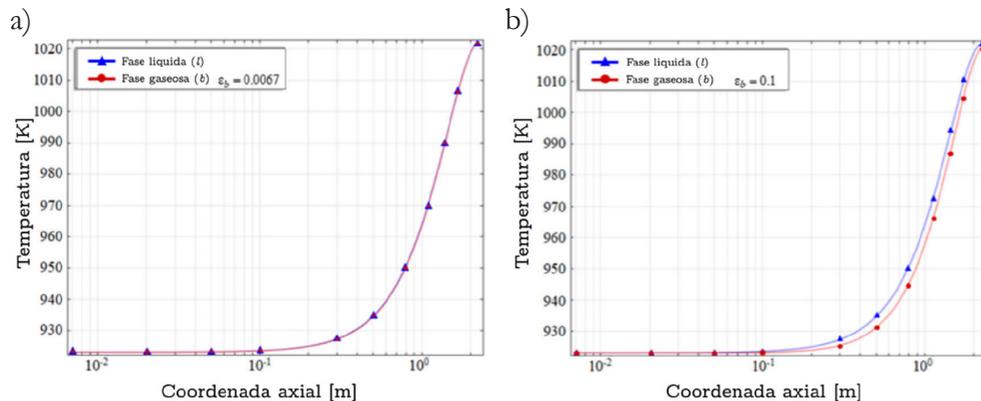


Figura 10.10. Distribución de temperatura en un MSR: a) $\varepsilon_b = 0.0067$ y b) $\varepsilon_b = 0.1$.

del núcleo; sin embargo, en el caso de una fracción de volumen de burbuja de 0.1, el sistema no alcanza el equilibrio térmico. Por lo tanto, el modelo escalado puede ser una herramienta para evaluar el estado termodinámico del núcleo del reactor para otros valores de fracción de burbuja diferentes del valor nominal.

MÓDULO DE YOUNG ESCALADO EN PASTILLAS DE UO_2

11.1. Escalas jerárquicas de un reactor nuclear

En el mundo de la física están establecidas tres escalas fundamentales: microescala, mesoescala y macroescala, sin embargo, en el contexto de un reactor nuclear establecer cada uno de estos puede ser factible, pero sin llegar a una explicación completa, por lo que hacemos un intento de establecer las escalas jerárquicas en un reactor nuclear como se presenta en la **Figura 11.1**. En esta figura, se presenta un reactor ABWR, considerado como un reactor de Generación III. Se puede observar el reactor nuclear, el cual consiste en una vasija que contiene elementos internos y penetraciones de entrada y salida de flujo, esto constituye la escala más grande de un reactor nuclear, pudiendo realizar un balance de energía de entrada y salida para estimar la potencia del reactor.

La pastilla de combustible nuclear es un material sinterizado con características heterogéneas constituido por la fase sólida (partícula de combustible) y la fase gas (espacio entre sólidos). Para las pastillas de combustible, se aplicó el método de escalamiento a las ecuaciones que gobiernan la mecánica a nivel microescala

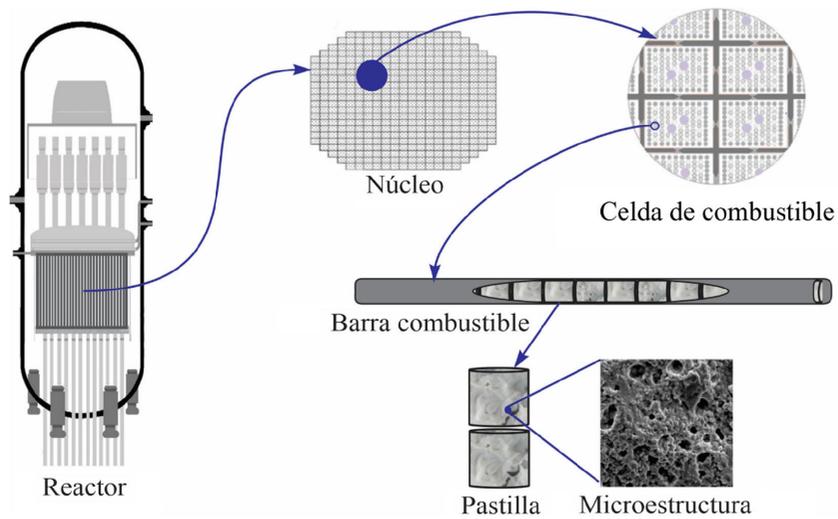


Figura 11.1. Escalas jerárquicas en un reactor ABWR (Generación III).

para calcular el módulo de elasticidad escalado, es una función de la porosidad, obteniendo la ecuación en principio válida a escala de la pastilla, que incluye dos tensores relacionados con el módulo elástico y un nuevo vector efectivo coeficiente de elasticidad interfacial que cuantifica la deformación. El análisis presentado en este capítulo considera el cálculo de los coeficientes escalados para cuatro casos de microestructura: configuraciones de ranura, de copa esférica y ranura, simétrica y asimétrica con las que es posible considerar los diferentes tipos de porosidad que pueden ocurrir dentro del combustible de UO_2 durante la operación del reactor. Además, se propone una correlación del módulo de Young en función de la porosidad y la presión que puede implementarse en forma directa en programas computacionales.

11.2. Análisis de la microestructura

Recordemos que el método de escalamiento es una técnica matemática utilizada para derivar rigurosamente ecuaciones continuas para sistemas multifásicos. La aplicación de este método a las ecuaciones de gobierno a una escala determinada conduce a ecuaciones a escalas mayores y proporciona el vínculo matemático con la física a escalas menores. Comenzamos el estudio suponiendo dos fases bien definidas con propiedades homogéneas en la pastilla de combustible. De acuerdo con la microestructura, el sistema puede conceptualizarse como un medio poro-

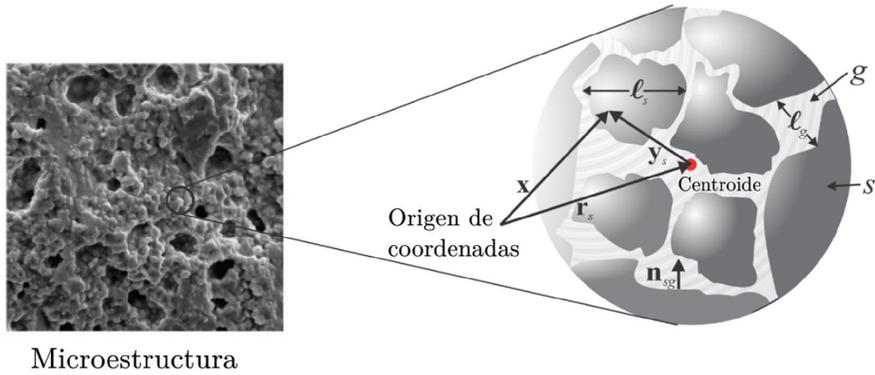


Figura 11.2. Escala de poros y volumen representativo que muestra vectores normales y de posición (Microestructura de Rest et al., 2019).

so, como se ilustra en la **Figura 11.2**. Por lo tanto, a escala de poro, hay dos fases homogéneas: gas y sólido.

Con la idea de dotar de independencia este capítulo, recordemos que una cantidad escalada $\langle \psi_k \rangle$ en un marco Euleriano, se puede definir la función asociada con la fase k de la siguiente manera:

$$m(\mathbf{y}) * \langle \psi_k \rangle(\mathbf{x}, t) = \int_V m(\mathbf{y}) \psi_k(\mathbf{x} + \mathbf{y}_k, t) dV, \quad k = g, s \quad (11.1)$$

donde V es el volumen delimitado por la superficie cerrada S , la función ψ_k depende del tiempo y espacio, es la función peso m . El significado físico y matemáticos de esta ecuación representa a \mathbf{x} un vector de posición localizado en el centroide de V , y \mathbf{y}_s localiza puntos dentro de V asociados a la fase- s . La función de ponderación debe tener una condición de normalización y poseer derivadas de todos los órdenes para todos los \mathbf{y} , *i.e.*, $m(\mathbf{y}) = V^{-1} |\mathbf{y}| \leq r_0$ siendo r_0 el tamaño del volumen representativo, de lo contrario $m(\mathbf{y}) = 0$. En el método de escalamiento, es necesario definir los operadores superficial e intrínseco:

Operador superficial:

$$\langle \psi_k \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_k(\mathbf{x}, t)} \psi_k dV, \quad k = g, s \quad (11.2)$$

Operador intrínseco:

$$\langle \psi_k \rangle^k = \frac{1}{V_k} \int_{V_k(\mathbf{x},t)} \psi_k dV, \quad k = g, s \quad (11.3)$$

Se puede observar que se presenta con una notación corta. Las cantidades superficial e intrínseca están relacionadas por $\langle \psi_k \rangle = \varepsilon_k \langle \psi_k \rangle^k$ para $k = g, s$, donde ε_k es la fracción volumen de la fase $-k$. Para el procedimiento de escalamiento se aplica el teorema basado en el teorema de divergencia de Gauss:

$$\langle \nabla \psi_k \rangle = \nabla \langle \psi_k \rangle^k + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \psi_k \mathbf{n}_{kf} dA, \quad k, f = s, g, \quad f \neq k \quad (11.4)$$

Y el teorema de transporte de Reynolds

$$\left\langle \frac{\partial \psi_k}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_k \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \psi_k \mathbf{w}_{sg} \cdot \mathbf{n}_{kf} dA, \quad k, f = s, g, \quad f \neq k \quad (11.5)$$

donde \mathbf{w}_{sg} es la velocidad interfacial, A_{sg} es el área interfacial dentro de V , y \mathbf{n}_{sg} es el vector normal unitario. El método de escalamiento está sujeto a la siguiente restricción de escala de longitud:

$$\ell_k \ll r_0 \ll L, \quad k = g, s \quad (11.6)$$

donde ℓ_k es la longitud característica de las fases, r_0 es la longitud característica del volumen promedio, y L es la longitud característica de la pastilla de combustible.

11.3. Ecuación gobernante en la microescala

La ecuación local e instantánea para la deformación de la fase sólida en términos del *vector de desplazamiento* \mathbf{u}_s , condiciones iniciales y de frontera están dadas por:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{u}_s}{\partial t^2} = -\nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) + \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \quad (11.7)$$

$$\text{C.I.1} \quad \frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} = 0 \quad \text{en} \quad t = 0 \quad (11.8)$$

$$\text{C.I.2} \quad \mathbf{u}_s = 0 \quad \text{en} \quad t = 0 \quad (11.9)$$

$$\text{C.F.1} \quad -\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) = a P_g \mathbf{u}_s \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (11.10)$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma}_g = \mathbf{n}_{sg} \cdot \boldsymbol{\sigma}_s \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (11.11)$$

En estas ecuaciones ρ es la densidad, \mathbf{I} es el tensor unitario; $E_1 = \mu$ y $E_2 = \mu + \lambda$ son los coeficientes de Lamé:

$$\mu = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \quad \text{y} \quad \lambda = \frac{E_s}{2(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (11.12)$$

donde ν es el coeficiente de Poisson y E_s es el coeficiente de elasticidad. En (11.11), $\boldsymbol{\sigma}$ es el tensor de esfuerzos.

En (11.7), $\mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t)$, considera los efectos externos y tiene la siguiente definición:

$$\mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) = \alpha_s \left(\lambda_s + \frac{2\mu_s}{3} \right) \nabla T_s \quad (11.13)$$

donde α_s es el coeficiente de expansión y T_s es la temperatura del sólido.

La condición de frontera C.F.1 se puede entender a través del diagrama esquemático de la **Figura 11.3** que representa las fuerzas que actúan en la interfaz: $\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n}_{sg} F$, siendo $\mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s)$, y $\mathbf{n}_{sg} F = a P_g \mathbf{u}_s$ para $\mathbf{u}_s = \mathbf{n}_{sg} u_s$.

Respecto C.F.2, considera condición de isotropía, $\boldsymbol{\sigma} = -P_g$ y deformación lineal según la ley de Hooke, cuando el cambio de desplazamiento es despreciable $\mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{u}_s = u_{sg}$ en A_{sg} .

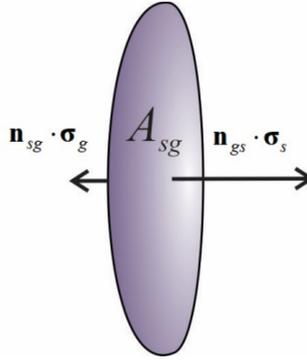


Figura 11.3. Diagrama esquemático: fuerzas en la interfaz gas-sólido.

11.4. Ecuación gobernante en la macroescala

Se puede demostrar que la ecuación escalada de desplazamiento está dada por:

$$\begin{aligned} \rho_s \varepsilon_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} = & -\varepsilon_s \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ -\varepsilon_s \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] & + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA + \varepsilon_s \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s \end{aligned} \quad (11.14)$$

donde:

$$\left\langle \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{u}_s}{\partial t} \right) \right\rangle = \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle}{\partial t^2} \quad (11.15)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (E_1 \nabla \mathbf{u}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{u}_s) \rangle = & \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{u}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ + \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{u}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] & - \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA \end{aligned} \quad (11.16)$$

Y después se expresó en términos de cantidades intrínsecas.

La variable local de desplazamiento se puede descomponer en:

$$\mathbf{u}_s = \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \tilde{\mathbf{u}}_s \quad (11.17)$$

donde $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$ es el desplazamiento intrínseco y $\tilde{\mathbf{u}}_s$ las desviaciones espaciales, entonces sustituyendo se obtiene:

$$\begin{aligned} \rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} = \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s - \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ - \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s \end{aligned} \quad (11.18)$$

donde:

$$\left(\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} dA \right) = -\nabla \varepsilon_s = 0 \quad (11.19)$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \mathbf{u}_s dA = a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s \quad (11.20)$$

La densidad de área interfacial está definida por:

$$a = \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} dA \quad (11.21)$$

11.5. Ecuaciones de gobierno para las desviaciones espaciales

Sustituyendo (11.17) en la ecuación local y después restar la ecuación escalada, se obtiene:

$$\begin{aligned} \rho_s \frac{\partial^2 \tilde{\mathbf{u}}_s}{\partial t^2} = & -\varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s - \nabla \cdot \left[E_1 \left(\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \tilde{\mathbf{u}}_s \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] \\ & - \nabla \cdot \left[E_2 \left(\mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \tilde{\mathbf{u}}_s \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \right) \right] - \frac{\varepsilon_s^{-1}}{V} \int_{A_{sg}} a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s dA \end{aligned} \quad (11.22)$$

donde $\tilde{\mathbf{m}}(\mathbf{r}, t)$ se consideró despreciable. Para obtener una ecuación más manejable, se procede a estimar el orden de magnitud de los términos y compararlos entre sí. De esta manera, es posible identificar los términos más predominantes que rigen el campo de desviaciones espaciales. Se puede demostrar que los términos de integrales son despreciables. Además, considerando régimen permanente, entonces (11.22) se simplifica a:

$$\nabla \cdot [E_1 (\nabla \tilde{\mathbf{u}}_s) + E_2 (\mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s)] = -\varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (11.23)$$

Las condiciones de contorno interfaciales, dadas por (11.10) y (11.11), ahora se reescriben sustituyendo $\tilde{\mathbf{u}}_s$ (11.17):

$$\begin{aligned} \text{C.F.1} \quad & -\mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \tilde{\mathbf{u}}_s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s) + a P_g \tilde{\mathbf{u}}_s \\ & = \mathbf{n}_{sg} \cdot (E_1 \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + E_2 \mathbf{I} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s) + a P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \end{aligned} \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (11.24)$$

$$\text{C.F.2} \quad \mathbf{n}_{sg} \cdot \tilde{\mathbf{u}}_s = \mathbf{n}_{gs} \cdot \boldsymbol{\sigma}_g - \mathbf{n}_{sg} \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad \text{en} \quad A_{sg} \quad (11.25)$$

Se puede observar que este problema de valor límite es de naturaleza lineal y contiene fuentes macroscópicas asociadas con las cantidades intrínsecas $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$, *i.e.*, los términos escalados actúan como constantes debido a las restricciones de escala de longitud dentro del dominio de validez para $\tilde{\mathbf{u}}_s$. De este modo, las soluciones para $\tilde{\mathbf{u}}_s$ se proponen de la forma:

$$\tilde{\mathbf{u}}_s = \mathbf{b}_{1s} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{b}_{2s} \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + S \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \quad (11.26)$$

donde \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y S son *coeficientes variables* de la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$.

11.6. Ecuación escalada de desplazamiento

Con la solución general para las desviaciones espaciales (11.26), podemos volver a (11.18) obteniendo:

$$\rho_s \frac{\partial^2 \langle \mathbf{u}_s \rangle^s}{\partial t^2} = -\nabla \cdot \left[\mathbf{E}_1 \cdot \nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{E}_2 \nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \mathbf{s} \langle \mathbf{u}_s \rangle^s \right] + \varepsilon_s^{-1} a^2 P_g \langle \mathbf{u}_s \rangle^s + \langle \mathbf{m}_s(\mathbf{r}, t) \rangle^s \quad (11.27)$$

donde el módulo escalado del tensor de elasticidad \mathbf{E}_1 , \mathbf{E}_2 y el vector del coeficiente de elasticidad interfacial \mathbf{s} , están dados por:

$$\mathbf{E}_1 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(\varepsilon_s \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{1s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{1s} dA \right) \quad (11.28)$$

$$\mathbf{E}_2 = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(\frac{\varepsilon_s \mathbf{I}}{(1-2\nu)} + \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{2s} dA + \frac{1}{(1-2\nu)} \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{I} \mathbf{n}_{sg} \cdot \mathbf{b}_{2s} dA \right) \quad (11.29)$$

$$\mathbf{s} = \frac{E_s}{2(1+\nu)} \left(1 + \frac{1}{(1-2\nu)} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{sg}} S \mathbf{I} \cdot \mathbf{n}_{sg} dA \quad (11.30)$$

Para resolver numéricamente estas ecuaciones es necesaria la solución de los *coeficientes variables* \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y S .

11.7. Análisis de la microestructura

Los *coeficientes variables* \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y S de la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ se calculan numéricamente en dominios geométricos, para ello utilizamos geometrías representativas, llamadas celdas unitarias. El modelo de celda unitaria se diseña considerando la distribución espacial, los granos de UO₂ y los poros que quedan entre los granos de combustible. A escala microscópica, la distribución de los componentes no es uniforme y el modelo virtual se aproxima a las condiciones reales. Por lo tanto, para considerar los diferentes tipos de porosidad que pueden ocurrir dentro del

combustible de UO_2 durante la operación del reactor, se proponen cuatro aproximaciones de celdas unitarias que representan diferentes topografías con diferente porosidad local, como se muestra en la **Figura 11.4**. En el lado izquierdo de dicha figura se presentan celdas unitarias de tipo cúbico con casquetes esféricos en las esquinas y la ranura, y sus combinaciones. Para cada una de estas celdas se ha asignado un nombre para fines prácticos. La **Figura 4a** se denomina celda asimétrica, para representar el caso en el que la presión del gas llena el poro, y esta

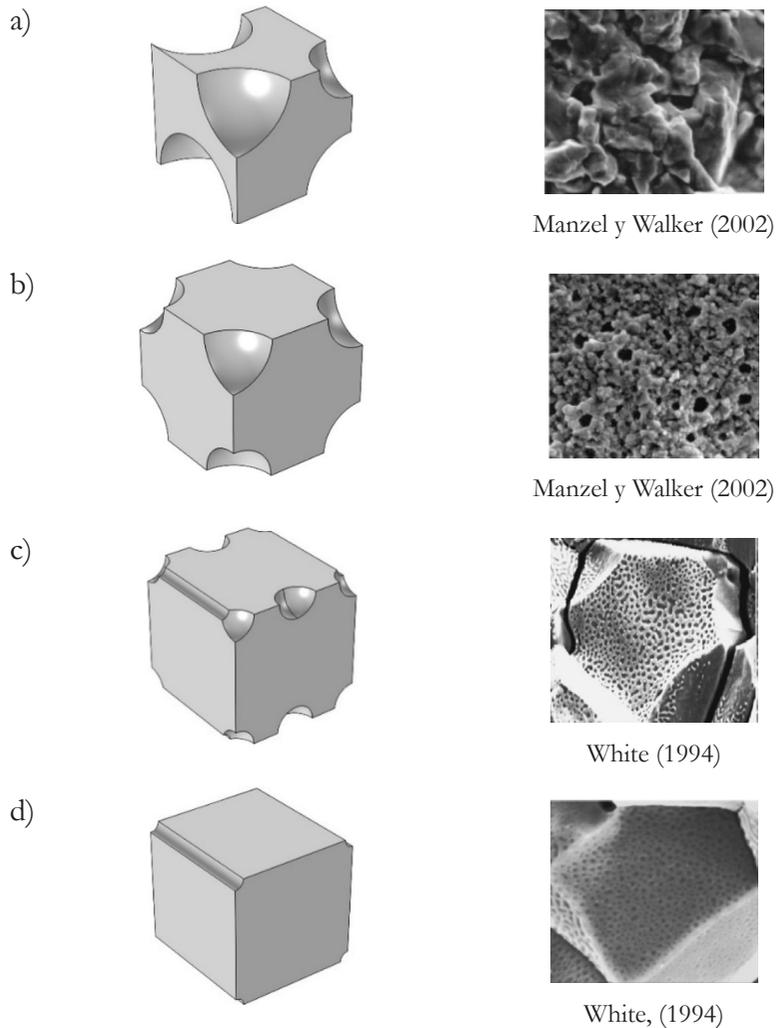


Figura 11.4. Celda unitaria 3D: (a) Asimétrica, (b) Simétrica, (c) Casquete esférico-ranura, y (d) Ranura.

situación provoca la distribución topológica de las burbujas, así como su tamaño. Aquí se consideran el quemado intermedio a alto.

La **Figura 4b** corresponde a la celda simétrica. Para este caso se considera una distribución uniforme de burbujas, es decir, existe simetría en la distribución topológica, además de que las burbujas tienen tamaños casi iguales. Esta situación es una idealización que considera un quemado intermedio.

La **Figura 4c** muestra una celda unitaria compuesta por casquetes esféricos y rendijas, que se denomina celda casquete esférico-rendija. Este caso representa la presencia de burbujas y grietas. En las grietas de la pastilla de combustible, que pueden tener diferentes tamaños y formas, existe una distribución de presión proveniente del hueco. El gas helio se mezcla con los gases presentes en las burbujas adheridas a las grietas. Por otro lado, las burbujas que se encuentran aisladas pueden o no estar presurizadas, ya que algunas pueden contener gases de productos de fisión. Finalmente, la celda de rendija se representa en la **Figura 4d**, que representa la distribución uniforme de grietas y la ausencia de burbujas. Esta situación es una idealización, y representa de manera sencilla la distribución de grietas en la pastilla.

En una investigación en curso, la predicción numérica de coeficientes escalados puede mejorarse sustancialmente utilizando microfotografía real. Este paso implica un esfuerzo computacional previo relacionado con el procesamiento de imágenes, que es una tarea no trivial porque el método de elementos finitos puede fallar para límites complejos, y para el cálculo correcto de los vectores normales unitarios \mathbf{n}_{sg} .

Las celdas unitarias suponen que la pastilla de combustible en su totalidad puede reproducirse replicándolas adecuadamente en direcciones ortogonales. De esta manera, es conveniente imponer condiciones periódicas en los límites externos de las celdas, evitando la necesidad de conocer las condiciones de contorno a escala macroscópica de la pastilla de combustible:

$$\tilde{\mathbf{u}}_s(t, \mathbf{x}) = \tilde{\mathbf{u}}_s(t, \mathbf{x} + \mathbf{l}_i), \quad i = 1, 2, 3 \quad (11.31)$$

Con la restricción de escala:

$$\langle \tilde{\mathbf{u}}_s \rangle^s = 0 \quad (11.32)$$

donde \mathbf{l}_i representa el vector para replicar la celda en la dirección- i .

Tabla 11.1. Problema de valores a la frontera para \mathbf{b}_{1s} , \mathbf{b}_{2s} y S .

Problema para \mathbf{b}_{1s}

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{1s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \cdot \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{b}_{1s}) = 0 \text{ en fase-s; } \mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{1s} - \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{1s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{1s} - \mathbf{n}_{gs} \text{ en } A_{gs}$$

Problema para \mathbf{b}_{2s}

$$-\nabla^2 \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \cdot \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{b}_{2s}) = 0 \text{ en fase-s; } \mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla \mathbf{b}_{2s} - \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{b}_{2s} \right] = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{b}_{2s} - \mathbf{n}_{gs} \text{ en } A_{gs}$$

Problema para S

$$-\nabla^2 S \mathbf{I} - \frac{1}{1-2\nu} \nabla \nabla \cdot S \mathbf{I} (\nabla \cdot \mathbf{b}_{2s}) = \frac{2(1+\nu) a P_g}{E_s} \mathbf{I}; \mathbf{n}_{gs} \cdot \left[\nabla S \mathbf{I} - \frac{1}{1-2\nu} \mathbf{I} \nabla \cdot S \mathbf{I} \right] = \mathbf{I} \frac{2(1+\nu) a P_g (1+S)}{E_s} \text{ en } A_{gs}$$

Ahora, sustituyendo la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ dados por (11.26) en (11.23)-(11.25), se construyen los problemas de valores a la frontera que se presentan en la **Tabla 11.1**, que permiten determinar los coeficientes variables de las soluciones de $\tilde{\mathbf{u}}_s$. Para cada problema de valor límite, las condiciones de periodicidad $\mathbf{b}_{1s}(\mathbf{x} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{1s}(\mathbf{x})$, $\mathbf{b}_{2s}(\mathbf{x} + \mathbf{l}_i) = \mathbf{b}_{2s}(\mathbf{x})$, $S(\mathbf{x} + \mathbf{l}_i) = S(\mathbf{x})$, $i = 1, 2, 3$ y las restricciones de escala $\langle \mathbf{b}_{1s} \rangle^s = 0$, $\langle \mathbf{b}_{2s} \rangle^s = 0$, $\langle S \rangle^s = 0$ se deben considerar.

11.8. Dominio computacional

Se verificó que los resultados numéricos presenten consistencia cuando aumenta la densidad de nodos. La nodalización para cada celda unitaria se muestra en la **Figura 11.5**, que está compuesta por: 135195, 159611, 203183 y 220315 elementos de dominio para las celdas asimétricas, simétricas, de casquete esférico y de rendija, respectivamente.

Estos números de elementos de dominio producen soluciones consistentes bajo recursos computacionales tolerables. Nótese cómo el empleo de elementos de malla triangular conduce a la construcción de una cuadrícula no estructurada. Es importante notar que los coeficientes de solución de las desviaciones son cruciales para determinar las soluciones de $\tilde{\mathbf{u}}_s$, dada por (11.26).

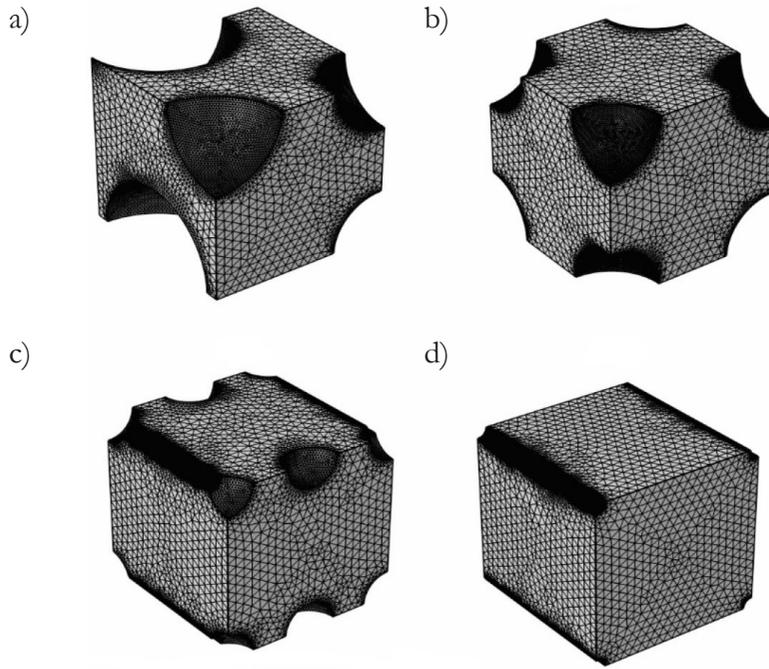


Figura 11.5. Elementos de dominio: (a) 135195, (b) 159611, (c) 203183, y (d) 220315.

11.9. Coeficientes escalados de elasticidad

En esta sección, presentamos la estimación numérica de los coeficientes de solución dados por (11.27)-(11.28). Dada la naturaleza tensorial de los coeficientes escalados, las componentes- xx -, yy -, zz se analizan en función de la presión de poro P_g y porosidad $(1 - \varepsilon_s)$.

Para la porosidad local $(1 - \varepsilon_s)$, consideramos valores característicos de Capia *et al.* (2016), que puede ocurrir dentro del combustible UO_2 (ver **Tabla 11.2**). Para el valor de E_s se utilizó una correlación de MATPRO:

$$E_s(\text{UO}_{2+x}) = 2.334 \times 10^{11} (1 - 1.095 \times 10^{-4} T) \exp(-1.34x) \quad (11.33)$$

donde $x = 0$ para UO_2 y la temperatura promedio es 817.31 [K], entonces E_s es 212.5 [GPa] y el coeficiente de Poisson es $\nu(\text{UO}_2) = 0.316$. Las porosidades para determinar los coeficientes escalados se presentan en la **Tabla 11.2**.

Tabla 11.2. Porosidad local.

Celda unitaria	$(1 - \epsilon_s)$
Rendija	0.01
Casquete esférico-rendija	0.015, 0.025, y 0.035
Simétrica	0.05, 0.075, y 0.1
Asimétrica	0.125, 0.15, 0.175, y 0.2

Como se demuestra en esta sección, estas variables son cruciales en el comportamiento mecánico de los combustibles nucleares. La presión de poro sufre cambios drásticos con la temperatura del combustible, el quemado de combustible y la acumulación de fragmentos de fisión gaseosos dentro del poro (Rest *et al.*, 2019). Por lo tanto, la presión de poros puede cambiar la estructura topológica del combustible y la fracción de volumen de poros. Las componentes xx , yy , zz del coeficiente de elasticidad escalado \mathbf{E}_1/E_s y \mathbf{E}_2/E_s son presentados en **Figuras 11.6**.

Cuando la microestructura se aproxima con *celda simétrica*, los componentes de los coeficientes escalados \mathbf{E}_1 y \mathbf{E}_2 presentan valores similares (para ciertas porosidades) debido a la condición de simetría en la configuración de la celda. A medida que aumenta la porosidad, los valores de los componentes del coeficiente efectivo disminuyen; un aumento de 0.05 a 0.1 en la porosidad induce una disminución de casi 4.5%. Esto representa una relación lineal entre la fracción de volumen y los coeficientes escalados. Como era de esperar y debido a la geometría

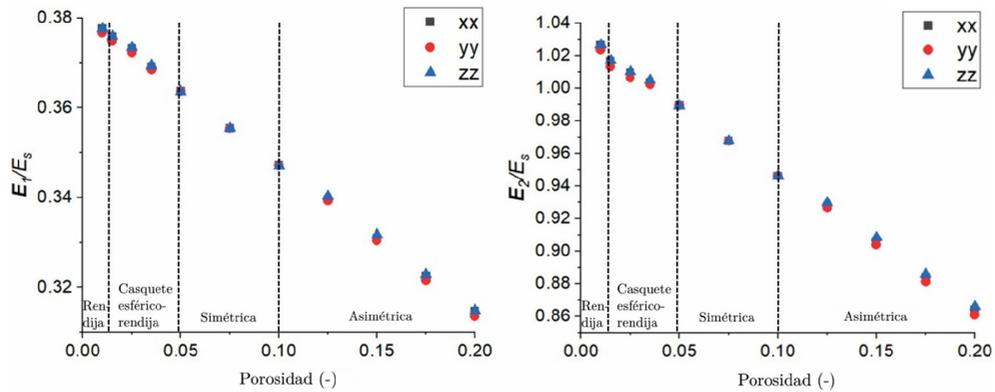


Figura 11.6. Componentes del coeficiente escalado de elasticidad vs porosidad.

simétrica de la celda, los tensores efectivos asociados son simétricos. En general, los tensores tienden hacia los valores μ y $(\mu + \lambda)$, cuando ε_s se incrementa. El comportamiento de los coeficientes efectivos es consistente en el sentido de que \mathbf{E}_2 debe ser mayor que \mathbf{E}_1 .

En el caso de *celda asimétrica*, los coeficientes escalados toman valores diferentes para cada coordenada debido a la distribución espacial de los medios porosos. Las principales diferencias son del orden de milésimas, excepto para las porosidades de 0.175 y 0.2 del componente de \mathbf{E}_2 donde las diferencias están en el orden de centésimas.

Para la celda *casquete esférica-rendija*. Las principales diferencias son del orden de milésimas para las porosidades de 0.015, 0.025, y 0.035. Para la celda rendija, lo que corresponde a una porosidad pequeña, los coeficientes escalados son los mismos en los componentes x , y , z .

En general, los resultados muestran que los coeficientes escalados disminuyen si la porosidad aumenta. Es importante señalar que tanto \mathbf{E}_1 y \mathbf{E}_2 prácticamente son constantes en el rango de presión de 1 a 2 [MPa]. Por este motivo, aquí incluimos únicamente resultados en términos de fracción de volumen. Desde una perspectiva física, el mecanismo interfacial debido a la presión es insignificante para estos coeficientes escalados.

Se calcula la norma del vector *coeficiente de elasticidad interfacial* \mathbf{s} para obtener el valor escalar s que se presentan en la **Figura 11.7**.

Los resultados pueden ser interpretados en términos de la curvatura interfacial, *e.g.*, para porosidad de 0.125 y *celda simétrica*, la componente y presenta una curvatura mayor, y en la *celda asimétrica*, la curvatura máxima tiene lugar en la dirección x . Este fenómeno se puede ilustrar a partir de S a través de (11.30), donde los términos integrales contienen los vectores normales unitarios \mathbf{n}_{sg} , y estos vectores obtienen valores máximos según el eje coordenado. A partir de la solución de las desviaciones espaciales, observamos que el coeficiente variable \mathbf{s} está asociado con el desplazamiento escalado $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$. Es importante, ya que indica que el coeficiente escalado podría llegar a ser relevante en sistemas altamente deformables, mientras que desaparece para materiales frágiles.

Es posible observar que a medida que aumenta la porosidad el coeficiente aumenta para todas las presiones. Pero para cada porosidad, el comportamiento en

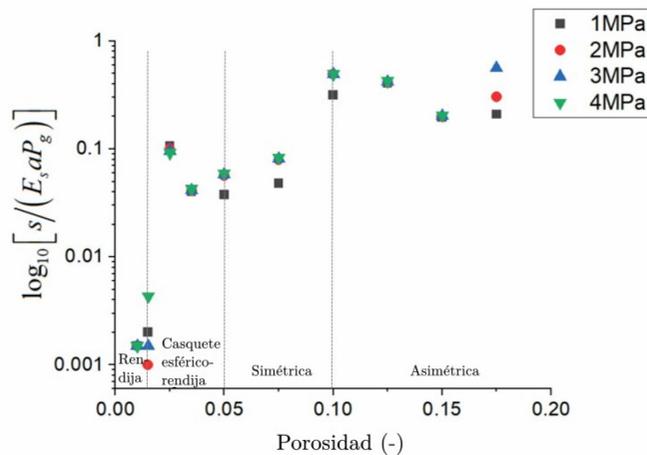


Figura 11.7. Coeficiente de elasticidad interfacial a diferentes presiones del gas.

función de la presión no es el mismo en todos los casos. De acuerdo con esta figura se desprende que no existe una tendencia bien definida en los valores del coeficiente de elasticidad interfacial a lo largo de los ejes de coordenadas cuando aumenta la fracción de volumen. Vemos que dichos coeficientes cambian de manera oscilatoria, lo que implica que la distribución de la presión del gas dentro de la celda unitaria puede no ser uniforme. Entonces, el módulo de elasticidad es menos sensible que el coeficiente de elasticidad interfacial en algunas configuraciones de celdas y presiones de gas.

11.10. Módulo de Young escalado

Se calcula la norma del tensor asociado para obtener el valor escalar de \mathbf{E} , representando el módulo de Young escalado E . Es importante remarcar el módulo de Young se calculó a partir de la ecuación de desplazamiento escalado, donde se obtuvieron los coeficientes escalados para diferentes celdas según el valor de porosidad considerado. En la **Figura 11.8** se indica la celda utilizada para calcular cada módulo de Young, así como la posible ruta de quemado del UO_2 .

En general, los resultados indican que la presencia de burbujas de gas de mayor tamaño en el combustible nuclear puede reducir drásticamente el módulo de Young, haciendo que las pastillas de combustible sean más deformables (menos frágiles). A medida que aumenta la cantidad de gas, el volumen de la

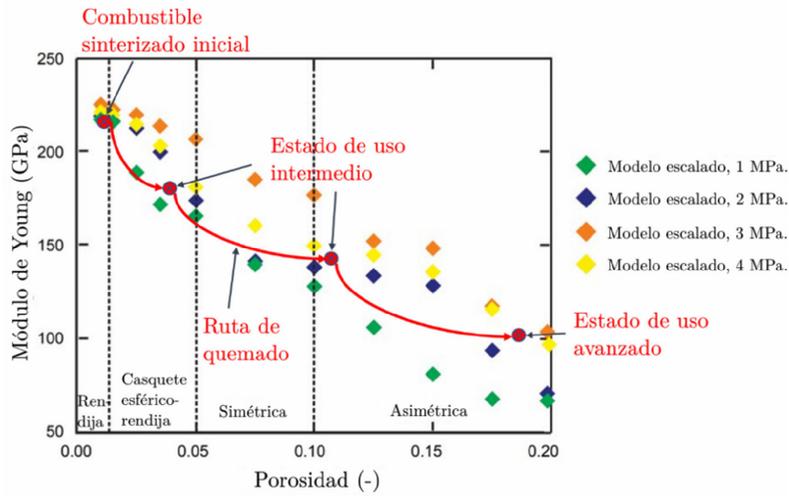


Figura 11.8. Módulo de Young escalado y ruta de quemado del UO_2 .

pastilla de combustible nuclear tiende a adquirir la propiedad mecánica del gas de fisión.

Por otro lado, en esta figura se indica la posible ruta de quemado que sigue un material combustible, donde el material sinterizado original tiene un valor de módulo de Young alto y una porosidad baja, y durante la operación del reactor el material fisionable sufre modificaciones de microestructura que alteran tanto la porosidad como el módulo de Young. Inicialmente, se espera que el combustible sinterizado original presente poca presión y porosidad (casi nula), a medida que avanza el quemado la porosidad eventualmente aumenta a medida que aparece el gas, y posteriormente la presión también aumenta. Un estado de uso avanzado puede estar representado por una mayor porosidad y presión del gas de fisión.

11.11. Validación

En la **Figura 11.9**, el módulo de Young escalado se compara con los resultados experimentales y de simulaciones. En comparación con los datos experimentales de Cappia *et al.* (2016) y Laux *et al.* (2012), el comportamiento entre 0.035 y 0.15 de porosidad es similar y los valores ampliados presentan el mismo orden de magnitud. Por ejemplo, el modelo ampliado a 3 [MPa] es más cercano que los

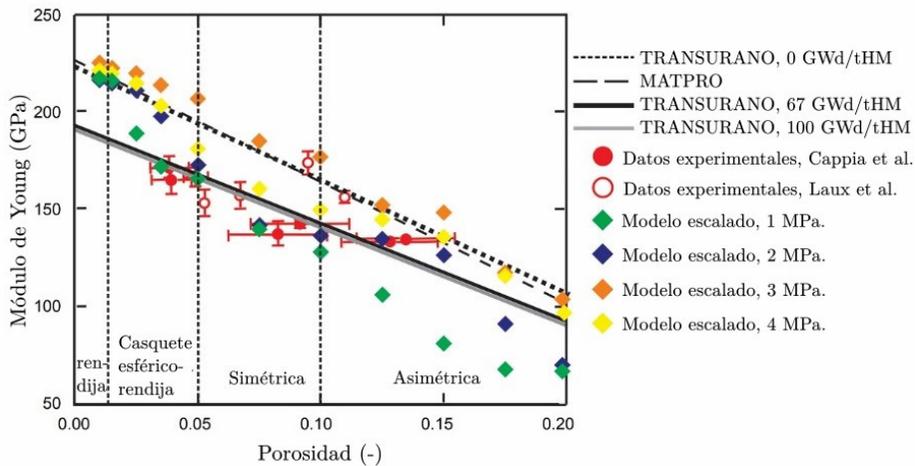


Figura 11.9. Comparación con datos experimentales y simulaciones.

datos experimentales. Por otro lado, para valores más cercanos a 0.15 de porosidad, el modelo ampliado a 4 [MPa] se ajusta bien a los datos experimentales.

De acuerdo con la comparación anterior, es posible validar las predicciones numéricas del módulo de Young escalado, que considera la información termomecánica de la fase gaseosa y sólida para diferentes presiones y porosidades. Es importante notar que el modelo escalado considera implícitamente el quemado del combustible, en el sentido de que el estado se captura a través de la modificación de la microestructura (mayor porosidad) y un aumento de la presión del gas. En general, el comportamiento indica que para una presión dada el módulo de Young disminuye con el aumento de la porosidad, y para una porosidad dada el módulo de Young aumenta con el aumento de la presión. Entonces, de acuerdo con los resultados obtenidos y las comparaciones con los datos de quemado del combustible, se puede inferir en general que la presión aumenta con el quemado. Por lo tanto, indirectamente se puede entender que el efecto de quemado está incluido para resultados de alta presión y porosidad.

11.12. Correlación empírica

Una vez calculado el módulo de Young a diferentes presiones y porosidades, ajustamos los resultados a una correlación empírica:

$$E[\text{GPa}] = -9719.57 \cdot \exp \left[-0.5 \left(\frac{\varepsilon_g - 0.2618}{0.1997} \right)^2 - 0.5 \left(\frac{P_g [\text{MPa}] - 113.96}{43.22} \right)^2 \right] + 355.64 \quad (11.34)$$

con un coeficiente de correlación $R^2 = 0.94074$. Esta correlación se puede aplicar en un código de rendimiento de combustible para tener una aproximación del módulo de Young. La ecuación anterior se ha desarrollado para el rango: $0.001 \leq \varepsilon_g \leq 0.2$, $1.0 \leq P_g [\text{MPa}] \leq 4.0$ y $817.31 [\text{K}]$.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Bibliografía principal

Aguilar-Madera, C.G, Espinosa-Paredes, G., & Molina-Espinosa L. (2019). Time-dependent neutron diffusion coefficient for the effective diffusion equation. *Progress in Nuclear Energy*, 112, 20-30.

<https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2018.12.003>

Blanchet, D., Buiron, L., Nicolas, S., Kim, T., & Taiwo, T. (2017). *AEN WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions* (version 1.5 revision 10). OECD Nuclear Energy Agency.

Cappia, F., Pizzocri, D., Marchetti, M., Schubert, A., Van Uffelen, P., Luzzi, L., *et al.* (2016). Microhardness and Young's modulus of high burn-up UO₂ fuel. *Journal of Nuclear Material*, 479, 447-454.

<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.07.015>

Davit, Y., Bell, C.G., Byrne, H.M., Chapman, L.A., Kimpton, L.S., Lang, G.E. *et al.* (2013). Homogenization via formal multiscale asymptotics and volume averaging: How do the two techniques compare? *Advances in Water Resource*, 62, 178-206. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2013.09.006>

Daher, D.H., Kotb, M., Khalaf, A.M., El-Koliel, M.S., & Soliman A.Y. (2020). Simulation of a molten salt fast reactor using the COMSOL Multiphysics software. *Nuclear Science and Techniques*, 31, 1-19.

<https://doi.org/10.1007/s41365-020-00833-3>

- del-Valle-Gallegos, E., Lopez-Solis, R., Arriaga-Ramirez, L., Gomez-Torres, A., & Puente-Espel, F. (2018). Verification of the multi-group diffusion code AZNHEX using the OECD/NEA UAM Sodium Fast Reactor Benchmark. *Annals of Nuclear Energy*, 114, 592-602.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.12.062>
- Encyclopædia Britannica (2021). Schematic diagram of a nuclear power plant using a pool-type sodium-cooled liquid-metal reactor. *Encyclopædia Britannica Publisher*. www.britannica.com/technology/sodium-cooled-fast-reactor#/media/1/552188/177377. Access Date April 5th 2021
- Espinosa-Paredes, G., & Aguilar-Madera, C.G. (2018). Scaled neutron point kinetics (SUNPK) equations for nuclear reactor dynamics: 2D approximation. *Annals of Nuclear Energy*, 115, 377-386.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2018.01.020>
- Espinosa-Paredes, G., & Pérez Valseca, A.-D. (2024). *Modelado integral de reactores nucleares: Enfoque conceptual*. Charleston, USA: OmniaScience.
<https://doi.org/10.3926/oss.40>
- Facchini, A., Giusti, V., Ciolini, R., Tucek, K., Thomas, D., & D'Agata, E. (2017). Detailed neutronic study of the power evolution for the European Sodium Fast Reactor during a positive insertion of reactivity. *Nuclear Engineering and Design*, 313, 1-9.
<https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2016.11.014>
- Heizler, S.I. (2010). Asymptotic Telegrapher's equation (P1) approximation for the transport equation. *Nuclear Science and Engineering*, 166, 17-35.
<https://doi.org/10.13182/NSE09-77>
- Hu, S., Henager, Jr.C.H., Heinisch, H.L., Stan, M., Baskes, M.I., & Valone, S.M. (2009). Phase-field modeling of gas bubbles and thermal conductivity evolution in nuclear fuels. *Journal of Nuclear Materials*, 392, 292-300.
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.03.017>
- Huo, X. (2019). *Technical Specifications for Neutronics Benchmark of CEFr Start-up Tests*. LAEA CRP-I31032. China Institute of Atomic Energy. Report KY-IAEA-CEFRCP-001.

- Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., & Kaltiaisenaho, T. (2015). The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, 82, 142-150.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.024>
- Manman, C., Yun, G., & Zhijian, Z. (2013). Transient simulation code development of primary coolant system of Chinese Experimental Fast Reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 53, 158-169.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2012.09.022>
- Manzel, R., & Walker, C.T. (2002). EPMA and SEM of fuel samples from PWR rods with an average burn-up of around 100 MWd/kgHM. *Journal of Nuclear Material*, 301, 170-182.
[https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(01\)00753-X](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(01)00753-X)
- Rest, J., Cooper, M.W.D., Spino, J., Turnbull, J.A., Van Uffelen, P., & Walker, C.T. (2019). Fission gas release from UO₂ nuclear fuel: a review. *Journal of Nuclear Materials*, 513, 310-345.
<https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2018.08.019>
- Santamarina, A., Bernard, D., Blaise, P., Coste, M., Courcelle, A., Huynh, T.D. *et al.* (2009). The JEFF-3.1. 1 nuclear data library. *JEFF Report*, 22(10.2), 2.
- Rimpault, G., Buiron, L., Stauff, N.E., Kim, T.K., Taiwo, T.A., Lee, Y.K. *et al.* (2017). Objectives and Status of the OECD/NEA sub-group on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs (SFR-UAM). *Proceedings of the International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17)*. Yekaterinburg, Russia.
- Todreas, N.E., & Kazimi, M.S. (1990). *Nuclear Systems I: Thermal Hydraulic Fundamentals*. USA: Hemisphere Publishing Corporation.
- Waltar, A.E., Todd, D.R., & Tsvetkov P.V. (Eds.). (2011). *Fast spectrum reactors*. Springer Science & Business Media. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-9572-8>
- Wallis, G.B. (1969). *One-dimensional two-phase flow*. USA: McGraw-Hill Book Company.

White, R.J. (1994). A new mechanistic model for the calculation of fission gas release. In *Proceedings of the International Topical Meeting on Light Water Reactor Fuel Performance*. West Palm Beach, Florida, USA.

Wu, Y. W., Li, X., Yu, X., Qiu, S.Z., Su, G.H., & Tian W.X. (2013). Subchannel thermal-hydraulic analysis of the fuel assembly for liquid sodium cooled fast reactor. *Progress in Nuclear Energy*, 68, 65-78.
<https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2013.05.001>

Bibliografía complementaria

D'Auria, F., Reventos, F., Herranz, L., Sanchez Perea, M., Alberola, S.C., Freixa, J. *et al.* (2024). What is the future for nuclear fission technology? A technical opinion from the Guest Editors of VSI NFT series and the Editor of the Journal Nuclear Engineering and Design. *Nuclear Engineering and Design*, 425, 113332.

Espinosa-Paredes, G., François, J.L., Alonso, G., & Castillo, A. (2024). Preface for special issue NFT-17: MX & CU & VE nuclear fission technology in Mexico, Cuba and Venezuela (+ Central America). *Nuclear Engineering and Design*, 420, 113024.
<https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2024.113024>

Espinosa-Paredes G., & Vázquez Rodríguez, R. (2016). *Física de reactores nucleares I: Un enfoque conceptual*. Barcelona, Spain: OmniaScience.
<https://doi.org/10.3926/oss.27>

Howes, F. A., & Whitaker, S. (1985). The spatial averaging theorem revisited. *Chemical Engineering Science*, 40, 1387-1392.
[https://doi.org/10.1016/0009-2509\(85\)80078-6](https://doi.org/10.1016/0009-2509(85)80078-6)

Jo, Y., Dos, V., Mai, N.N.T., Lee, H., & Lee, D. (2021). Uncertainty Analysis of Sub-Exercises in UAM-SFR Benchmark with The MCS Code. In *EPJ Web of Conferences* (247, 15017). EDP Sciences.
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202124715017>

Nikitin, E., Fridman, E., & Mikityuk, K. (2015). Solution of the OECD/NEA neutronic SFR benchmark with Serpent-DYN3D and Serpent-PARCS code systems. *Annals of Nuclear Energy*, 75, 492-497.
<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.054>

Nouri-Borujerdi, A., & Ghomsheh, S.T. (2015). An improved porous media approach to thermal-hydraulics analysis of high-temperature gas-cooled reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 76, 485-492.

<https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.10.006>

Sanchez, V., Imke, U., Ivanov, A., & Gomez, R. (2010). *SUBCHANFLOW: A thermal hydraulic sub-channel program to analyse fuel rod bundles and reactor cores*. International Nuclear Information System.

https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:42014585

ACRÓNIMOS

ABWR	Advanced Boiling Water Reactor
CEFR	China Experimental Fast Reactor
CFD	Computational Fluid Dynamics
CIAE	China Institute of Atomic Energy
CONAHCyT	Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnología
CNRS	Centre National de la Recherche Scientifique
OIEA	Organismo Internacional de Energía Atómica
LMFR	Liquid Metal – cooled Fast Reactor
MSR	Molten Salt Reactor
SFR	Sodium-cooled Fast Reactor
SND	Simulación Numérica Directa
TRISO	Tri-Structural Isotropic
UTOP	Unprotected-Transient Over Power

NOMENCLATURA

Símbolos latinos

A_{fm}	área interfacial fluido-combustible [m ²]
$a_v h$	coeficiente escalado de transferencia de calor interfacial [(W/m ² K)/m]
$a_v \kappa$	difusión de neutrones interfacial [cm ⁻¹]
\mathbf{b}_{1s}	coeficiente vectorial de la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ asociado con $\nabla \langle \mathbf{u}_s \rangle^s$
\mathbf{b}_{2s}	coeficiente vectorial de la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ asociado con $\nabla \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle^s$
$\mathbf{b}_{\gamma\gamma}$	coeficiente vectorial de la solución de \tilde{T}_γ para fase- γ ($\gamma = f, m$), asociado con la fuente $\nabla \langle T_\gamma \rangle^\gamma$ [m ⁻¹]
C	concentración de precursores de neutrones diferidos [m ⁻³]
Cp	calor específico [J/kgK]
c	albedo [-]
\mathbf{D}_{eff}	coeficiente tensorial escalado de difusión de neutrones [cm]
\mathbf{d}	coeficiente vectorial de la solución de $\tilde{\phi}$ asociado con $\nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$
E	módulo de Young escalado [Pa]
\mathbf{E}	coeficiente tensorial de elasticidad [Pa]
\mathbf{I}	tensor identidad [-]
$\mathbf{K}_{\gamma\gamma}$	tensor escalado de transferencia de calor para la fase- γ [W/mK]
k	conductividad térmica [W/mK]
L_a	longitud característica del ensemble de combustible o núcleo del reactor [m]
ℓ	longitud característica de la escala local (<i>e.g.</i> , un <i>pin</i> , una burbuja) [m]
l_{cell}	longitud de la celda representativa [m]
\mathbf{n}_{fm}	vector normal unitario [-]
q'''	densidad de potencia [W/m ³]
S	coeficiente de la solución de $\tilde{\mathbf{u}}_s$ asociado con $\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$

s_f	coeficiente de solución de las desviaciones espaciales asociada con el término fuente $\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f$ [-]
\mathbf{s}	coeficiente vectorial de elasticidad interfacial [Pa/m]
T	temperatura [K]
$\langle T_\gamma \rangle^\gamma$	temperatura intrínseca de la fase- γ ($\gamma = f, m$) [K]
\tilde{T}_γ	desviación espacial de la temperatura [K]
t	tiempo [s]
\mathbf{u}_s	vector de desplazamiento [m]
$\langle \mathbf{u}_s \rangle^s$	vector de desplazamiento intrínseco [m]
$\tilde{\mathbf{u}}_s$	vector de desviaciones espaciales del desplazamiento [m]
$\mathbf{u}_{\gamma\gamma}$	coeficiente escalado conductive-convectivo de la fase- γ [W/m ² K]
V	volumen representativo donde se aplican los operadores integrales [m ³]
\mathbf{v}	vector velocidad [m/s]
$\langle \mathbf{v}_\gamma \rangle^\gamma$	velocidad intrínseca [m/s]
$\tilde{\mathbf{v}}_m$	desviaciones espaciales e la velocidad [m/s]

Símbolos griegos

α	coeficiente de reactividad [pcm/K]
β	fracción de neutrones diferidos [-]
ε	fracción volumen [-]
λ	constante de decaimiento [1/s]
Λ	tiempo medio de generación de neutrones [s]
ν	neutrones emitidos por fisión [-]
ρ	densidad [k/gm ³] / reactividad [pcm]
Σ_a	sección eficaz macroscópica de absorción [1/cm]
Σ_f	sección eficaz macroscópica de fisión [1/cm]
Σ_{tr}	sección eficaz de transporte [1/cm]
Φ	número adimensional de difusión de neutrones [-]
ϕ	flujo neutrónico [nvs]
$\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma$	flujo neutrónico intrínseco [nvs]
$\tilde{\phi}$	desviaciones espaciales del flujo neutrónico [nvs]
ζ	coeficiente vectorial de la solución de $\tilde{\phi}$ asociado con $\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - \phi_\sigma$
τ	tiempo adimensional
ν_n	velocidad del neutrón [cm/s]

Sub/super-índices

<i>c</i>	encamisado
<i>e</i>	entrada
<i>E</i>	expansión
<i>ef</i>	equivalente a la pseudoregión
<i>f</i>	combustible
<i>g</i>	holgura o gap
<i>ℓ</i>	líquido
<i>r</i>	refrigerante
0	referencia inicial



GILBERTO ESPINOSA-PAREDES (Cd. de México, 1961) estudió el doctorado en la Universidad Autónoma Metropolitana. En 1998 publicó sus primeros 3 artículos científicos en *I. J. for Numerical Methods in Fluids, Computers & Geosciences*, y *Transport in Porous Media*. Desde entonces ha publicado 225 en más de 30 revistas científicas, entre ellas *Annals of Nuclear Energy*, *Progress in Nuclear Energy*, *Nuclear Engineering and Design*, *Nuclear Science and Engineering*, *Applied Mathematical Modelling*, *Computer Physics and Communications*, *Physica A*, *I. J. of Hydrogen Energy*, *J. of Chemical Physics*, *Chaos, Solitons and Fractals*. Obtuvo el Premio Best Paper Award en International Meeting on Nuclear Thermal Hydraulics Operation and Safety por *Towards a Stability Monitor in Laguna Verde Nuclear Power Plant Based on the Empirical Mode Decomposition* (2014). En 2012 como Editor Invitado publicó el número especial *Severe Accident Analysis in Nuclear Power Plants* en *Science and Technology of Nuclear Installations*. Editor invitado de *Nuclear Engineering and Design* (2023 y 2024). Editor en Jefe de *Research Journal* y *International Journal of Nuclear Safety Security*. Es editor asociado en diferentes revistas científicas. Ha publicado los libros *Física de Reactores Nucleares* (OmniaScience, 2016), *Aplicaciones de Programación no Lineal* (OmniaScience, 2016), *Linear and Non-linear Stability Analysis in Boiling Water Reactors* (Elsevier, 2019), *Fractional-Order Models for Nuclear Reactor Analysis* (Elsevier, 2021), *Termodinámica con Enfoque a la Ingeniería en Energía* (Ciencias, 2021), *Exergía en Sistemas Energéticos* (OmniaScience, 2023), entre otros. En formación de recursos humanos, ha dirigido 30 tesis de posgrado. Desde el 2015 es investigador Nacional Nivel 3 del Sistema Nacional de Investigadores del Consejo Nacional de Humanidades Ciencias y Tecnologías. Miembro de la Academia de Ingeniería de México, Academia Mexicana de Ciencias, y Sociedad Nuclear Mexicana.



En esta obra se presenta un nuevo paradigma para el modelado matemático de reactores nucleares, basado en un enfoque de escalamiento que parte de la escala del *continuum* y extiende el análisis hasta la escala completa del reactor. Este proceso de escalamiento del problema directo permite obtener coeficientes de transporte representativos de la escala del reactor, incorporando los efectos de las propiedades de transporte propias de la escala del *continuum*.

El escalamiento del reactor constituye un procedimiento matemático riguroso que puede derivar en modelos de flujos separados, con coeficientes de transporte específicos para cada escala. Estos coeficientes se obtienen mediante un formalismo matemático complejo que representa un desafío técnico, pero que ofrece la ventaja de posibilitar el desarrollo de correlaciones empíricas para aplicaciones prácticas directas.

El resultado final es un modelo matemático capaz de representar con precisión el comportamiento global del reactor, manteniendo un alto grado de resolución. Además, para incrementar el nivel de detalle en análisis específicos dentro del reactor, se propone un método heurístico de reducción de escala. Este enfoque utiliza información derivada de escalas mayores, comenzando a nivel de núcleo del reactor y avanzando hasta el ensamblaje de combustible, permitiendo un análisis detallado de elementos individuales, como un *pin* de combustible.

OmniaScience

ISBN 978-84-128130-6-7



9 788412 813067 >