

Metodología en la implementación de la cinética en el código de transporte AZTRAN

Julian A. Duran Gonzalez¹, Edmundo del Valle Gallegos¹, Armando M. Gómez Torres²

¹Departamento de Física, ESFM-IPN, México D.F., México

²Gerencia de Ciencias Aplicadas, ININ, La Marquesa Ocoyoacac, México

E-mail: redfield1290@gmail.com

Resumen —AZTLAN es una plataforma que se desarrolla en el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) en colaboración con Instituto Politécnico Nacional (IPN) y otras instituciones para el análisis y diseño de reactores nucleares. En el proyecto AZTLAN se encuentra en desarrollo el código de transporte AZTRAN, que por el momento es un código que resuelve la ecuación de transporte de neutrones, en estado estacionario, geometría XYZ y varios grupos de energía usando el método de ordenadas discretas S_n para la discretización de la variable angular y el método nodal RTN-0 para la discretización espacial. Las aportaciones que se hicieron al código de transporte AZTRAN consisten en la implementación de la dependencia en tiempo incluyendo las ecuaciones correspondientes a las concentraciones de precursores de neutrones retardados. Para esto se aplicó el método implícito para la integración de las ecuaciones diferenciales correspondientes al flujo angular y de los precursores de neutrones retardados partiendo de las condiciones iniciales obtenidas con la versión estática. Se describe la implementación realizada al código AZTRAN y se incluyen los resultados obtenidos para un problema de referencia.

Palabras Clave – AZTLAN, AZTRAN, ecuación de transporte, ordenadas discretas, RTN-0.

Abstract — AZTLAN is a platform developed in the Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ) in collaboration with Instituto Politécnico Nacional (IPN) and other institutes for the analysis and design for nuclear reactors. In the AZTLAN project is developing the transport code AZTRAN, which for the moment is a code that solves the Neutron Transport Equation, in stationary state, XYZ geometry, and many groups of energy using the discrete ordinates method S_n for the discretization of the angular variable and the nodal method RTN-0 for the special discretization. The contributions made to the code of transport AZTRAN consist in the implementation of the time dependency including the correspondent equations to the concentrations of precursors of delayed neutrons. For this, an implicit method was applied for the integration of the differential equations correspondent to the angular flux and the precursors of the delayed neutrons parting from the initially obtained conditions with the static version. The project describes the implementation realized in AZTRAN and the obtained results are included for a reference problem.

Keywords – AZTLAN, AZTRAN, neutron transport equation, ordinates discrete, RTN-0.

I. INTRODUCCIÓN

AZTLAN es una plataforma mexicana para el análisis y diseño de reactores nucleares liderada por el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, que reúne a las principales casas públicas de estudios superiores como el Instituto Politécnico Nacional entre otras instituciones. En un esfuerzo para dar un paso significativo rumbo a la autonomía de cálculo y análisis de reactores nucleares, se pretende modernizar, mejorar e integrar los códigos neutrónicos y termo hidráulicos desarrollados por expertos mexicanos para beneficio de las instituciones mexicanas. Es por parte del proyecto AZTLAN que surge la necesidad de implementar mejoras a sus códigos neutrónicos como es el caso del código AZTRAN que resolvía la ecuación de transporte en estado estacionario en geometría XYZ para varios grupos de energía usando la técnica de ordenadas discretas y usando el método nodal RTN-0 para discretizar la parte espacial, y que parte como de este trabajo se implementó la dependencia en tiempo aplicando el método implícito para la integración de las ecuaciones diferenciales correspondientes al flujo angular y se acoplaron las ecuaciones de precursores de neutrones retardados a los cuales se les aplico el método implícito también.

II. METODOLOGÍA

Implementación de la cinética a la ecuación de transporte

Se considera la ecuación de transporte dependiente del tiempo considerando neutrones retardados que tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \\ & -\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \\ & + \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, E' \rightarrow E, t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) + \\ & (1-\beta) \chi_p(E) \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) \\ & + \chi_d(E) \sum_{i=1}^I \lambda_i C_i(\vec{r}, t) + q_e(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} C_i(\vec{r}, t) = \\ & -\lambda_i C_i + \beta_i \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) \\ & i = 1, \dots, I \end{aligned} \quad (2)$$

El significado físico de cada parámetro se muestra a continuación:

- ψ = flujo angular de neutrones,
- v = velocidad del neutrón,
- I = número de grupos de neutrones retardados,
- t = tiempo,
- Σ_t = sección eficaz total macroscópica,
- Σ_s = sección eficaz de dispersión macroscópica,
- χ_p = espectro de energía para neutrones inmediatos,
- χ_d^i = espectro de energía para neutrones retardados del grupo i ,
- λ_i = constantes de decaimiento del precursor del grupo i ,
- C_i = concentración de precursores del grupo i ,
- β_i = fracción de neutrones retardados del grupo i ,
- q_e = término de fuente externa.

El esquema que se implementó para la integración de la ecuación de transporte y de los precursores fue el método implícito que es un método incondicionalmente estable.

Denotemos t_k como el tiempo, sea A un operador algebraico que representa la ecuación de transporte y sea Z el flujo angular o la concentración de precursores del grupo I , el método implícito se puede describir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} Z(t) = \frac{Z^{t_{k+1}} - Z^{t_k}}{\Delta t_k} = A^{t_{k+1}} Z^{t_{k+1}}, \quad (3)$$

donde

$$\Delta t_k = t_{k+1} - t_k. \quad (4)$$

Después de aplicar la ecuación (3) en (1) se obtiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} & \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \\ & + \left[\Sigma_t^{t_{k+1}}(\vec{r}, E) + \frac{1}{v \Delta t_k} \right] \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \\ & + \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, E' \rightarrow E) \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') \\ & + \left[\chi_p(1-\beta) + \sum_{i=1}^I \chi_d^i \beta_i \frac{\lambda_i \Delta t_k}{1 + \lambda_i \Delta t_k} \right] \\ & \times \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v \Sigma_f^{t_{k+1}}(\vec{r}, E') \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') \\ & + \sum_{i=1}^I \chi_d^i \frac{\lambda_i}{1 + \lambda_i \Delta t_k} C^{t_k}(\vec{r}) \\ & + \frac{1}{v \Delta t_k} \psi^{t_k}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) + q_e(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \end{aligned} \quad (5)$$

Análogamente se aplica la ecuación (3) en (2) y se obtiene:

$$\begin{aligned} C^{t_{k+1}}(\vec{r}) &= \frac{\beta_i \Delta t_k}{1 + \lambda_i \Delta t_k} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v \Sigma_f^{t_{k+1}}(\vec{r}, E') \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') \\ & + \frac{1}{1 + \lambda_i \Delta t_k} C^{t_k}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (6)$$

Redefiniendo las siguientes variables:

$$\begin{aligned} \Sigma_t^*(\vec{r}, E) &= \Sigma_t^{t_{k+1}}(\vec{r}, E) + \frac{1}{v\Delta t_k} \\ \chi_p^* &= \left[\chi_p (1-\beta) + \sum_{i=1}^I \chi_d^i \beta_i \frac{\lambda_i \Delta t_k}{1 + \lambda_i \Delta t_k} \right] \\ q_e^*(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) &= q_e(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) + \sum_{i=1}^I \chi_d^i \frac{\lambda_i}{1 + \lambda_i \Delta t_k} C^{t_k}(\vec{r}) \\ &+ \frac{1}{v\Delta t_k} \psi^{t_k}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (7)$$

La ecuación (5) se puede reescribir de la forma:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) + \Sigma_t^*(\vec{r}, E) \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) &= \\ + \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, E' \rightarrow E) \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') & \\ + \chi_p^* \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v \Sigma_f^{t_{k+1}}(\vec{r}, E') \psi^{t_{k+1}}(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') & \\ + q_e^*(\vec{r}, \hat{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (8)$$

Se puede ver de las ecuaciones (6) y (7) que si son conocidas ψ^{t_k} y C^{t_k} entonces (8) puede ser resuelta. Antes de comenzar a resolver el problema con dependencia en tiempo por condiciones iniciales se conocen $\psi^{(0)}$ y $C^{(0)}$ entonces la solución para todo el dominio del tiempo es posible.

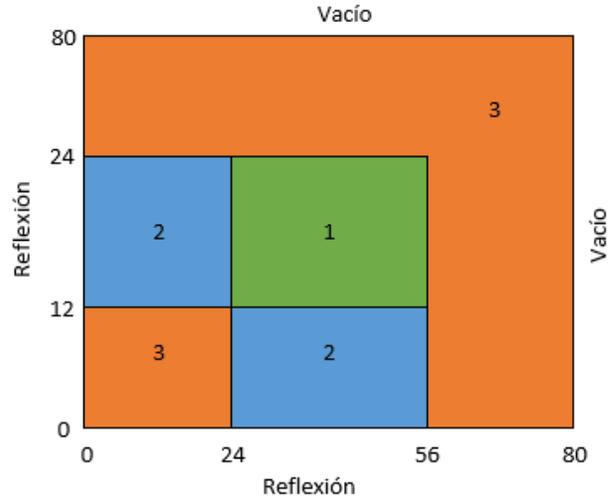
Para discretizar las otras variables dependientes del flujo angular se utilizan la técnica de multigrupos para la energía, la variable espacial es tratada con el método nodal RTN-0[6] y para la variable angular se utiliza el método de ordenadas discretas. Este último es aplicado por varios códigos; por ejemplo TD-TORT [3], DORT-TD [1], ARES [2]. La metodología de este trabajo está basado en la implementación de la dependencia en tiempo de AZTRAN.

III. RESULTADOS

AZTRAN tuvo que ser comparado con problemas de referencia encontrados en la literatura, para este trabajo se presentan dos problemas con dependencia en tiempo, un problema en dos dimensiones llamado TWIGL y un problema propuesto en tres dimensiones.

A. TWIGL

TWIGL es un problema con dependencia en tiempo en dos dimensiones basado en la teoría de difusión, este modelo de reactor está constituido por tres materiales donde el material físil ocupa la región uno y dos mientras la región tres es un cobertor que también contiene material físil, la geometría del reactor se muestra a continuación:



Nota: Todas las dimensiones están en cm

Fig. 1 Configuración del reactor TWIGL

En la región uno es donde se simula la inserción de reactividad, para este problema se considera dos tipos de perturbación, una tipo escalón que se introduce en las secciones macroscópicas total y de dispersión en el grupo térmico por una cantidad 0.0034 al tiempo 0.0 seg. La otra perturbación es tipo rampa y se hace lo mismo para las secciones eficaces, el tiempo de este transitorio es de 0.0 seg a 0.2 seg, el tiempo total de ambos transitorios es de 0.5 seg.

A continuación se muestra el cambio en las secciones eficaces:

En la composición 1,

$$\text{escalón: } \Delta \Sigma_{t_2} = -0.0034 \text{ cm}^{-1}; t = 0 \text{ seg}$$

$$\Delta \Sigma_s^{2 \rightarrow 2} = -0.0034 \text{ cm}^{-1}; t = 0 \text{ seg}$$

rampa:

$$\Sigma_{t_2}(t) = \begin{cases} \Sigma_{t_2}(0) \{1 - 0.11667t\}; & t \leq 0.2 \text{ seg} \\ \Sigma_{t_2}(0) \{0.97666\}; & t \geq 0.2 \text{ seg} \end{cases}$$

$$\Sigma_s^{2 \rightarrow 2}(t) = \begin{cases} \Sigma_s^{2 \rightarrow 2}(0) \{1 - 0.11667t\}; & t \leq 0.2 \text{ seg} \\ \Sigma_s^{2 \rightarrow 2}(0) \{0.97666\}; & t \geq 0.2 \text{ seg} \end{cases}$$

A continuación se muestran las secciones eficaces de los materiales del TWIGL y sus parámetros cinéticos:

TABLA I.
Secciones eficaces iniciales para el TWIGL (cm⁻¹)

zona	Grupo g	Σ_t^g	$\Sigma_s^{g \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g'}$	$\nu \Sigma_f^g$
1	1	0.2481	0.2281	0.01	0.007
	2	0.9833	0.8333	0.0	0.2
2	1	0.2481	0.2281	0.01	0.007
	2	0.9833	0.8333	0.0	0.2
3	1	0.2644	0.2464	0.1	0.003
	2	0.7167	0.6667	0.0	0.006

TABLA II.
Datos cinéticos para el problema TWIGL

Parámetro	β_1	λ_1 (s ⁻¹)	v_1 (cm/s)	v_2 (cm/s)
Valor	0.0075	0.08	1×10^7	2×10^5

Este problema resuelto por AZTRAN es comparado con el código de transporte ARES [2], este código resuelve la ecuación de transporte dependiente del tiempo usando la técnica de multigrupos, ordenadas discretas y diferencias finitas para la parte espacial, los siguientes resultados son la comparación de la potencia normalizada contra el tiempo de AZTRAN vs ARES para ambas inserciones de reactividad usando la aproximación S_4 .

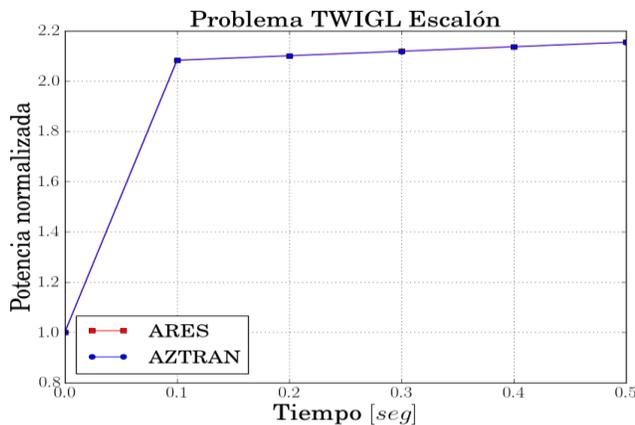


Fig. 2 Potencia normalizada vs tiempo TWIGL (escalón)

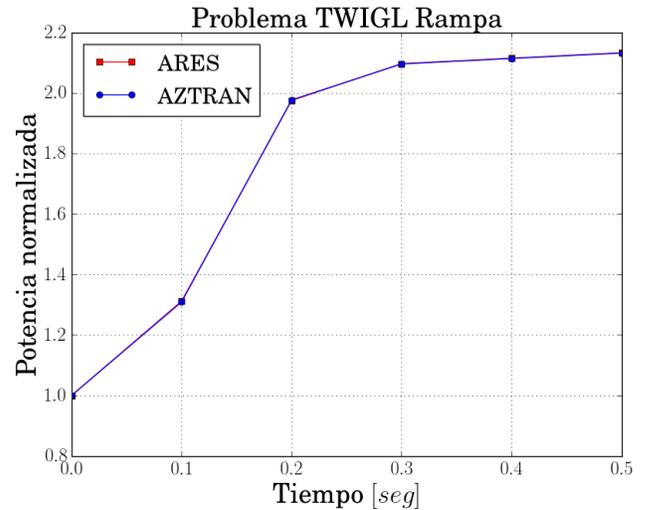


Fig. 3 Potencia normalizada vs tiempo TWIGL (rampa)

B. Problema 3D

En la referencia [5] se encontró el siguiente problema Benchmark en 3 dimensiones, el modelo que se resolvió es un pequeño reactor de agua ligera, este núcleo es un modelo de la universidad de Kyoto, la referencia de la malla es 1cmx1cmx1cm, y está constituido por 2 grupos de energía y tres materiales. Se consideraron 2 casos a resolver en estado estacionario, en el primer caso la posición que ocupa la barra de control está vacía y en el segundo caso la barra de control está completamente insertada, a continuación se muestra la geometría del reactor para ambos casos.

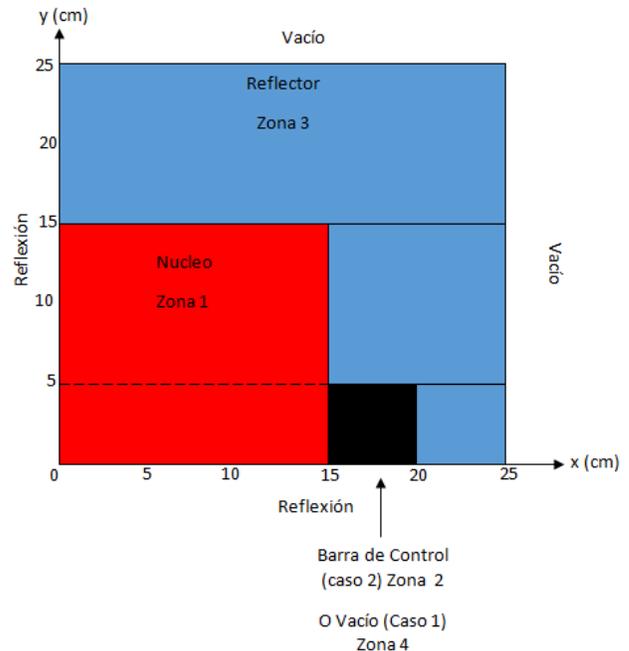


Fig. 4 Configuración reactor 3D radialmente

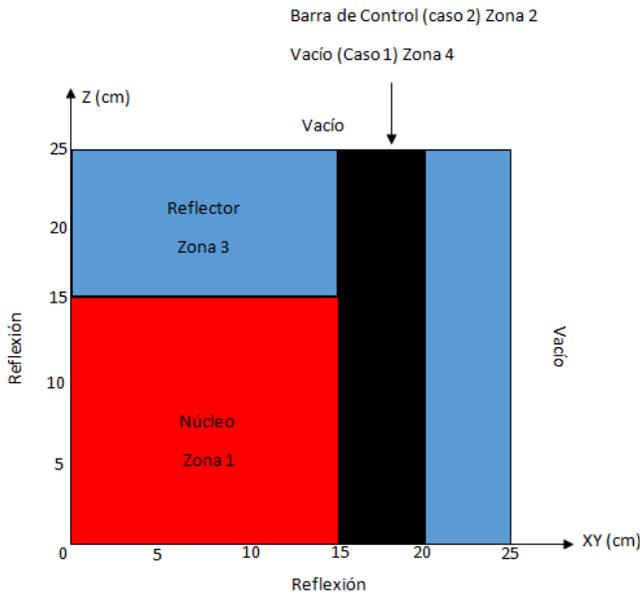


Fig. 5 Configuración reactor 3D axialmente

Para ambos casos se resolvió el problema en estado estacionario sirviendo estos problemas de referencia para verificar la eficiencia del estado estacionario, a continuación se muestra la tabla de las secciones eficaces y de los resultados obtenidos.

TABLA III.
Secciones eficaces iniciales para el TWIGL (cm⁻¹)

Zona	Grupo g	Σ_t^g	$\Sigma_s^{g \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{g \rightarrow g'}$	$\nu \Sigma_f^g$
1	1	0.22377	0.19242	0.02282	0.00909
	2	1.03864	0.88043	0.0	0.29018
2	1	0.08523	0.06772	0.00006	0.0
	2	0.21746	0.03523	0.0	0.0
3	1	0.25036	0.19344	0.05650	0.0
	2	1.64482	1.62452	0.0	0.0
4	1	0.01284	0.01277	0.00002	0.0
	2	0.01206	0.01073	0.0	0.0

TABLA IV

Comparación del factor de multiplicación efectivo caso 3D estático sin Barra de Control

Malla	S_4	Diferencia (pcm)	S_8	Diferencia (pcm)
AZTRAN				
10x10x10	0.97858	258	0.97856	139
15x15x15	0.97712	53	0.97660	61
25x25x25	0.97642	18	0.97695	26
Buckel	0.97668	---	0.97713	---
Alcouffe	0.97670	---	0.97714	---
Takeda	0.97669	---	0.97713	---
Promedio	0.9766	---	0.9772	---

TABLA V

Comparación del factor de multiplicación efectivo caso 3D estático con Barra de Control

Malla	S_4	Diferencia (pcm)	S_8	Diferencia (pcm)
AZTRAN				
10x10x10	0.96479	269	0.96449	228
15x15x15	0.96285	65	0.96331	105
25x25x25	0.96188	33	0.96204	27
Buckel	0.96231	---	0.96231	---
Alcouffe	0.96236	---	0.96236	---
Takeda	0.96232	---	0.96229	---
Promedio	0.9622	---	0.9623	---

En la literatura por el momento no se encuentra un problema referencia de transporte con dependencia en tiempo, es por esto que se propuso usar este problema Benchmark y proponer dos problemas con dependencia en tiempo, el primer problema es con la barra de control completamente insertada al tiempo 0.0 seg y es extraída parcialmente esto implica un aumento de la potencia y después al tiempo 0.005 seg es insertada completamente por lo que la potencia baja hasta volverse estable, se muestra a continuación la potencia normalizada vs tiempo del problema 1.

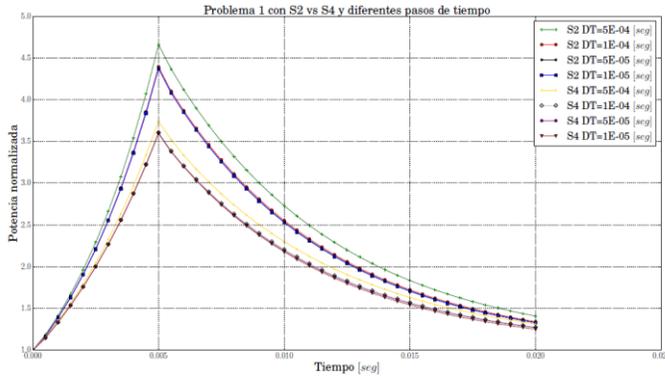


Fig. 6 Potencia normalizada vs tiempo

El segundo problema que se consideró fue que en vez de haber una barra de control la posición está vacía, al tiempo 0.0 seg es insertada parcialmente una barra de control y esto produce que la potencia disminuya, al tiempo 0.005 seg la barra es completamente extraída por lo que la potencia vuelve a aumentar, se muestra a continuación la potencia normalizada vs tiempo del problema 2.

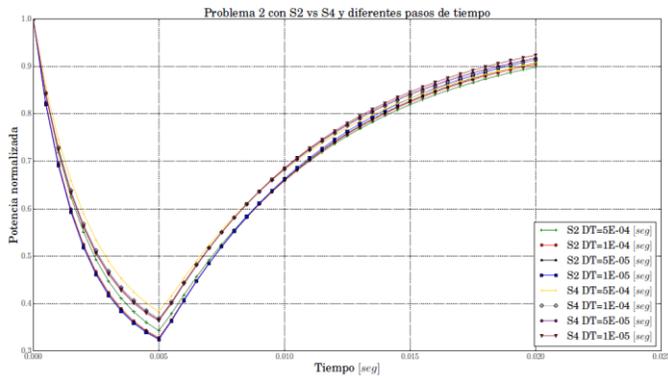


Fig. 7 Potencia normalizada vs tiempo

IV. DISCUSIÓN

En el problema TWIGL se puede observar que se obtienen resultados muy buenos comparados con el código ARES, y esto era de esperarse ya que el código ARES comparte con AZTRAN las mismas técnicas para resolver la ecuación de transporte dependiente del tiempo salvo la parte espacial que usa diferencias finitas y AZTRAN usa el método nodal RTN-0, este problema permite verificar un problema dependiente del tiempo en dos dimensiones y asegurar que AZTRAN puede resolver cualquier problema dependiente del tiempo en dos dimensiones.

Respecto al problema en tres dimensiones se puede concluir dos cosas: en el primero se pudo demostrar que AZTRAN al resolver la parte estacionaria obtiene resultados muy buenos y eso asegura que al resolver la dependencia en tiempo las condiciones iniciales son muy buenas, la segunda observación es que aunque este problema propuesto con

dependencia en tiempo no se pudo comparar cuantitativamente con otro código sí se puede observar un buen comportamiento físico sobre los problemas propuestos, así como la consistencia de AZTRAN para diferentes cuadraturas y pasos de tiempo.

V. CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos con AZTRAN para problemas con dependencia en tiempo tanto en dos como tres dimensiones se obtuvieron buenos resultados y no obstante que no se pudo comparar el problema en tres dimensiones con otro código sí se demostró el buen comportamiento y la consistencia de AZTRAN, esto permite que en un trabajo futuro se implementen técnicas de aceleración para reducir el tiempo de cómputo, y resolver otros problemas referencia para validar AZTRAN, esto llevará a que el código este a la altura de otros códigos como TD-TORT[3] y DORT-TD[1], y en un futuro próximo pueda ser acoplado termo hidráulicamente.

AGRADECIMIENTOS

Este proyecto es financiado por el fondo mixto SENER-CONACYT de Sustentabilidad Energética, proyecto estratégico No. 212602

J.A.D.G agradece el apoyo por parte del proyecto AZTLAN para la realización de este trabajo y a M. en C. Melisa Reyes Fuentes por su ayuda.

REFERENCIAS

- [1] Andreas Pautz and Adolf Birkhofer, "DORT-TD: A transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration", Nuclear Science and Engineering, Vol.145, no.3, pp. 299-319 (2003).
- [2] Shun Zhang, Bin Zhang, Penghe Zhang, "A Nuclear Reactor Transient Methodology Based on Discrete Ordinates Method", Hindawi Publishing Corporation, Science Technology of Nuclear Installations, Volume 2014 (2014) Article ID 491048, 9 pages.
- [3] S. Goluoglu and H. L. Dodds, "A Time-Dependent, Three-Dimensional Neutron Transport Methodology", Nuclear Science and Engineering, Vol.139, no.3, pp. 248-261 (2001).
- [4] T. E. HILL and W. M. REED, "TIMEX: A Time-Dependent Explicit Discrete Ordinates Program for the Solution of the Multigroup Transport Equation," LA-6201-MS, Los Alamos National Laboratories (1976).
- [5] Toshikazu Takeda and Hideaki Ikeda, "3-D Neutron Transport Benchmarks", NEACRP-L-330 (1991).
- [6] Jean-Pierre Hennart, Jérôme Jaffe and Jean Elizabeth Roberts, "A Constructive Method for Deriving Finite Elements of Nodal Type", Numerische Mathematik, Vol.53, pp.701-738 (1988)