Solución de la Ecuación de Transporte con Dispersión Anisotrópica en un Ensamble tipo BWR Usando el Código AZTRAN

Mario Chepe Pérez

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa San Rafael Atlixco 186, Vicentina, Iztapalapa, 09340 Ciudad de México, D.F. liaison.web@gmail.com

J. Vicente Xolocostli Munguía, Armando M. Gómez Torres

Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares Carr. México-Toluca s/n, La Marquesa, Ocoyoacac, México, C.P. 52750 vicente.xolocostli@inin.gob.mx; armando.gomez@inin.gob.mx

Edmundo del Valle Gallegos

Instituto Politécnico Nacional-Escuela Superior de Física y Matemáticas, Av IPN s/n, San Pedro Zacatenco, Ciudad de México, D.F., 07730, México edmundo.delvalle@gmail.com

Resumen

Debido al actual poder de cómputo que se tiene hoy día, los códigos determinísticos para analizar reactores nucleares que se han estado utilizando desde hace ya varios años están cobrando relevancia, ya que se puede hacer uso de técnicas de solución mucho más precisas, lo cual en el siglo pasado hubiese sido muy difícil, puesto que las capacidades de memoria y del procesador eran muy limitadas o se tenían altos precios en los componentes. En este trabajo se analiza el efecto de la dispersión anisotrópica de la sección eficaz de dispersión, en comparación con la dispersión isotrópica. La implementación de la anisotropía se realizó en el código de transporte **AZTRAN** (**AZ**tlan **TRAN**sport), el cual forma parte de la Plataforma **AZTLAN** para Análisis de Reactores Nucleares (en desarrollo). El código AZTRAN resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann en una, dos y tres dimensiones en estado estacionario, utilizando la técnica de multigrupos para la discretización en energía, el método nodal RTN-0 en la discretización espacial y para la discretización angular el método de ordenadas discretas sin considerar la anisotropía originalmente. Se analizó el efecto de la dispersión anisotrópica en el factor de multiplicación efectivo k_{eff} y la potencia axial y radial, en un ensamble combustible tipo BWR.

1. INTRODUCCIÓN

Cuando se diseña o analiza un reactor nuclear, es de vital importancia conocer la distribución del flujo neutrónico dentro del mismo, puesto que se relaciona directamente con la potencia del reactor. Para tal efecto, algunos códigos determinísticos al utilizar el método de ordenadas discretas o aproximación S_N para la discretización angular, lo simplifican, al no considerar la dispersión anisotrópica. Lo cual conllevaría a más tiempo de cálculo o el invertir en sistemas de cómputo mucho más potentes y más costosos, pero con la desventaja de tener resultados con un grado de exactitud menor que cuando se considera la dispersión anisotrópica. Ya sea para dispersión isotrópica o anisotrópica la aproximación S_N trata a la variable angular como un conjunto de rayos o direcciones angulares. Por lo tanto en la solución numérica de la ecuación de transporte es necesario considerar una gran cantidad de información para describir las dependencias en energía de las secciones eficaces, así como también en las dispersiones que son funciones del ángulo y de la energía de los neutrones antes y después de la interacción.

La anisotropía en las dispersiones, se deben principalmente a dos factores [1,2]:

- La distribución angular dentro del núcleo del reactor es altamente anisotrópica, careciendo de la importancia del acoplamiento entre el ángulo y la energía. Esto ocurre en interacciones entre núcleos pesados y neutrones de alta energía. Por ejemplo, la energía perdida por un neutrón después de una colisión con un núcleo pesado, es baja, y sólo en los casos de los ángulos de colisión donde se pierde la mayor cantidad de energía es cuando se considera isotrópico.
- Ocurre en la correlación entre la energía final del neutrón y el ángulo de colisión. Esto es más
 pronunciado con núcleos ligeros y estructuras finas de grupos de energía, incluso si la
 dispersión en el centro de masa es isotrópica. A menudo esto resulta en una transferencia
 típica en la sección eficaz del neutrón en el intervalo que se considere, comenzando desde un
 valor por arriba de cero.

En ambos casos se implementa un desarrollo en polinomios de Legendre o de armónicos esféricos en la sección eficaz para su aproximación.

2. IMPLEMENTACIÓN DE LA ANISOTROPÍA EN EL CÓDIGO AZTRAN

El código AZTRAN forma parte de la Plataforma para Análisis y Diseño de Reactores Nucleares AZTLAN, como parte de un proyecto de CONACYT [3]. El código AZTRAN, es un código que resuelve la ecuación de transporte de Boltzmann para varios grupos de energía en estado estacionario, en una, dos y tres dimensiones, considerando para la dependencia angular la aproximación S_N sin considerar la anisotropía, y para la dependencia espacial el método nodal RTN-0 [4, 5, 6]. Los cálculos realizados con AZTRAN con dispersión isotrópica se han comparado con códigos comerciales como CASMO, SERPENT y MCNP, obteniéndose resultados muy satisfactorios [7, 8, 9], por lo que, en el desarrollo de este trabajo las comparaciones se realizan con la aproximación S_N con dispersión isotrópica y la implementación anisotrópica.

2.1. Desarrollo de la implementación anisotrópica

Partiendo de la ecuación de transporte en tres dimensiones, en estado estacionario, multigrupos, y ordenadas discretas, considerando la sección eficaz de dispersión anisotrópica:

$$\mu_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial x} + \eta_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial y} + \xi_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial z} + \Sigma_{tg}(\vec{r}) \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n}) =$$

$$\frac{1}{4\pi} \left[\chi_{g} \sum_{g'=1}^{G} v \Sigma_{fg'} \phi_{0}^{g'} \right] + \sum_{g'=1}^{G} \sum_{n'=1}^{N} \Sigma_{sg' \to g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n'} \cdot \hat{\Omega}_{n}) \psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n'}) w_{n'}$$

$$n = 1, 2, ..., N; \quad g = 1, 2, ..., G$$

$$(x, y, z) \epsilon V = [a_{x}, b_{x}] \times [a_{y}, b_{y}] \times [a_{z}, b_{z}];$$

$$(2.1)$$

donde $\phi_0^g(\vec{r}) = \int \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}'$ es el flujo escalar.

Aproximando la sección de dispersión con una serie de polinomios de Legendre:

$$\Sigma_{sg'\to g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n'}\cdot\hat{\Omega}_{n}) \approx \sum_{\ell=0}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell,g'\to g}(\vec{r}) P_{\ell}(\hat{\Omega}_{n'}\cdot\hat{\Omega}_{n})$$
(2.2)

donde P_{ℓ} es el polinomio de Legendre de grado ℓ y L el grado máximo de anisotropía considerado.

Sustituyendo (2.2) en la ecuación (2.1), se obtiene:

$$\mu_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial x} + \eta_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial y} + \xi_{n} \frac{\partial \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n})}{\partial z} + \Sigma_{tg}(\vec{r}) \psi_{g}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n}) =$$

$$\frac{1}{4\pi} \left[\sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{s_{0}g' \to g}(\vec{r}) \phi_{0}^{g'}(\vec{r}) + \chi_{g} \sum_{g'=1}^{G} v \Sigma_{fg'}(\vec{r}) \phi_{0}^{g'}(\vec{r}) \right]$$

$$+ \sum_{g'=1}^{G} \sum_{n'=1}^{N} \sum_{\ell=1}^{L} \frac{2\ell + 1}{4\pi} \Sigma_{s\ell g' \to g}(\vec{r}) P_{\ell}(\hat{\Omega}_{n'} \cdot \hat{\Omega}_{n}) \psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}_{n'}) w_{n'}$$

$$n = 1, 2, ..., N; \quad g = 1, 2, ..., G$$

$$(2.3)$$

Pero ya que
$$\hat{\Omega}_n = \mu_n \hat{e}_x + \eta_n \hat{e}_y + \xi_n \hat{e}_z$$

$$\hat{\Omega}_{n'} = \mu_n \hat{e}_x + \eta_n \hat{e}_y + \xi_n \hat{e}_z$$

$$y \hat{\Omega}_{n'} \cdot \hat{\Omega}_n = \mu_n \mu_{n'} + \eta_n \eta_{n'} + \xi_n \xi_n \hat{e}_z$$

Entonces la ecuación (2.3) es ahora:

$$\mu_{n} \frac{\partial \psi_{gn}(\vec{r})}{\partial x} + \eta_{n} \frac{\partial \psi_{gn}(\vec{r})}{\partial y} + \xi_{n} \frac{\partial \psi_{gn}(\vec{r})}{\partial z} + \Sigma_{tg}(\vec{r}) \psi_{gn}(\vec{r}) =$$

$$\frac{1}{4\pi} \left[\sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{s_{0}g' \to g}(\vec{r}) \phi_{0}^{g'}(\vec{r}) + \chi_{g} \sum_{g'=1}^{G} v \Sigma_{fg'}(\vec{r}) \phi_{0}^{g'}(\vec{r}) \right]$$

$$+ \sum_{g'=1}^{G} \sum_{n'=1}^{N} \sum_{\ell=1}^{L} \frac{2\ell+1}{4\pi} \Sigma_{s\ell g' \to g}(\vec{r}) P_{\ell}(\mu_{n} \mu_{n'} + \eta_{n} \eta_{n'} + \xi_{n} \xi_{n'}) w_{n'} \psi_{g'n'}(\vec{r})$$

$$(2.4)$$

Así, la ecuación (2.4) difiere de la que resolvía el código AZTRAN, en que el lado derecho ahora depende del ángulo a través de $\hat{\Omega}_n$. Por esta razón fue necesario separar el término que corresponde a la fuente debida a las fisiones que es isotrópico, del relacionado a la fuente debida a las dispersiones, que es anisotrópico. El cálculo del lado derecho se efectuaba en la subrutina "calscnm". Tomando ésta como punto de partida, se desarrollaron y probaron dos subrutinas: "calscnmf" y "calscnms". La primera para calcular la fuente debida a las fisiones y la segunda para la fuente debida a las dispersiones. Además fue necesario incorporarle una función que evalúa el polinomio de Legendre de grado ℓ en un valor dado. Estas nuevas subrutinas, además de la función fueron incorporadas al código AZTRAN realizando algunas pruebas básicas para verificar su adecuada implementación. Así, el código AZTRAN toma en cuenta el grado de anisotropía máximo L que le indique el usuario, de igual manera tiene que proporcionar todas y cada una de las L+1 matrices de dispersión.

3. RESULTADOS

A continuación se presentan los resultados obtenidos de la implementación de la anisotropía dentro del código AZTRAN.

Los cálculos se llevaron a cabo para un ensamble de combustible tipo BWR de 10x10, el cual contiene un solo tipo de material, la Tabla 1 muestra los datos del problema que se consideraron para su análisis.

Tabla I. Elementos del problema tipo analizado

Número de materiales del problema:	1
Número total de elementos barra:	1
Número de grupos de energía:	1
Número total de elementos o celdas:	1000
Número total de cortes en x:	11
Número total de cortes en y:	11
Número total de cortes en z:	11
Número total de franjas en la dirección x:	10
Número total de franjas en la dirección y:	10
Número total de franjas en la dirección z:	10
Número de cortes principales en x:	11
Número de cortes principales en y:	11
Número de cortes principales en z:	11

Como parte de los análisis que se realizaron, una de las comparativas fue el comportamiento de la potencia axial promediada con dispersión anisotrópica y aproximación angular S_6 , como se puede observar en la Figura 1, se observa que hay un corrimiento en el valor de la potencia, el cual se mantiene invariable al aumentar el grado de aproximación de la anisotropía a partir de la aproximación P_2 , el cambio ya es mínimo.

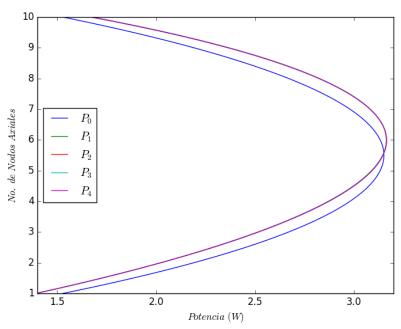
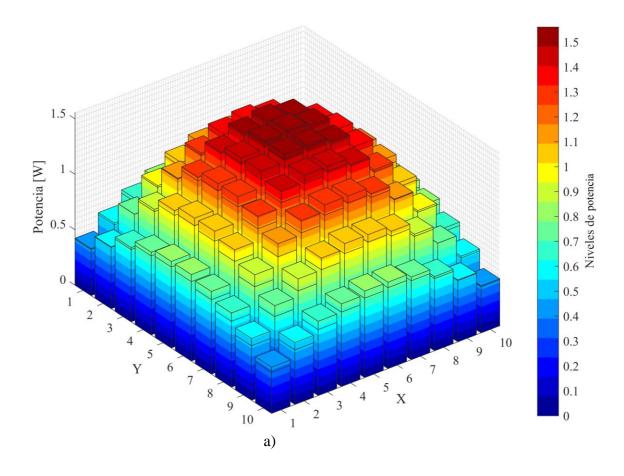


Figura 1. Efecto de la anisotropía en la potencia axial, comparativa con aproximación P_0 (Isotrópica), respecto a la anisotropía con aproximaciones P_1 y P_2 .

Tabla II. Resultados para la potencia radial y la k_{eff}

Aprox.	Potencia		Localizac	ión (i , j)	1-
	Máxima	Mínima	Máxima	Mínima	$oldsymbol{k}_{e\!f\!f}$
P_0	1.541	0.416	(5,5)	(1,1)	1.45440117E-01
P_1	1.560	0.37	(6,6)	(1,1)	1.44042458E-01
P_2	1.559	0.377	(6,6)	(1,1)	1.44106762E-01
P_3	1.559	0.377	(6,6)	(1,1)	1.44107258E-01
P_4	1.559	0.377	(6,6)	(1,1)	1.44107272E-01

Respecto a la potencia radial, el efecto anisotrópico mantiene una distribución simétrica en torno al ensamble, así mismo se puede visualizar el aumento del valor de la potencia al considerar la anisotropía, como se muestra en la Figura 2.



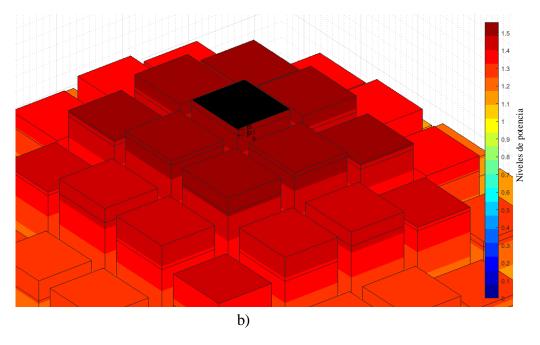


Figura 2. a) Potencia con aproximación en la dispersión isotrópica y anisotrópica. b) Vista aumentada de cada potencia promediada.

Con respecto al factor de multiplicación efectiva (k_{eff}), éste mantiene un valor casi constante a medida que se aproxima a un grado de anisotropía mayor, estos datos se tienen tabulados en la Tabla II, y se pueden observar el comportamiento en la figura siguiente:

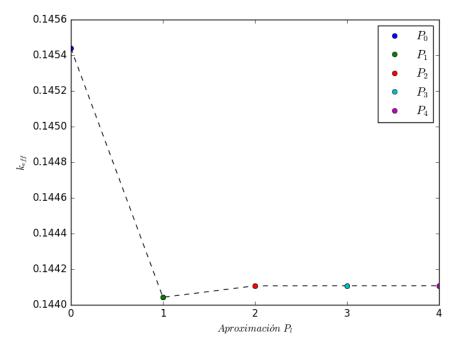


Figura 3. Factor de multiplicación efectivo k_{eff} en cada aproximación P_{ℓ} .

4. CONCLUSIONES

El efecto de la anisotropía, fue estudiado con un problema simple para un reactor tipo BWR, la implementación en el código AZTRAN fue sin utilizar el rebalance en malla gruesa, así mismo se consideró una discretización angular con una aproximación S_6 y las aproximaciones implementadas a las dispersiones fueron desde P_1 hasta P_4 . Del análisis efectuado se puede concluir lo siguiente:

- Es notorio el efecto que produce la anisotropía en el comportamiento de la potencia axial, como se pudo observar en los resultados hay un corrimiento de la misma de manera constante, es decir en principio la curva considerando la anisotropía permanece por debajo de la curva isotrópica, llegando a cruzarse a la mitad de los nodos, y de ahí permanece por arriba. Es notorio además que a partir de la aproximación P_2 , el cambio con respecto a la dispersión isotrópica es despreciable.
- Respecto a la potencia radial, se tiene un comportamiento similar al de la potencia axial, con la diferencia que aquí se tiene solamente un aumento de la potencia al considerar la anisotropía como se mostró en la Figura 2. De igual manera el cambio no se nota al aumentar el grado de la aproximación a partir de la aproximación P_2 .
- Finalmente el factor de multiplicación efectiva k_{eff} , se vio afectado con la primera aproximación, después de aumentar el grado P_L , no se observó mayor cambio, a partir de la P_2 .

Es importante señalar que el problema analizado no contempla diferentes materiales y diferentes tipos de celda axialmente, por lo que se pretende en trabajos futuros realizar pruebas más exhaustivas considerando problemas benchmark o problemas de ensambles combustible reales.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACYT – SENER.

REFERENCIAS

- 1. H. Brockmann, *Treatment of Anisotropic Scattering in Numerical Neutron Transport Theory*, Nuclear Science and Engineering, p. 77, 377-414, 1981.
- 2. Dahl Jon Alan, *Positive Anisotropic Scattering Sources for Discrete Ordinate Methods*, University of Arizona, 1999.
- 3. Armando M. Gómez Torres, Federico Puente Espel, Edmundo del Valle Gallegos, Juan Luis François Lacouture, Cecilia Martín del Campo Márquez, *AZTLAN Platform: Plataforma Mexicana para el Análisis y Diseño de Reactores Nucleares*, XXV Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana, Boca del Río, Veracruz, México, del 31 de Agosto al 4 de Septiembre de 2014.
- 4. Samuel Vargas, Guillermo Ibarra, José V. Xolocostli, Roberto Carlos. AZTRAN 1.1 AZTLAN TRANSPORT NEUTRONIC CODE, Manual de Usuario, AZTLAN PLATFORM, Ciudad de México, México, 2015.
- 5. Del Valle G. Edmundo, *Desarrollo de un Método Nodal DSA para Transporte Neutrónico en Ordenadas Discretas y Estado Estacionario para Geometría XYZ Usando el Método Nodal RTN-0*, Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Departamento de Ingeniería Nuclear, México D.F., 1994.
- 6. Bengt G. Carlson and Clarence E. Lee, *Mechanical Quadratures and the Transport Equation*, Los Alamos National Laboratory, LAMS-2573, Los Alamos National Laboratory, 1961.
- 7. Mario Chepe Pérez, J. Vicente Xolocostli Munguía, Armando M. Gómez Torres, Edmundo del Valle Gallegos, *Desarrollo e Implementación de un Conjunto de Cuadraturas Numéricas de tipo SQN y EQN en el Código de Transporte AZTRAN*, XXVI Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana, Puerto Vallarta, Jalisco, México, del 5 al 8 de Julio de 2015.
- 8. Guillermo Ibarra Reyes, Samuel Vargas Escamilla, Armando M. Gómez Torres, Edmundo del Valle Gallegos, *Cálculos de Celdas de Combustible Nuclear usando el módulo AZTRAN*, XXIV Congreso Técnico Científico ININ-SUTIN, Centro Nuclear "Dr Nabor Carrillo Flores", La Marquesa, Ocoyoacac, México, Noviembre 2014.
- 9. Guillermo Ibarra Reyes, Armando M. Gómez Torres, Edmundo del Valle Gallegos, *Modelado de Celdas de Combustible Nucleares Heterogéneas Usando el Módulo AZTRAN*, XX Reunión Nacional Académica de Física y Matemáticas, Departamento de Física, ESFM-IPN, CD. De México D.F., México, 2015.