

**SIMULACIÓN MULTI-FÍSICA Y MULTI-ESCALA  
DE UN REACTOR NUCLEAR ENFRIADO  
CON METALES LÍQUIDOS**

Tesis que presenta

**Alejandría Denisse Pérez Valseca**

Para obtener el grado de

**Doctora en Ciencias (Energía y Medio Ambiente)**





**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA**  
**UNIDAD IZTAPALAPA**  
**POSGRADO EN ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE**

**SIMULACIÓN MULTI-FÍSICA Y MULTI-ESCALA DE UN REACTOR  
NUCLEAR ENFRIADO CON METALES LÍQUIDOS**

Tesis que para obtener el grado de  
**DOCTORA EN CIENCIAS (ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE)**

**Presenta:**

Alejandría Denisse Pérez Valseca

**Director:**

Dr. Gilberto Espinosa-Paredes

**Co-Director:**

Dr. Armando Miguel Gómez-Torres

**Ciudad de México, Octubre, 2021.**



**SIMULACIÓN MULTI-FÍSICA Y MULTI-ESCALA DE UN REACTOR  
NUCLEAR ENFRIADO CON METALES LÍQUIDOS**

Tesis que para obtener el grado de  
DOCTORA EN CIENCIAS (ENERGÍA Y MEDIO AMBIENTE)

**Presenta:**

Alejandría Denisse Pérez Valseca



Dr. Gilberto Espinosa Paredes  
Director



Dr. Armando Miguel Gómez Torres  
Co-Director

**Ciudad de México, 15 de octubre, 2021.**





Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00010

Matrícula: 2151800950

Simulación multi-física y multi-escala de un reactor nuclear enfriado con metales líquidos.



ALEJANDRIA DENISSE PEREZ VALSECA

ALUMNA

Con base en la Legislación de la Universidad Autónoma Metropolitana, en la Ciudad de México se presentaron a las 9:00 horas del día 15 del mes de octubre del año 2021 POR VÍA REMOTA ELECTRÓNICA, los suscritos miembros del jurado designado por la Comisión del Posgrado:

DR. RODOLFO VAZQUEZ RODRIGUEZ  
DR. ERIK CESAR HERRERA HERNANDEZ  
DR. ROBERTO CARLOS LOPEZ SOLIS  
DR. LUIS CARLOS JUAREZ MARTINEZ  
DR. MARCO ANTONIO POLO LABARRIOS

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

DOCTORA EN CIENCIAS (ENERGIA Y MEDIO AMBIENTE)

DE: ALEJANDRIA DENISSE PEREZ VALSECA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

Aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó a la interesada el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. RODOLFO VAZQUEZ RODRIGUEZ

VOCAL

DR. ERIK CESAR HERRERA HERNANDEZ

VOCAL

DR. ROBERTO CARLOS LOPEZ SOLIS

VOCAL

DR. LUIS CARLOS JUAREZ MARTINEZ

SECRETARIO

DR. MARCO ANTONIO POLO LABARRIOS

El presente documento cuenta con la firma -autógrafa, escaneada o digital, según corresponda- del funcionario universitario competente, que certifica que las firmas que aparecen en esta acta - Temporal, digital o dictamen- son auténticas y las mismas que usan los c.c. profesores mencionados en ella

*Director de Tesis:*

**Dr. Gilberto Espinosa-Paredes.** Área de Ingeniería en Recursos Energéticos. Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica. División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa.

*Co-Director de tesis:*

**Dr. Armando Miguel Gómez Torres.** Departamento de Sistemas Nucleares. Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares.

## **Agradecimientos**

El Doctorado en Ciencias (Energía y Medio Ambiente) de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, pertenece al Padrón Nacional de Posgrados de Calidad del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y cuenta con apoyo del mismo Consejo con el convenio No.**003893**; por lo que agradezco la beca recibida para el desarrollo de esta tesis.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y a la Secretaría de Energía (SENER) quienes financian el desarrollo de la plataforma AZTLAN, mediante el fondo sectorial CONACYT-SENER-SUSTENTABILIDAD ENERGÉTICA a través del proyecto No. **212602**.

## **Agradecimientos personales**

Agradezco en especial al Dr. Gilberto Espinosa, por guiarme, enseñarme y permitirme ser su alumna y colaboradora. A demás de siempre proporcionarme todos los recursos necesarios para la elaboración de este trabajo. Gracias por su apoyo, comprensión y entusiasmo.

Agradezco al Dr. Armando Gómez, por guiarme y apoyarme durante la realización de esta investigación.

Agradezco inmensamente al Dr. Carlos Aguilar Madera por todo su apoyo, orientación y enseñanzas para desarrollar este trabajo, pero sobre todo por su entusiasmo y mucha paciencia.

A los profesores de la comisión examinadora; Dr. Rodolfo Vázquez, Dr. Marco Polo, Dr. Erik Herrera, Dr. Luis Juárez y Dr. Roberto López, por sus oportunas observaciones y recomendaciones para la mejora de mi tesis.

Agradezco al Dr. Francisco Valdés Parada por sus observaciones y comentarios para mejorar este trabajo.

Agradezco a mis padres, Adriana y Daniel, por enseñarme a seguir mis sueños y guiarme con amor y comprensión en la vida.

A mis hermanos y mejores amigos, Daniela y Pedro, por llenar mi vida de alegría y apoyarme incondicionalmente.

Agradezco a mis amigos y amigas por estar en las buenas y malas, en especial a Lorena, mi hermana de corazón.

The show must go on.

## Índice general

Resumen .....	1
Abstract.....	2
Introducción.....	3
1. Antecedentes.....	6
1.1 Reactores nucleares enfriados con metales líquidos (LMFR) .....	6
1.2 Reactor rápido enfriado con Sodio .....	8
1.3 Fenómenos físicos en los LMFR .....	10
1.3.1 Procesos neutrónicos en los LMFR.....	11
1.3.2 Procesos de transferencia de calor en los LMFR .....	12
1.3.3 Acoplamiento en los LMFR.....	14
2. Objetivos.....	16
2.1 Objetivo general.....	16
2.2 Objetivos específicos .....	16
3. Análisis de la transferencia de calor .....	17
3.1 Modelo matemático local.....	18
3.2 Modelo escalado .....	20
3.2.1 Escalamiento de las ecuaciones locales .....	21
3.2.2 Solución formal para las desviaciones de la temperatura .....	29
3.2.3 Problemas de cerradura .....	32
3.2.4 Ecuación de transporte de calor escalada .....	34
3.3 Estimación numérica de los coeficientes efectivos.....	36
3.3.1 Modelo de velocidad del refrigerante .....	36
3.3.2 Solución de los problemas de cerradura.....	38
3.4 Resultados del modelo escalado .....	46
4. Difusión de neutrones .....	51
4.1 Modelo de la de cinética neutrónica .....	51
4.1.1. Teoría de difusión.....	52
4.1.2. Modelo de Reactividad.....	59
4.2 Término fuente de calor .....	60
5. Acoplamiento multi-físico .....	62
6. Implementación de los modelos .....	64
6.1 Estado estacionario .....	64
6.2 Experimentos numéricos.....	69
6.2.1 Reactividad global.....	69
6.2.2 Reactividad en el sistema de control secundario.....	70
6.2.3 Reactividad en una barra de control.....	72
7. Análisis multi-escala.....	75
Conclusiones.....	79
Recomendaciones .....	81
Nomenclatura.....	82
Referencia Bibliográfica.....	84
Artículos publicados .....	92



## Índice de figuras

<b>Figura 1.1.</b> Generación de reactores nucleares .....	7
<b>Figura 1.2.</b> Diagrama esquemático de un reactor SFR tipo piscina .....	9
<b>Figura 3.1.</b> Corte radial del núcleo del reactor SFR .....	17
<b>Figura 3.2.</b> a) Ensamble hexagonal de combustible, b) Distribución de los pines de combustible, c) Arreglo de ensambles de combustible .....	18
<b>Figura 3.3.</b> Región de promediado en el núcleo del reactor. ....	21
<b>Figura 3.4.</b> Celda unitaria representativa, con 60595 elementos de dominio.....	39
<b>Figura 3.5.</b> Proyección de norma euclidiana de las variables de cerradura $\ \mathbf{b}_{ff}\ , \ \mathbf{b}_{mf}\ $ ....	40
<b>Figura 3.6.</b> Proyección de norma euclidiana de las variables de cerradura $\ \mathbf{b}_{fm}\ , \ \mathbf{b}_{mm}\ $ ..	40
<b>Figura 3.7.</b> Proyección de las variables de cerradura $S_f, S_m$ .....	41
<b>Figura 3.8.</b> Componentes de coeficientes efectivos de los tensores térmicos en función de la velocidad del refrigerante. ....	44
<b>Figura 3.9.</b> Componentes de los coeficientes efectivos del vector <i>pseudo-convectivo</i> en función de la velocidad del refrigerante. ....	46
<b>Figura 3.10.</b> a) y b) Ensamble representativo del reactor nuclear para las simulaciones numéricas a escala de pin; c) y d) geometría equivalente homogeneizada del ensamble de combustible para la simulación del modelo escalado. ....	47
<b>Figura 3.11.</b> Comparación de las temperaturas del combustible $T_f$ (K) y de metal líquido $T_m$ (K) en la simulación numérica a escala de pin y la simulación numérica del modelo escalado. ....	48
<b>Figura 3.12.</b> Temperatura del combustible $T_f$ (K) y del metal líquido $T_m$ (K) obtenidas con el modelo escalado. ....	49
<b>Figura 3.13.</b> Perfil de temperatura de la simulación numérica a escala de pin y del modelo escalado a través del ensamble. ....	50
<b>Figura 5.1.</b> Diagrama esquemático de acoplamiento entre la neutrónica del núcleo reflectado y el modelo escalado de transferencia de calor. (a)Módulo de acoplamiento (b)Módulo neutrónico, y (c)Módulo de transferencia de calor. ....	63
<b>Figura 6.1.</b> (a) Geometría modelada del núcleo SFR, (b) malla aplicada en la geometría. .	64
<b>Figura 6.2.</b> Valor inicial del flujo neutrónico $[nv's]$ .....	65
<b>Figura 6.3.</b> Flujo neutrónico a 100% de potencia $[nv's]$ .....	65
<b>Figura 6.4.</b> Distribución de los precursores de neutrones retardados (6 grupos) a 100% de potencia.....	66
<b>Figura 6.5.</b> Flujo neutrónico a 75% de potencia $[nv's]$ .....	66

<b>Figura 6.6.</b> Distribución de los precursores de neutrones retardados (6 grupos) a 75% de potencia [ <i>precursores / cm<sup>3</sup></i> ].....	67
<b>Figura 6.7.</b> Temperatura del combustible a 100% y 75% de potencia. ....	68
<b>Figura 6.8.</b> Temperatura del refrigerante a 100% de potencia y 75% de potencia, en tres posiciones en el eje axial. ....	68
<b>Figura 6.9.</b> Efectos en el núcleo debido a un cambio de reactividad global. ....	69
<b>Figura 6.10.</b> Comportamiento del flujo neutrónico [ <i>nv's</i> ] debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario. ....	71
<b>Figura 6.11.</b> Comportamiento de la temperatura debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario. ....	72
<b>Figura 6.12.</b> Comportamiento del flujo neutrónico [ <i>nv's</i> ] debido al cambio de reactividad en una barra de control. ....	73
<b>Figura 6.13.</b> Comportamiento de la temperatura debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario. ....	73
<b>Figura 6.14.</b> Comportamiento del flujo de neutrones debido a la inserción de reactividad positiva y negativa en una barra de control. ....	74
<b>Figura 7.1.</b> Escalas de análisis en el núcleo del reactor.....	75
<b>Figura 7.2.</b> Proceso de “des-escalamiento” en el núcleo del reactor. ....	76
<b>Figura 7.3.</b> Temperatura del combustible y del sodio en el ensamble de combustible. ....	77
<b>Figura 7.4.</b> Temperatura del combustible, gap, encamisado y sodio .....	78

## Índice de tablas

<b>Tabla 1.1.</b> Parámetros nominales del reactor SFR.....	10
<b>Tabla 3.1.</b> Propiedades físicas del combustible y del sodio. ....	38
<b>Tabla 3.2.</b> Componentes de los coeficientes escalados del tensor térmico efectivo a diferentes velocidades de entrada del refrigerante. ....	42
<b>Tabla 3.3.</b> Componentes de los coeficientes escalados del vector efectivo de pseudo-velocidad.....	45
<b>Tabla 3.4.</b> Coeficiente volumétrico de transferencia de calor. ....	46
<b>Tabla 4.1.</b> Secciones eficaces y parámetros neutrónicos.....	59
<b>Tabla 4.2.</b> Precursores de neutrones retardados SFR. ....	59
<b>Tabla 6.1.</b> Parámetros del núcleo del SFR en función de la reactividad (a) cambio global, (b) cambio en el sistema secundario de control, y (c) cambio en una barra de control.....	70



Existe una fuerza motriz más fuerte que el vapor, la electricidad y  
la energía atómica: la fuerza de voluntad.

-Albert Einstein-



## Resumen

Los reactores nucleares son sistemas heterogéneos que contienen miles de pines de combustible y muestran una distribución de energía en el espacio donde las temperaturas entre el fluido refrigerante y las barras de combustible son diferentes. En este sistema, los fenómenos de transferencia de calor son de crucial importancia en el diseño y análisis de seguridad debido a los efectos de retroalimentación con los procesos neutrónicos para la generación de energía. En este trabajo, el proceso de transferencia de calor se analiza en reactores nucleares rápidos refrigerados por metal líquido, con dos ecuaciones de energía escaladas. El escalamiento de las ecuaciones se realiza mediante la aplicación del método de promediado volumétrico. El modelo de transferencia de calor escalado se acopla con un modelo neutrónico de flujo reflectado, con efectos de retroalimentación de las temperaturas del combustible nuclear y el metal líquido. Las ecuaciones de energía escaladas son representativas del núcleo completo del reactor con restricciones físicas, definiciones de variables promedio y coeficientes efectivos, lo cual permite un grado aceptable de fidelidad para predecir el comportamiento del núcleo del reactor. Para aumentar el grado de fidelidad en el análisis, se presenta un proceso de des-escalamiento del núcleo del reactor, que considera la escala de un ensamble de combustible nuclear, hasta la escala más pequeña considerada (barra de combustible). Este punto es de particular importancia para el análisis de puntos calientes en el núcleo del reactor, derivando en la seguridad del reactor en estado estacionario y en eventos de perturbación. El modelo escalado es programado en un Software de Dinámica de Fluidos Computacional, en donde se simuló eventos en estado estacionario y se diseñaron escenarios en diferentes condiciones de operación del reactor, para estudios de seguridad.

## **Abstract**

Heat transfer phenomena are of crucial importance in the design and safety analysis of nuclear reactors, due to the feedback effects with power generation neutronic processes. Nuclear reactors are heterogeneous systems that contain miles of fuel pins and show an energy distribution in space where the temperatures between the coolant fluid and the fuel rods are different. In this work, the heat transfer process is analyzed in liquid metal cooled fast nuclear reactors, with two scaled energy equations. The scaling of the equations is carried out by applying the volumetric averaging method. The scaled heat transfer model is coupled with a reflected flux neutron model, with feedback effects due to the temperatures of the nuclear fuel and liquid metal. The scaled energy equations are representative of the complete reactor core with physical constraints, mean variable definitions, and effective coefficients, which allow an acceptable degree of fidelity to predict the behavior of the reactor core. To increase the degree of fidelity in the analysis, a reactor core de-scaling process is presented, which considers the scale of a nuclear fuel assembly, down to the smallest scale considered (fuel rod). This point is of particular importance for the analysis of hot spots in the reactor core, resulting in reactor safety in a steady state and disturbance events.

## Introducción

En un reactor nuclear ocurren simultáneamente diferentes fenómenos. En el núcleo, 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 es heterogéneo y contiene muchos conjuntos de combustible y, a su vez, cada conjunto contiene varias barras de combustible. El núcleo contiene diferentes zonas de enriquecimiento de combustible, barras de control y grafito. Un gran esfuerzo para comprender la física de los reactores nucleares incluye el análisis de la interacción entre el combustible y el refrigerante (véanse, por ejemplo, los trabajos de Uršic y Leskovar (2012), Aufiero et al. (2013), Du et al. (2019), Li et al. (2017)) y Dubey y Sharma (2018)). Estos autores se basan en el análisis del núcleo del reactor con el enfoque de subcanal (Todreas y Kazimi, 1990), que establece un canal representativo compuesto por una varilla y el fluido que la rodea. En este enfoque, se consideran las ecuaciones gobernantes de transporte de masa, cantidad de movimiento y energía de la barra de combustible y del refrigerante que la rodea. Para el reactor rápido refrigerado por metales líquidos (LMFR, por sus siglas en inglés), la metodología de análisis de subcanal se ha utilizado con frecuencia, Wu et al. (2013) presentaron el análisis del termofluido de un canal, incluyendo la interacción entre dos tipos diferentes de subcanales para reactores rápidos refrigerados por sodio (SFR, por sus siglas en inglés). Sin embargo, los investigadores no consideraron los efectos de retroalimentación de los procesos neutrónicos. Sánchez et al. (2010) analizaron las barras de combustible y el núcleo de los reactores SFR utilizando un programa basado en subcanal. En la actualidad, existen otros simuladores numéricos como el código SUBAC (2018) que también se basa en el análisis de subcanal, calculando distribuciones de flujo y temperatura en conjuntos combustibles de SFR.

Además del enfoque del subcanal, el análisis de los reactores nucleares se ha realizado mediante una aproximación de medios porosos, donde el combustible de los pines (fase sólida) se comporta como la matriz sólida mientras que el refrigerante (fase líquida) llena el espacio poroso constituido por el espacio vacío entre los pines de combustible. Chen et al.

(2010) utilizaron un enfoque de este tipo para analizar el reactor MYRRA. Propusieron un modelo diferencial macroscópico continuo de un flujo de haz de clavijas y resolvieron dicho modelo utilizando simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD). La aproximación de medios porosos se ha utilizado en matrices hexagonales de combustible (Nouri-Borujerdi y Ghomsheh, 2015), incorporando un código de análisis del termofluido en 2D de reactores modulares de alta temperatura (HTGR) siguiendo una matriz prismática. El software se basa en la solución de un conjunto acoplado de ecuaciones de conservación de masa, energía y momento para el flujo de gas, y la ecuación de conservación de energía para la fase sólida. Saadati et al. (2018) utilizaron el método de medios porosos y una aproximación de subcanal para modelar el núcleo de un reactor VVER1000 / 446, comparando los resultados con el código COBRA-EN . En estos reactores, se añaden partículas metálicas al refrigerante del reactor aumentando la capacidad de refrigeración, es decir, el fluido refrigerante es un flujo de dos fases.

En este trabajo, el análisis de subcanales en el núcleo de reactores rápidos refrigerados por metal líquido, específicamente un SFR, se basa en el método de promediado volumétrico (VAM, por sus siglas en inglés) (Whitaker, 1999). El VAM ha sido ampliamente aplicado en diferentes áreas de la ciencia y la tecnología. La aplicación sistemática de VAM a las ecuaciones que gobiernan los fenómenos de transporte a escala local conduce a ecuaciones promediadas válidas a escalas superiores. Además de proporcionar la forma de la ecuación ampliada, el método de promediado volumétrico permite conocer el vínculo matemático con la física en escalas inferiores. En el núcleo del reactor nuclear se consideran dos fases, la fase sólida correspondiente a las barras de combustible y la fase líquida al metal líquido.

Una vez obtenidas las ecuaciones escaladas, el modelo de transferencia de calor se acopla con un modelo neutrónico, basado en el modelo de difusión de neutrones (Duderstand, 1976), con el fin de obtener el término fuente de calor en función del flujo neutrónico asociado al núcleo del SFR y así lograr una retroalimentación entre ambos fenómenos.

En la Primera Sección de este trabajo se presentan los antecedentes de los reactores nucleares enfriados con metales líquidos, así como la descripción del reactor utilizado como referencia en este trabajo. Además, se explican los principales fenómenos presentes en el núcleo del

reactor. En la Segunda Sección se presenta el objetivo general y los objetivos específicos de este trabajo. En la Tercera Sección, se desarrolla el modelo de transferencia de calor escalado hasta la escala del núcleo, partiendo de las ecuaciones locales y resolviendo los problemas asociados para la obtención de los coeficientes efectivos, de igual manera se valida el modelo térmico realizando una comparación con un modelo a escala de pin. En la Sección 4, se presenta el modelo neutrónico utilizado para describir los fenómenos en el núcleo, el cual se considera con las dos regiones de combustible correspondientes y la zona de reflector. En la Sección 5 se presenta el acoplamiento de los modelos térmico y neutrónico, y la identificación de las variables internas y externas involucradas. En la Sección 6, se implementa el modelo acoplado en un software CFD, en donde se calcula el estado estacionario del núcleo y los experimentos numéricos de reactividad realizados. Para terminar, se realiza el análisis multi-escala, en donde se presentan los resultados del modelo escalado en la escala del núcleo y se propone un proceso de des-escalamiento hasta el nivel de barra, para obtener una mayor fidelidad de los resultados de temperatura de la barra de combustible y el refrigerante.

## 1. Antecedentes

### 1.1 Reactores nucleares enfriados con metales líquidos (LMFR)

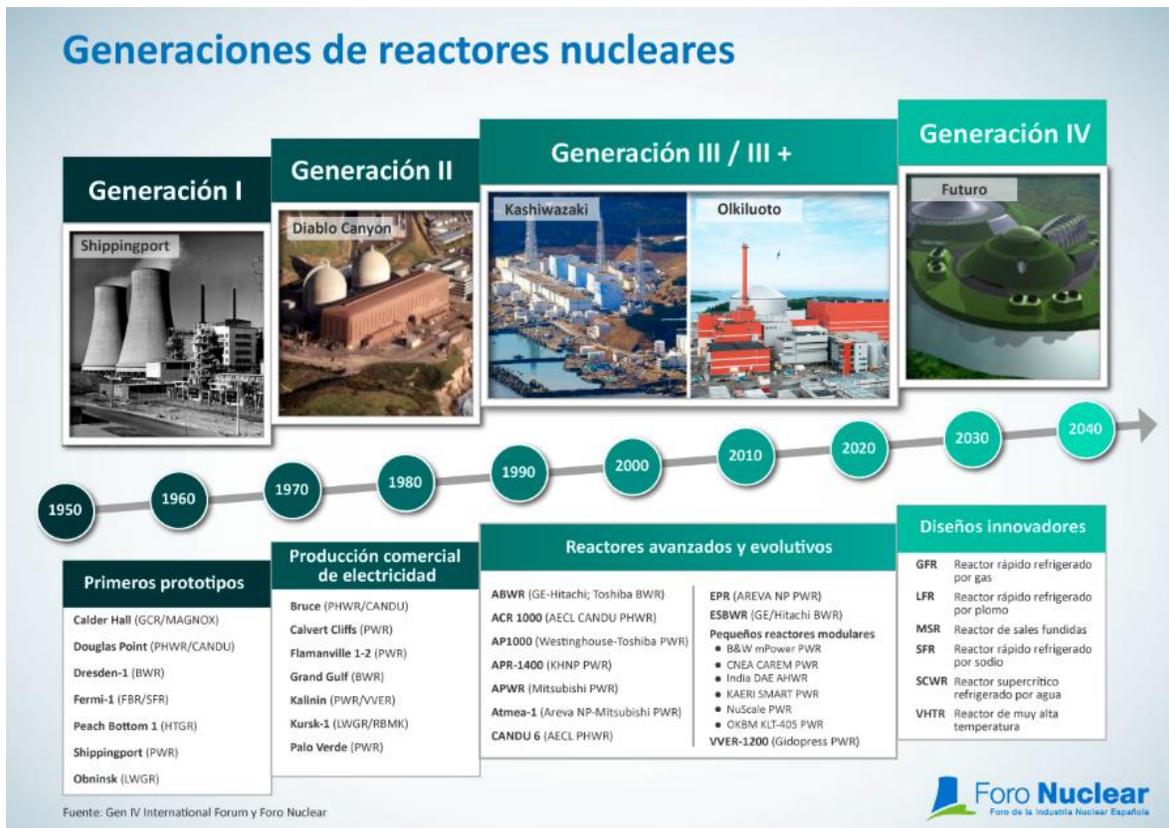
Los reactores rápidos enfriados con metales líquidos (LMFR, por su siglas en inglés) son parte del grupo de reactores de Generación IV. El desarrollo de la tecnología nuclear se inició alrededor de 1950, en donde se crearon los primeros reactores nucleares de experimentación, a estos reactores se les conoce como de *Generación I*. A partir de la década de 1970 se desarrollan los reactores de *generación II*, éstos se caracterizan por ser los primeros reactores comerciales para la generación de electricidad, los sistemas desarrollados fueron el reactor de agua en ebullición (BWR, por sus siglas en inglés) y el reactor de agua a presión (PWR, por sus siglas en inglés), los cuales son clasificados como reactores de agua ligera (LWR, por sus siglas en inglés).

La *Generación III* se considera a partir del año 2000, en esta generación se mejoraron los diseños de la *Generación II*. A los reactores de esta generación se les conoce como reactores avanzados. A finales de la década de 2010 se establece la *Generación III+*, en la cual el objetivo es crear reactores con diseños evolutivos, en donde se obtengan mejoras económicas, sean más competitivos y que las mejoras tecnológicas permitan construirlos en menos tiempo. En las generaciones III y III+, es en donde se desarrollan los reactores avanzados de agua y reactores enfriados por gas, el diseño mantiene las características básicas, mejorando la operación y los sistemas de seguridad (GIF, 2020).

Estos reactores se dividen en dos clases: 1) diseños usando sistemas de seguridad activados con energía y 2) diseños que utilizan sistemas de seguridad pasivos, característica que se basan en fuerzas naturales, por ejemplo, flujos movidos por gravedad o conducción térmica (Todreas y Kazimi, 2001).

Los reactores térmicos avanzados y reactores de espectro rápido de neutrones se encuentran dentro de la *Generación IV* (GIV). Éstos fueron seleccionados por el diseño del reactor, la conversión de energía y el tipo de combustible. Los diseños incluyen núcleos con neutrones térmicos y neutrones rápidos, así como ciclos de combustibles abiertos y cerrados y diversos refrigerantes. Se espera que los primeros reactores GIV comerciales se tengan alrededor de

2030-2040 (GIF, 2020). En la Figura 1.1, se presenta el cronograma de la evolución de los reactores nucleares y sus principales características.



**Figura 1.1.** Generación de reactores nucleares (Foro nuclear, 2021).

El *Foro Internacional de Generación IV* (GIF) es el organismo responsable del seguimiento a las actividades de investigación y desarrollo necesarias para determinar la viabilidad y la capacidad de rendimiento de la próxima generación de sistemas de energía nuclear (GIF, 2017). El GIF se centra en la investigación y desarrollo de seis sistemas de energía nuclear, tal como se describe en el documento titulado *Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems*, publicado en el año 2002 (GIF, 2002). Los sistemas de GIV son: reactor rápido refrigerado con gas (GFR, por sus siglas en inglés), reactor de muy alta temperatura (VHTR, por sus siglas en inglés), reactor refrigerado con agua supercrítica (SCWR, por sus siglas en inglés), el reactor de sales fundidas (MSR, por sus siglas en inglés), reactor rápido refrigerado con sodio (SFR, por sus siglas en inglés) y reactor rápido

refrigerado con plomo (LFR, por sus siglas en inglés). Los dos últimos sistemas son reactores rápidos enfriados con metales líquidos.

La investigación y desarrollo de los reactores rápidos tiene su origen después de la segunda guerra mundial al igual que los reactores térmicos, sin embargo, el desarrollo de éstos últimos fue propio de cada país, debido a la competencia comercial que representaban en ese momento. No obstante, el campo de los reactores rápidos tuvo un intercambio de información y colaboración internacional, teniendo conferencias y reuniones que permitieron trabajar en conjunto para el desarrollo de esta tecnología (Judd, 2014).

El primer reactor rápido conocido, que fue también el primero en utilizar plutonio-239 como combustible, se construyó en Los Álamos para trabajos experimentales en los que se necesitaba una buena fuente de neutrones rápidos. A este reactor se le dio el nombre de “Clementine”. Comenzó a funcionar en noviembre de 1946, con una potencia de 10kW, incrementada posteriormente, en marzo de 1949, a 25kW (Glassone y Sesonske, 1990).

## **1.2 Reactor rápido enfriado con Sodio**

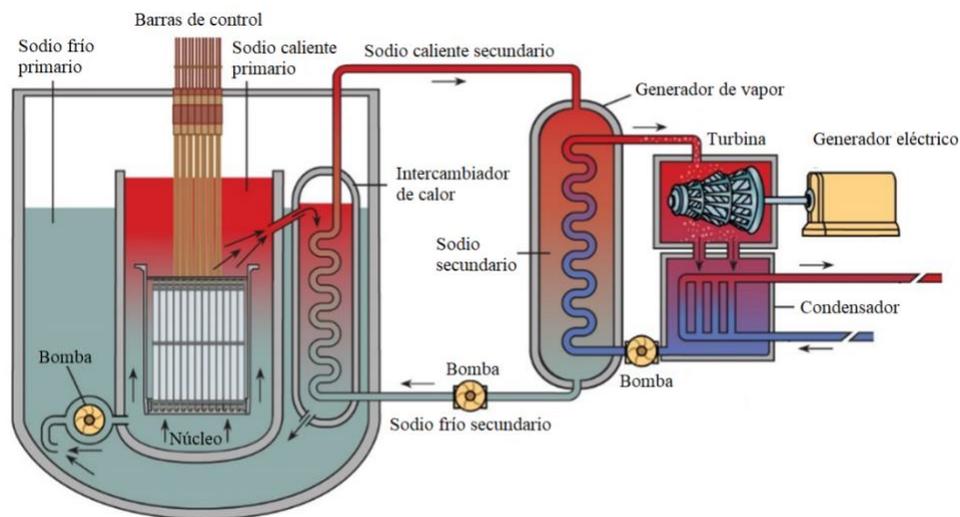
En este trabajo, se toma como referencia un reactor rápido refrigerado por sodio. Esta tecnología cuenta con varios años-reactor de experiencia ya que el inicio de esta tecnología se remonta a la década de 1940 (Judd, 2014). Los años-reactor son los años de operación acumulados de varios reactores de la misma tecnología.

La característica principal de los reactores de espectro rápido es la gestión eficaz de desechos y recursos del uranio, mediante la implementación de reciclaje de combustible gastado y el uso de ciclo cerrado de combustible. El ciclo cerrado mejora significativamente el uso de uranio natural, en comparación con la recuperación de energía de ~ 1% en el actual ciclo de combustible de un solo paso. Al reciclar los componentes del combustible gastado de plutonio y actínidos menores, se minimiza el calor de descomposición y la radio toxicidad de los desechos, lo que lo hace altamente sostenible.

El sistema SFR utiliza sodio líquido como refrigerante del reactor, lo que permite una alta densidad de potencia con una baja fracción de volumen de refrigerante. Debido a las

ventajosas propiedades termofísicas del sodio (alto punto de ebullición, calor de vaporización, capacidad calorífica y conductividad térmica) existe una inercia térmica significativa en el refrigerante primario. Mientras que el ambiente libre de oxígeno previene la corrosión, sin embargo, el sodio reacciona químicamente con el aire y el agua por lo que estos diseños requieren un sistema de refrigeración sellado. El sistema primario opera a una presión cercana a la atmosférica con temperaturas de salida típicas de 500-550 ° C; en estas condiciones, se pueden utilizar materiales estructurales de acero austenítico y ferrítico, y se puede mantener un gran margen para la ebullición del refrigerante a baja presión. La unidad del reactor puede disponerse en un diseño de piscina o en un diseño de circuito compacto.

Hay muchos diseños conceptuales de reactores rápidos refrigerados por sodio que se han desarrollado en todo el mundo en programas avanzados de desarrollo de reactores. Por ejemplo, el reactor BN-800 en Rusia, el reactor rápido Europeo en la Unión Europea (ESFR), el reactor avanzado de metal líquido (PRISM) y los programas de reactor rápido integral en Estados Unidos, así como el reactor reproductor rápido de demostración en Japón, han sido los base para cualquier estudio de diseño SFR (GIF, 2020).



**Figura 1.2.** Diagrama esquemático de un reactor SFR tipo piscina (Encyclopædia Britannica, 2021).

El diagrama esquemático del reactor rápido refrigerado por sodio tipo piscina se muestra en la Figura 1.2. El objetivo principal de este reactor es la generación de electricidad. El

combustible es una mezcla de uranio y plutonio ubicado en el núcleo. El proceso neutrónico genera una gran cantidad de energía en forma de calor, que el refrigerante elimina continuamente. El refrigerante fluye a través del núcleo para extraer el calor y luego se mueve a través de un intercambiador de calor para producir vapor que a su vez mueve una turbina, generando electricidad.

Este diseño de SFR cuenta con dos circuitos de intercambio de calor principales, el primero se encuentra dentro de la vasija del reactor, en donde se transfiere al calor del sodio que pasa a través del núcleo al sodio externo del núcleo. Posteriormente, el sodio externo pasa por un intercambiador de calor para generación de vapor, el cual se va hacia la turbina. Este diseño permite tener control de seguridad en el sistema de enfriamiento del núcleo.

**Tabla 1.1.** Parámetros nominales del reactor SFR (Lázaro et al., 2014).

<b>Parámetro</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Potencia térmica	MW	3600
Tipo de ensamble	-	Hexagonal cerrado
Tipo de combustible	-	(U, Pu)O <sub>2</sub>
Temperatura promedio del combustible	°C	1227
Temperatura máxima del combustible	°C	2000
Material del encamisado	-	Acero ODS
Temperatura máxima del encamisado	°C	550
Refrigerante	-	Sodio
Temperatura de entrada del refrigerante	°C	395
Temperatura de salida del refrigerante	°C	545
Velocidad máxima del refrigerante	m/s	5

### 1.3 Fenómenos físicos en los LMFR

En esta sección se describen los principales fenómenos que ocurren en el núcleo de un reactor nuclear SFR, los cuales serán abordados con mayor detalle en las siguientes secciones para su modelación, escalamiento y simulación.

### *1.3.1 Procesos neutrónicos en los LMFR*

Existen tres factores neutrónicos que determinan la potencia térmica de un reactor nuclear; la masa de material físil presente, la sección eficaz macroscópica de fisión y el flujo neutrónico, éste último es un factor con el cual se puede tener un control de dicha potencia.

Estos tres factores determinan los procesos neutrónicos en el núcleo del reactor. La masa físil establece la cantidad necesaria de combustible para fisiónar, la sección macroscópica de cada material determina el espectro en el cual el material fisiónará y el flujo neutrónico establece la cantidad de neutrones disponibles para ser absorbidos y generar una fisión.

Los modelos para el análisis de los procesos neutrónicos parten de la ecuación de transporte de Boltzmann, pero para fines prácticos, se ha adoptado la teoría de difusión, la cual está probada que arroja resultados aceptables y ha sido utilizada como la principal herramienta para diseños de códigos de reactores rápidos. Además, la ecuación de difusión es relativamente simple, y sus propiedades y los métodos para resolverlo son bien conocidos desde hace mucho tiempo (IAEA,2017). A continuación, se describen los modelos utilizados en el desarrollo de los LMFR.

Los modelos de difusión 3D basados en métodos de diferencias finitas para cálculos de reactores rápidos han sido aplicados para el análisis de LMFR. Los modelos nodales resuelven la ecuación de difusión tridimensional en geometrías cartesianas y / o hexagonales usando las secciones eficaces homogeneizadas. Los códigos nodales usados con más frecuencia para las aplicaciones de reactores rápidos son DIF3D (Derstine, 1982) y HEXNOD (Gheorghiu, 1989; Bereznev, 2016).

En varios modelos es posible llevar a cabo una simulación Monte Carlo directa de un problema de reactor usando modelos geométricos detallados. Estos pueden usarse para proporcionar valores de referencia e investigar los efectos de las aproximaciones en métodos deterministas. Algunos códigos Monte Carlo utilizados en el análisis de LMFR son MCNP (Griseri et al., 2017), KENO (Billings et al., 2015), TRIPOLI y VIM, entre otros (IAEA, 2012). Los códigos Monte Carlo no se utilizan frecuentemente en el diseño de reactores rápidos porque requieren mucho tiempo de ejecución. La técnica de Monte Carlo es atractiva

debido a la capacidad de representar con precisión detalles de datos nucleares y de tratar geometrías complejas.

Actualmente, algunos códigos utilizados para el análisis de reactores de agua ligera (LWR, por sus siglas en inglés), están siendo aplicados para el análisis de LMFR. Tal es el caso de los códigos DYN3D y PARCS, descritos a continuación.

DYN3D es un código avanzado de difusión nodal multigrupo, comprende un modelo 3D de la cinética neutrónica basado en métodos de expansión nodal para geometrías de ensamblaje de combustible cuadrado y hexagonal, así como un módulo termohidráulico con capacidades de modelado de flujo de refrigerante monofásico o bifásico (Grundmann et al., 2000). Las propiedades termofísicas del sodio se incluyen en la base de datos del módulo termohidráulico (Rachamin et al., 2013).

PARCS es un código que resuelve la ecuación de difusión de neutrones de dos grupos dependiente del tiempo en geometría cartesiana tridimensional, usando métodos nodales para obtener la distribución transitoria del flujo de neutrones (Nikitin et al., 2015). PARCS también se desarrolló principalmente para aplicaciones LWR. Sin embargo, se utiliza como un solucionador de cinética neutrónica 3D en el sistema de código FAST para el análisis de eventos transitorios en LMFR (Mikityuk et al., 2005).

AZNHEX es un código de difusión de neutrones 3D para el análisis de núcleos con geometría hexagonal-z, en el que se ha desarrollado y aplicado un método nodal compuesto para hexágonos prismáticos, cada hexágono prismático representa un subconjunto de combustible (del-Valle-Gallegos et al., 2018). Este código es parte del proyecto “Plataforma AZTLAN”, el cual se desarrolla en México.

### *1.3.2 Procesos de transferencia de calor en los LMFR*

En la tecnología nuclear, el análisis de los procesos de transferencia de calor en el refrigerante y los fluidos de trabajo se conoce como termohidráulico, pero el término correcto es termofluido. En este trabajo, el análisis es del termofluido, debido a que el fluido analizado

es el sodio líquido. A demás, dentro de este análisis se considera la transferencia de calor en la barra de combustible.

El diseño termofluido adecuado para las distribuciones de flujo y temperatura en el núcleo del reactor es esencial para garantizar un funcionamiento seguro y confiable del sistema del reactor. Las condiciones evaluadas deben garantizar la integridad de la barra de combustible, el revestimiento y las estructuras durante los estados operativos normal y transitorio.

Para el diseño de un núcleo de reactor, el modelo de análisis de canal se utiliza con frecuencia. Este modelo, se basa en el análisis de una barra de combustible representativa del núcleo y el fluido refrigerante equivalente a esa barra, considerado como una tubería uniformemente calentada.

En el análisis de subcanal, la temperatura, presión y velocidad en un canal se promedian. Las distribuciones de flujo y temperatura en el núcleo se obtienen modelando y resolviendo los balances de masa, cantidad de movimiento y energía del subcanal (Todreas y Kazimi, 2001). De acuerdo con la literatura especializada (Grötzbach, 2013; Kamide et al., 2015; Roelofs et al., 2013A; Roelofs et al., 2013B; Roelofs et al. 2015; Tenchine, 2010; Velusamy et al., 2010), las aproximaciones de los modelos para describir los procesos de transferencia de calor en el combustible y termofluido en el núcleo del reactor incluyen modelos reducidos, unidimensionales y análisis de dinámica de fluidos computacionales (CFD).

La precisión en el diseño termofluido se vuelve más importante en el diseño de un reactor refrigerado por metales líquidos, porque los ensambles de combustible están configurados de forma muy compacta y el flujo de calor de las barras de combustible es muy alto. En este caso, el análisis de subcanal brinda una buena aproximación al comportamiento del núcleo, sin embargo, se puede perder información de ciertas zonas representativas del núcleo o puntos de interés.

Actualmente, existen diversos códigos que simulan los procesos termofluidos, basados en el análisis de subcanal. Uno de los códigos termohidráulicos más completos es el CATHARE 2 (Tenchine et al., 2012) utilizado por la Comisión de Energía Atómica de Francia (CEA,

por sus siglas en francés), fue desarrollado originalmente para estudios de seguridad de reactores de agua a presión (PWR), pero ha sido recientemente ampliado a SFRs.

SIM-SFR es un código utilizado por el Instituto Tecnológico de Karlsruhe (KIT), con el cual se realiza un análisis de transferencia de calor para una barra de combustible pico y para la barra promedio del núcleo resolviendo los modelos en forma paralela. Ha sido utilizado para modelar sistemas SFR como el Superphenix (Mikityuk y Schikorr, 2013) y sistemas LFR como el ELSY (Malambu et al., 2008) y el LEADER (Grasso et al., 2014).

El código TRACE es el último de una serie de códigos de sistema de mejor estimación desarrollados por la Comisión Regulatoria Nuclear de los Estados Unidos. Este código permite analizar el comportamiento termohidráulico-neutrónico de estado estacionario y transitorio en reactores de agua ligera, sin embargo, se ha modificado para aplicaciones en sistemas LMFR (Bubelis et al., 2012).

El código MATRA-LMR, se desarrolló específicamente para el análisis LMFR, por el Instituto de Investigación en energía Atómica de Korea. MATRA es un código de análisis termohidráulico, basado en el enfoque de subcanales para calcular la entalpía y la distribución de flujo en los elementos del ensamble de varillas de combustible nuclear, para el estado estacionario, así como estados transitorios (Won-Seok et al., 2002).

En trabajos previos, se ha desarrollado un análisis basado en el subcanal, en donde se modelan los núcleos de un reactor SFR y un reactor LFR, simulando transitorios, con el fin de analizar el comportamiento térmico de los refrigerantes. (Pérez-Valseca et al., 2019).

### *1.3.3 Acoplamiento en los LMFR*

El acoplamiento de los modelos neutrónicos y termofluidos representa un desafío. Actualmente, la mayoría de los modelos de análisis de transferencia de calor en los LMFR están acoplados con el modelo puntual de la cinética neutrónica (Bubelis, et al., 2012; Ponciroli et al., 2014a; Ponciroli et al., 2014b, Grasso et al., 2014, Damiani et al., 2015, Lázaro et al., 2014; Pérez-Valseca, 2017), esto debido a su aparente simplicidad para análisis de seguridad del diseño propuesto y simulación dinámica, análisis de estabilidad y enseñanza.

El modelo puntual consiste en dos ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales, una de ellas describe la densidad neutrónica respecto al tiempo y considera neutrones instantáneos y retardados, la segunda ecuación diferencial ordinaria se utiliza para describir la concentración de precursores cuyo decaimiento dan lugar a los neutrones retardados. Este modelo, aparentemente simple, es no lineal por el producto de la reactividad con la densidad neutrónica en uno de sus términos. Las ecuaciones de los precursores pueden variar en su número, dependiendo del número de grupos de precursores considerados.

El acoplamiento de los códigos MATRA-LMR con el código DIF3D (Won et al., 2014) es uno de los pocos acoplamientos realizados con modelos tridimensionales de la cinética neutrónica. Así como el sistema de códigos FAST/PARCS se acopla con el código termohidráulico TRACE (Mikityuk et al., 2005).

## **2. Objetivos**

### **2.1 Objetivo general**

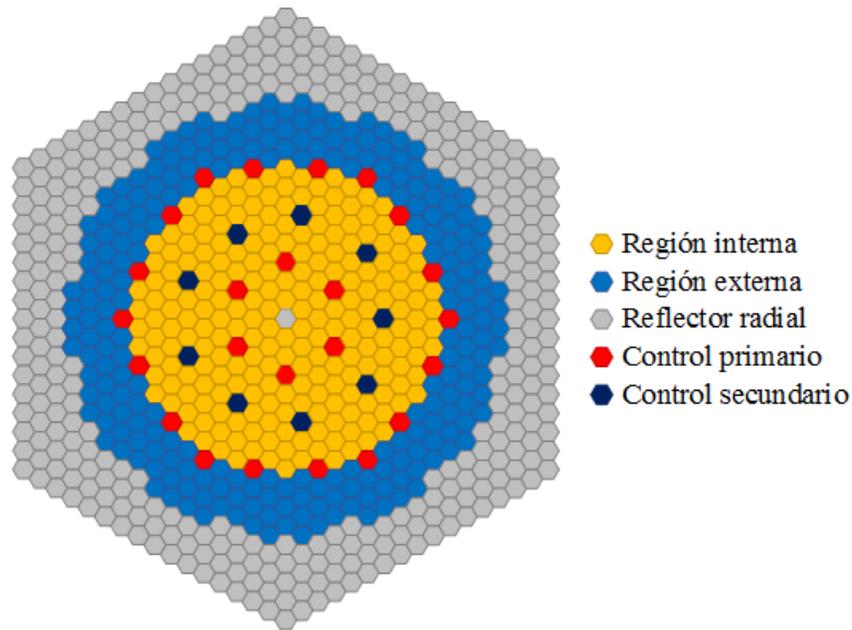
Desarrollar un método de análisis multi-escala para los procesos de transferencia de calor y proponer una metodología de simulación multi-física y multi-escala de los procesos acoplados entre la neutróica y la transferencia de calor de un reactor nuclear rápido enfriado con metales líquidos.

### **2.2 Objetivos específicos**

- Desarrollar un modelo escalado de la transferencia de calor en un reactor enfriado con metales líquidos.
- Aplicar el modelo escalado de transferencia de calor a un ensamble de combustible, utilizando una fuente de calor constante.
- Aplicar el modelo escalado de transferencia de calor al núcleo del reactor, considerando la zona interna, zona externa y la zona de reflectores.
- Describir el modelo neutrónico a partir de la ecuación de difusión de neutrones para describir el proceso neutrónico y la generación de potencia.
- Identificar la retroalimentación requerida entre el modelo escalado de transferencia de calor y el modelo neutrónico, así como las variables determinantes para el acoplamiento.
- Desarrollar el acoplamiento entre el modelo escalado de transferencia de calor y el modelo neutrónico para un núcleo reflectado.
- Proponer un proceso de des-escalamiento a partir del modelo escalado a nivel del núcleo, pasando por el nivel de ensamble y terminado en el nivel de barra de combustible

### 3. Análisis de la transferencia de calor

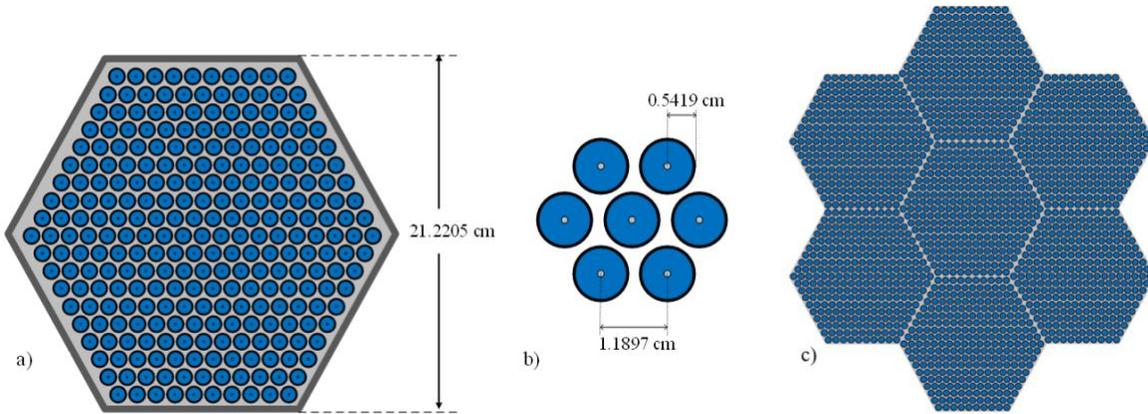
El núcleo del SFR está formado por ensamblajes hexagonales como se ilustra en la Figura 3.1. Se presenta el diseño radial del núcleo; el cual incluye el combustible, los reflectores y las barras de control (Facchini et al., 2017). La zona de combustible se divide en secciones interna y externa; cada uno tiene diferentes concentraciones de uranio-plutonio.



**Figura 3.1.** Corte radial del núcleo del reactor SFR.

El núcleo consta de 453 conjuntos de combustible, 330 reflectores radiales y 33 ensamblajes de control. Las regiones interna y externa tienen 225 y 228 ensamblajes de combustible, respectivamente.

La Figura 3.2 ilustra las dimensiones del conjunto de combustible, la distancia de pin a pin y el radio de la barra de combustible (escala local). El conjunto de combustible representado en la Figura 3.2a muestra 271 barras de combustible mientras que la Figura 3.2b representa la distribución de las barras de combustible.



**Figura 3.2.** a) Ensamble hexagonal de combustible, b) Distribución de los pines de combustible, c) Arreglo de ensambles de combustible (Modificado de Facchini et al., 2017).

En la Figura 3.2c se presenta un conjunto de ensambles. La disposición representada puede verse como un medio poroso con el volumen representativo definido, que coincide con una celda unitaria que representa todo el sistema.

### 3.1 Modelo matemático local

Las ecuaciones locales que se presentan a continuación consideran los procesos de transporte de calor en la barra de combustible, incluido el fluido térmico que compone el metal refrigerante. El modelo matemático directo que representa la aproximación local para describir el subcanal de un combustible de ensamblaje está constituido por un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales (PDE), es decir

*Fase sólida (combustible)*

$$(\rho C_p)_f \frac{\partial T_f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla T_f(\mathbf{r}, t)) + q'''(\mathbf{r}, t) \quad (0.1)$$

En donde  $q'''(\mathbf{r}, t)$  es el término fuente de calor, proveniente de los procesos nucleares que se desarrollan en la barra de combustible.

*Fase líquida (metal líquido refrigerante)*

$$(\rho Cp)_m \left( \frac{\partial T_m(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}_m T_m(\mathbf{r}, t)) \right) = \nabla \cdot (k_m \nabla T_m(\mathbf{r}, t)) \quad (0.2)$$

Condiciones de frontera

$$T_f(\mathbf{r}, t) = T_m(\mathbf{r}, t), \quad \text{en } A_{fm} \quad (0.3)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla T_f(\mathbf{r}, t) = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla T_m(\mathbf{r}, t), \quad \text{en } A_{fm} \quad (0.4)$$

Condiciones iniciales

$$T_f = T_{f0}(\mathbf{r}), \quad T_m = T_{m0}(\mathbf{r}) \quad \text{en } t = 0 \quad (0.5)$$

En donde  $A_{fm}$  es la superficie interfacial entre la barra de combustible (fase sólida) y el metal líquido (fase líquida). El subíndice  $f$  representa la barra de combustible y  $m$  el metal líquido refrigerante. Inicialmente, el término fuente es considerado como la potencia volumétrica, la cual está dado por

$$q''' = \frac{P_0}{V_f} \quad (0.6)$$

Donde  $P_0$  es la potencia nominal térmica y  $V_f$  es el volumen del combustible. Posteriormente en este trabajo, el término fuente será considerado como una función de los procesos neutrónicos.

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

$$T_m = T_m(\mathbf{r}, t) \quad \text{en } A_m \quad (0.7)$$

En donde  $A_m$  es el área de entrada del metal líquido.

Los procesos de acoplamiento y retroalimentación en el núcleo del reactor son: el proceso neutrónico requiere la información de la barra de combustible ( $T_f$ ) y la temperatura del metal líquido ( $T_m$ ) para calcular la reactividad y consecuentemente el término fuente dado por (0.6). Después el término fuente ( $q'''$ ) es usado para recalculer la temperatura de combustible, así como la del metal líquido. Computacionalmente esto representa un flujo recursivo de información.

### 3.2 Modelo escalado

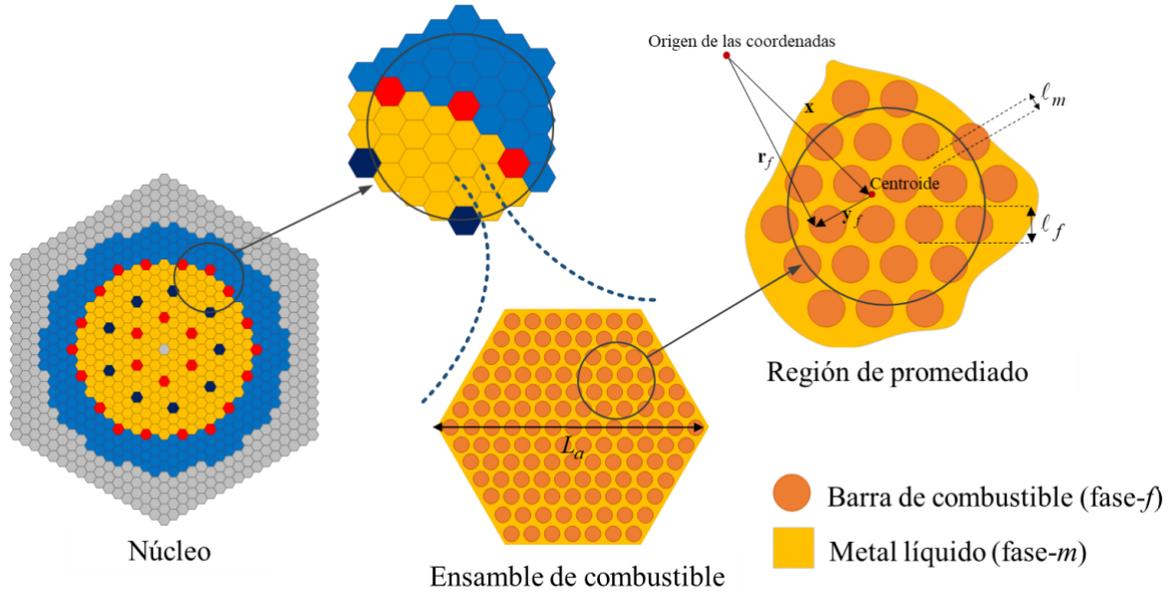
Dentro del marco de promediado volumétrico, el núcleo del reactor nuclear se trata como un medio poroso jerárquico, en donde se parte de una escala a nivel de pin, escalando a nivel del núcleo (ver Figura 3.2). De esta manera, las ecuaciones gobernantes válidas en la escala de pines de combustible se suavizan espacialmente, y la ecuación final escalada se obtiene aplicando el siguiente procedimiento:

- Promediado de las ecuaciones locales para cada fase, aplicando el operador superficial promedio.
- Aplicar la descomposición espacial a las variables locales.
- Obtener un problema no cerrado en términos de cantidades medias y desviaciones espaciales.
- Definición de desviaciones espaciales y su solución formal, cuya estructura matemática deriva en los problemas de cerradura.
- Resolver numéricamente los problemas de cerradura y estimar los coeficientes efectivos involucrados en las ecuaciones de transporte de calor escaladas.

Es importante señalar que se decide obtener un modelo de dos ecuaciones en no equilibrio térmico. En este caso, es importante obtener la temperatura de ambas fases de manera independiente, ya que por cuestiones de seguridad se debe monitorear la temperatura del combustible y la temperatura del refrigerante. A continuación, se presenta la aplicación del método de promedio volumétrico para el escalamiento de las ecuaciones locales.

### 3.2.1 Escalamiento de las ecuaciones locales

Para obtener las ecuaciones locales escaladas, se introduce la región de promediado (o volumen elemental representativo, REV), presentado en la Figura 3.3. Observe que  $V = V_f + V_m$ , donde  $V_f$  es el volumen de las barras de combustible y  $V_m$  es el volumen de metal líquido.



**Figura 3.3.** Región de promediado en el núcleo del reactor.

Las longitudes características del sistema, presentadas en la Figura 3.3 se relacionan mediante la expresión

$$l_f, l_m \ll V^{1/3} \ll L_a \quad (0.8)$$

donde  $L_a$  es la longitud característica del ensamble del combustible,  $l_f$  y  $l_m$  son las longitudes características de la barra del combustible y del metal líquido. En este caso,  $l_f$  y  $l_m$  tienen el mismo orden de magnitud. De acuerdo con la teoría de promediado volumétrico (VAM, por sus siglas en inglés), el total cumplimiento de la restricción de escalas, dado por la Ec. (0.8), garantiza que las cantidades promediadas tengan un comportamiento aceptable,

es decir, es similar a la teoría del continuo pero aplicada a una escala muchas veces mayor. La restricción (0.8) constituye una condición de escalamiento, establecida por Wood (2009).

Para promediar el modelo local, se introduce el operador de *promediado superficial* de una propiedad continua, en este caso esta propiedad es la temperatura  $T_\gamma$  ( $\gamma = f, m$ ). La temperatura de cada fase, definida en términos del promedio superficial está dada por la expresión

$$\langle T_\gamma \rangle_\gamma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \int_{V_\gamma} T_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (0.9)$$

El promedio intrínseco para cada fase está definido como

$$\langle T_\gamma \rangle^\gamma(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V_\gamma} \int_{V_\gamma} T_\gamma(\mathbf{x} + \mathbf{y}_\gamma, t) dV \quad (0.10)$$

La evaluación de la cantidad promedio, ya sea superficial o intrínseca es realizada en el centroide ( $\mathbf{x}$ ) de la región de promediado ( $V$ ) (ver Figura 3.3). El promedio superficial y el promedio intrínseco están relacionados por la Ec. (3.11).

$$\langle T_\gamma \rangle = \varepsilon_\gamma \langle T_\gamma \rangle^\gamma \quad (0.11)$$

donde  $\varepsilon_\gamma$  es la fracción volumen de la fase  $\gamma$ , dada por  $\varepsilon_\gamma = V_\gamma / V$ , dentro del dominio de promediado.

Aplicando el operador de promediado volumétrico a las ecuaciones locales se obtiene la ecuación promedio (Zhou et al., 2011). Además de las definiciones de promedio de volumen para el procedimiento de aumento de escala, se utiliza el teorema de promedio espacial (Howes y Whitaker, 1985). Este teorema es útil ya que se encuentran promedios de gradientes y se necesita convertirlos en gradientes de promedios (Anderson y Jackson, 1967; Whitaker, 1967; Slattery, 1967; Valdés-Parada, 2010; Aguilar- Madera et al., 2011).

La aplicación sistemática del método del volumen promedio al modelo local se presenta a continuación. Aplicando el operador de promedio superficial a las ecuaciones locales y considerando que las propiedades físicas  $(\rho Cp)$  son constantes dentro de la región de promediado, se obtiene

*Fase sólida*

$$\underbrace{(\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle_f}{\partial t}}_A = \underbrace{\langle \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) \rangle_f}_B + \underbrace{\langle q'' \rangle_f}_C \quad (0.12)$$

*Fase líquida*

$$\underbrace{(\rho Cp)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle_m}{\partial t}}_A + \underbrace{(\rho Cp)_m \langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_m T_m) \rangle_m}_B = \underbrace{\langle \nabla \cdot (k_m \nabla T_m) \rangle_m}_C \quad (0.13)$$

Desarrollando la aplicación del promedio a la ecuación de la fase sólida (0.12), se toma cada término y se trabaja de manera independiente.

Para el término “A” se aplica la relación entre promedio superficial y promedio intrínseco, en donde se considera que  $\varepsilon_f$  no es función del tiempo

$$(\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle_f}{\partial t} = \varepsilon_f (\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle_f^f}{\partial t} \quad (0.14)$$

Introduciendo el Teorema de promediado espacial, el cual está definido por la Ec. (3.15)

$$\langle \nabla \psi_\lambda \rangle = \nabla \langle \psi_\lambda \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\lambda\beta}} \mathbf{n}_{\lambda\beta} \psi_\lambda dA \quad (0.15)$$

Aplicando el Teorema al término “B” de (0.12), se tiene

$$\langle \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) \rangle_f = \nabla \cdot \underbrace{\langle k_f \nabla T_f \rangle_f}_D + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla T_f dA \quad (0.16)$$

Ahora, aplicando el (0.15) en el término “D” de la Ec. (0.16), se obtiene

$$\langle k_f \nabla T_f \rangle_f = k_f \langle \nabla T_f \rangle_f = k_f \left( \nabla \langle T_f \rangle_f + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} T_f dA \right) \quad (0.17)$$

Recordando la relación de promedio superficial y promedio intrínseco (0.11), se obtiene

$$\nabla \langle T_f \rangle_f = \nabla \left( \varepsilon_f \langle T_f \rangle^f \right) = \varepsilon_f \nabla \langle T_f \rangle^f + \langle T_f \rangle^f \nabla \varepsilon_f \quad (0.18)$$

Por lo tanto, el término “B” de (0.12) queda de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (k_f \nabla T_f) \rangle_f &= \nabla \cdot \left[ \varepsilon_f k_f \nabla \langle T_f \rangle^f + k_f \langle T_f \rangle^f \nabla \varepsilon_f + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} T_f dA \right] \\ &+ \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla T_f dA \end{aligned} \quad (0.19)$$

Para el término “C” de (0.12), el promedio del término fuente queda

$$\langle q^m \rangle_f = \varepsilon_f \langle q^m \rangle^f \quad (0.20)$$

Sustituyendo (0.14), (0.19) y (0.20) en la ecuación de la fase sólida (0.12), se tiene

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} &= \nabla \cdot \left[ \varepsilon_f k_f \nabla \langle T_f \rangle^f + k_f \langle T_f \rangle^f \nabla \varepsilon_f + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} T_f dA \right] \\ &+ \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla T_f dA + \varepsilon_f \langle q^m \rangle^f \end{aligned} \quad (0.21)$$

Tomando en cuenta que (Whitaker, 1999)

$$\nabla \varepsilon_f = -\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} dA \quad (0.22)$$

Y aplicándolo en el segundo término dentro del operador  $\nabla$  de la ecuación (0.21)

$$k_f \langle T_f \rangle^f \nabla \varepsilon_f = -\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \langle T_f \rangle^f dA \quad (0.23)$$

Por lo tanto, la ecuación para la *fase sólida* (0.21), queda como

$$\varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_f k_f \nabla \langle T_f \rangle^f + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} (T_f - \langle T_f \rangle^f) dA \right] + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla T_f dA + \varepsilon_f \langle q'' \rangle^f \quad (0.24)$$

Ahora bien, desarrollando el escalamiento para la *fase líquida* (Ec. (0.13)), se aplica la relación entre el promedio superficial y el promedio intrínseco a término “A” de la ecuación, recordando que  $\varepsilon_m$  es independiente del tiempo

$$(\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle_m}{\partial t} = \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} \quad (0.25)$$

Para el término “B”, se aplica el teorema de promediado espacial

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_m T_m) \rangle_m = \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_m T_m \rangle_m + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \mathbf{v}_m T_m dA \quad (0.26)$$

La fase  $f$  es considerada como rígida, un sólido impermeable, imponiendo la condición

$$\mathbf{n}_{mf} \cdot \mathbf{v}_m = 0 \text{ en } A_{fm} \quad (0.27)$$

El término “B” queda como

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_m T_m) \rangle_m = \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_m T_m \rangle_m \quad (0.28)$$

Para el término “C” se aplica el teorema de promediado espacial (0.15)

$$\langle \nabla \cdot (k_m \nabla T_m) \rangle_m = \underbrace{\nabla \cdot \langle k_m \nabla T_m \rangle_m}_D + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla T_m dA \quad (0.29)$$

Aplicando nuevamente el teorema al término “D” de la ecuación anterior, se tiene

$$\langle k_m \nabla T_m \rangle_m = k_m \nabla \langle T_m \rangle_m + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} T_m dA \quad (0.30)$$

Recordando la relación de promedio superficial y promedio intrínseco (0.11), se obtiene que

$$\nabla \langle T_m \rangle_m = \nabla \left( \varepsilon_m \langle T_m \rangle^m \right) = \varepsilon_m \nabla \langle T_m \rangle^m + \langle T_m \rangle^m \nabla \varepsilon_m \quad (0.31)$$

El término “C” queda

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (k_m \nabla T_m) \rangle_m &= \nabla \cdot \left( \varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m + k_m \langle T_m \rangle^m \nabla \varepsilon_m + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} T_m dA \right) \\ &+ \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla T_m dA \end{aligned} \quad (0.32)$$

Tomando en cuenta que (Whitaker, 1999)

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

Y aplicándolo en el segundo término dentro del operador  $\nabla$  de la ecuación (0.32)

$$k_m \langle T_m \rangle^m \nabla \varepsilon_m = -\frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \langle T_m \rangle^m dA \quad (0.33)$$

La ecuación promediada para la *fase líquida* queda

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C_p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C_p)_m \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_m T_m \rangle_m &= \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla T_m dA \\ + \nabla \cdot \left[ \varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} (T_m - \langle T_m \rangle^m) dA \right] \end{aligned} \quad (0.34)$$

donde  $A_{fm}$  representa la superficie interfacial dentro de la región de promediado,  $\mathbf{n}_{fm}$  es el vector normal unitario apuntando de la fase sólida a la fase líquida, además  $\mathbf{n}_{fm} = -\mathbf{n}_{mf}$ . En las Ecs. (0.24)-(0.34) se considera que las propiedades físicas (densidad, conductividad y calor específico) son constantes dentro de la región de promediado. La variable local  $T_\gamma$  puede ser representada como una descomposición del promedio intrínseco  $\langle T_\gamma \rangle^\gamma$ , y de las desviaciones espaciales,  $\tilde{T}_\gamma$  (Gray, 1975). Esta descomposición se aplica para ambas fases, es decir

$$T_f = \langle T_f \rangle^f + \tilde{T}_f \quad (0.35)$$

$$T_m = \langle T_m \rangle^m + \tilde{T}_m \quad (0.36)$$

En la fase líquida, existe un término convectivo que incluye la velocidad del metal. Esta variable también se descompone de la siguiente manera

$$\mathbf{v}_m = \langle \mathbf{v}_m \rangle^m + \tilde{\mathbf{v}}_m \quad (0.37)$$

Aplicando la descomposición especial en las Ecs. (0.24) y (0.34), se obtiene para la fase sólida y la fase líquida, respectivamente

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_f k_f \nabla \langle T_f \rangle^f + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \left( \langle T_f \rangle^f + \tilde{T}_f - \langle T_f \rangle^f \right) dA \right] \\ + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \left( \langle T_f \rangle^f + \tilde{T}_f \right) dA + \varepsilon_f \langle q^m \rangle^f \end{aligned} \quad (0.38)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} = -(\rho C p)_m \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_m \rangle^m + \tilde{\mathbf{v}}_m \right) \left( \langle T_m \rangle^m + \tilde{T}_m \right) \\ + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \left( \langle T_m \rangle^m + \tilde{T}_m \right) dA \\ + \nabla \cdot \left[ \varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \left( \langle T_m \rangle^m + \tilde{T}_m - \langle T_m \rangle^m \right) dA \right] \end{aligned} \quad (0.39)$$

De acuerdo a la consideración de que la temperatura promedio intrínseca se considera constante en la superficie interfacial, se tiene

$$k_f \nabla \langle T_f \rangle^f \left( \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} dA \right) = 0, \quad k_m \nabla \langle T_m \rangle^m \left( \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} dA \right) = 0 \quad (0.40)$$

Y recordando que  $\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} dA = -\nabla \varepsilon_f$  y  $\frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} dA = -\nabla \varepsilon_m$ , además,  $\varepsilon_f$  y  $\varepsilon_m$  son constantes en la región de promediado, entonces  $\nabla \varepsilon_f = 0$  y  $\nabla \varepsilon_m = 0$  lo que implica que

$$\frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \nabla \langle T_f \rangle^f dA = 0, \quad \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \nabla \langle T_m \rangle^m dA = 0 \quad (0.41)$$

Con esto, se obtienen las ecuaciones escaladas para cada fase

*Fase sólida*

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho Cp)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \varepsilon_f \nabla \langle T_f \rangle^f) + \nabla \cdot \left( \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \\ + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA + \varepsilon_f \langle q^m \rangle^f \end{aligned} \quad (0.42)$$

*Fase líquida*

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho Cp)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho Cp)_m \nabla \cdot (\varepsilon_m \langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m) = -(\rho Cp)_m \nabla \cdot \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \tilde{T}_m \rangle_m \\ + \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \tilde{T}_m dA + \nabla \cdot (\varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m) + \nabla \cdot \left( \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \tilde{T}_m dA \right) \end{aligned} \quad (0.43)$$

En estas ecuaciones escaladas, se cumplen las siguientes restricciones sobre el promedio de las desviaciones espaciales,

$$\langle \tilde{\mathbf{v}}_m \rangle_m = \mathbf{0}, \quad \langle \tilde{T}_m \rangle_m = \mathbf{0}, \quad \langle \tilde{T}_f \rangle_f = \mathbf{0} \quad (0.44)$$

Las cuales resultan de las restricciones de escala de longitud antes mencionadas.

El conjunto de ecuaciones escaladas dadas por (0.42) y (0.43), tiene un mayor número de variables desconocidas o incógnitas ( $\langle T_f \rangle^f, \langle T_m \rangle^m, \tilde{T}_f, \tilde{T}_m$ ) que las ecuaciones locales. Las variables de desviación  $\tilde{T}_f$  y  $\tilde{T}_m$  deben definirse para obtener un conjunto cerrado de ecuaciones. La determinación de las funciones de desviación espacial en términos de las cantidades promedio correspondientes se conoce como cerradura. Los problemas de cerradura complementan el grado de libertad en la aplicación del método de promediado volumétrico (VAM), es decir, la ampliación a través del VAM genera más variables que ecuaciones; las ecuaciones que cuantifican las desviaciones de las variables promedio

constituyen las cerraduras, por lo que el problema matemático está bien planteado. El proceso de ampliación que se utiliza en este trabajo, para integrar información de escalas de mayor resolución en escalas donde el dominio puede considerarse homogéneo, utiliza la 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 no es local. Problemas no locales o problemas de heterogeneidad en evolución han sido estudiados por Quintard y Whitaker (1998), Cushman (1990) y Goyeau et al. (1997) entre otros, quiénes encontraron que el análisis de este tipo de problemas es extremadamente complejo y sugirió evitarlos siempre que sea posible.

### 3.2.2 Solución formal para las desviaciones de la temperatura

Por inspección de las Ecs. (0.42) y (0.43) se observa que no están cerrados ya que contienen variables adicionales; las desviaciones de temperatura  $\tilde{T}_m$  y  $\tilde{T}_f$ . Se obtiene un conjunto de ecuaciones cerradas si dichas desviaciones de temperatura se escriben en términos de cantidades promedio. Para obtener las desviaciones espaciales de la temperatura, se deben buscar sus soluciones, ya sean analíticas, numéricas o en términos de expresiones generales (soluciones formales).

Para obtener estas soluciones, en primer lugar, se trabaja en la ecuación local de la fase sólida como a continuación se presenta. Las ecuaciones de cerradura surgen de la sustitución de la descomposición espacial Ec. (0.35) en la ecuación local (0.1), obteniendo la Ec. (3.45).

$$(\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + (\rho C p)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = \nabla \cdot \left( k_f \nabla \langle T_f \rangle^f \right) + \nabla \cdot \left( k_f \nabla \tilde{T}_f \right) + \langle q''' \rangle^f + \tilde{q}''' \quad (0.45)$$

Posteriormente, la Ec. (0.45) se resta a la Ec. (0.42), de esta manera se obtiene una expresión para la desviación de temperatura [Ec. (3.46)], la cual es una variable desconocida. Para el término fuente se considera que las desviaciones  $\tilde{q}'''$  son despreciables para los primeros tiempos cuando los perfiles de energía no se ven afectados por el consumo de material fisionable.

$$\begin{aligned}
(\rho C p)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = & \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) - \varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left( \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \\
& - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA
\end{aligned} \tag{0.46}$$

La ecuación (0.46) se puede ser simplificada siempre que se satisfaga la siguiente desigualdad

$$\varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left( \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) \ll \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) \tag{0.47}$$

que se apoya en el siguiente análisis de órdenes de magnitud

$$\nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) = \mathbf{O} \left( \frac{k_f \tilde{T}_f}{\ell_f^2} \right) \tag{0.48}$$

$$\varepsilon_f^{-1} \nabla \cdot \left( \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \tilde{T}_f dA \right) = \mathbf{O} \left( \frac{\varepsilon_f^{-1} k_f \tilde{T}_f}{\ell_f L_a} \right) \tag{0.49}$$

como se describe en la Ec. (0.8),  $\ell_f \ll L_a$ , entonces la cantidad expresada en (0.48) es mucho mayor que la de (0.49). Con esta simplificación, la ecuación para la temperatura de la fase sólida se reduce a

$$(\rho C p)_f \frac{\partial \tilde{T}_f}{\partial t} = \nabla \cdot (k_f \nabla \tilde{T}_f) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \tilde{T}_f dA \tag{0.50}$$

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

$$\begin{aligned}
(\rho C p)_m \frac{\partial \tilde{T}_m}{\partial t} + (\rho C p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \tilde{T}_m) \\
+ (\rho C p)_m \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{v}}_m \langle T_m \rangle^m) = \nabla \cdot (k_m \nabla \tilde{T}_m) - \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \tilde{T}_m dA
\end{aligned} \tag{0.51}$$

Las condiciones de frontera interfaciales, Ecs. (0.3) y (0.4), ahora se reescriben sustituyendo la descomposición espacial para completar el problema del valor límite para las desviaciones de temperatura

$$\tilde{T}_f = \tilde{T}_m + \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (0.52)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \tilde{T}_f = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \tilde{T}_m + \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \langle T_m \rangle^m - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \langle T_f \rangle^f \quad \text{en} \quad A_{fm} \quad (0.53)$$

Las ecuaciones (0.52) y (0.53) contienen las fuentes macroscópicas asociadas a las cantidades promedio  $\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f$ ,  $\nabla \langle T_m \rangle^m$  y  $\nabla \langle T_f \rangle^f$ . Si tales cantidades son nulas, la solución trivial ( $\tilde{T}_m, \tilde{T}_f = 0$ ) satisface el problema del valor en la frontera 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 límites dado por las Ecs. (0.50)- (0.53), 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, definidas en (0.8). De esta manera, las soluciones generales, denominadas como soluciones formales para las desviaciones de temperatura son

$$\tilde{T}_f = \mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m) \quad (0.54)$$

$$\tilde{T}_m = \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m (\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f) \quad (0.55)$$

En donde  $\mathbf{b}_{ff}, \mathbf{b}_{fm}, \mathbf{b}_{mf}, \mathbf{b}_{mm}, s_f, s_m$  son las llamadas variables de cerradura, las cuales representan integrales de las funciones de Green asociadas. Las variables de cerradura se obtienen resolviendo los correspondientes problemas de valores a la frontera que se obtienen al sustituir las soluciones para las desviaciones de temperatura en el modelo de ecuaciones gobernantes de las desviaciones.

### 3.2.3 Problemas de cerradura

Los problemas de cerradura se obtienen sustituyendo las soluciones de las desviaciones de temperatura [Ecs. (0.54)-(0.55)] en las ecuaciones gobernantes de las desviaciones [Ecs. (0.50)-(0.51)], y agrupando de acuerdo del término fuente correspondiente, considerando las ecuaciones en estado cuasi estacionario.

Los problemas de cerradura se asocian a las variables  $\nabla\langle T_f \rangle^f, \nabla\langle T_m \rangle^m, (\langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m)$ , de esta manera se construyen tres problemas de cerradura con sus correspondientes condiciones de frontera.

#### **Problema de cerradura 1**

En la región-  $f$  (combustible/sólido)

$$\mathbf{0} = \nabla \cdot (k_f \nabla \mathbf{b}_{ff}) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ff} dA \quad (0.56)$$

En la región-  $m$  (metal líquido)

$$\mathbf{0} = -(\rho C p)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \mathbf{b}_{mf}) + \nabla \cdot (k_m \nabla \mathbf{b}_{mf}) - \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mf} dA \quad (0.57)$$

En la frontera -  $fm$

$$\mathbf{b}_{ff} = \mathbf{b}_{mf} \quad (0.58)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \mathbf{b}_{ff} = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \mathbf{b}_{mf} - \mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \mathbf{I} \quad (0.59)$$

Así mismo, se consideran las condiciones de periodicidad de las variables de cerradura y restricciones  $\langle \mathbf{b}_{ff} \rangle, \langle \mathbf{b}_{mf} \rangle \approx \mathbf{0}$ .

#### **Problema de cerradura 2**

En la región-  $f$  (combustible/sólido)

$$\mathbf{0} = \nabla \cdot (k_f \nabla \mathbf{b}_{fm}) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{fm} dA \quad (0.60)$$

En la región-  $m$  (metal líquido)

$$\mathbf{0} = -\left((\rho Cp)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m \mathbf{b}_{mm}) + \tilde{\mathbf{v}}_m\right) + \nabla \cdot (k_m \nabla \mathbf{b}_{mm}) - \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mm} dA \quad (0.61)$$

En la frontera -  $fm$

$$\mathbf{b}_{fm} = \mathbf{b}_{mm} \quad (0.62)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla \mathbf{b}_{fm} = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla \mathbf{b}_{mm} + \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \mathbf{I} \quad (0.63)$$

Así mismo, se consideran las condiciones de periodicidad de las variables de cerradura y restricciones  $\langle \mathbf{b}_{fm} \rangle, \langle \mathbf{b}_{mm} \rangle \approx \mathbf{0}$ .

### ***Problema de cerradura 3***

En la región-  $f$  (combustible/sólido)

$$0 = \nabla \cdot (k_f \nabla s_f) - \varepsilon_f^{-1} \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \quad (0.64)$$

En la región-  $m$  (metal líquido)

$$0 = (\rho Cp)_m \nabla \cdot (\mathbf{v}_m s_m) - \nabla \cdot (k_m \nabla s_m) + \varepsilon_m^{-1} \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \quad (0.65)$$

En la frontera -  $fm$

$$s_f = s_m - 1 \quad (0.66)$$

$$\mathbf{n}_{fm} \cdot k_f \nabla s_f = \mathbf{n}_{fm} \cdot k_m \nabla s_m \quad (0.67)$$

Así mismo, se consideran las condiciones de periodicidad de las variables de cerradura y restricciones  $\langle s_f \rangle, \langle s_m \rangle \approx 0$ .

### 3.2.4 Ecuación de transporte de calor escalada

Como último paso para obtener las ecuaciones de transporte escaladas, se sustituyen las soluciones formales para las desviaciones [Ec. (0.54) y (0.55)], en las Ecs. (0.50) y (0.51), para la fase sólida y la fase líquida respectivamente, obteniendo ecuaciones que están en función de las variables de cerradura.

#### Fase sólida

$$\begin{aligned} \varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} &= k_f \varepsilon_f \nabla \cdot (\nabla \langle T_f \rangle^f) + \langle q^m(\mathbf{r}, t) \rangle^f \\ &+ \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \left( \mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f \left( \langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) \right) dA \\ &+ \nabla \cdot \left( \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \left( \mathbf{b}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{b}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + s_f \left( \langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) \right) dA \right) \end{aligned} \quad (0.68)$$

#### Fase líquida

$$\begin{aligned} \varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} &+ (\rho C p)_m \varepsilon_m \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m \right) = \nabla \cdot \left( \varepsilon_m k_m \nabla \langle T_m \rangle^m \right) \\ &- (\rho C p)_m \nabla \cdot \left\langle \tilde{\mathbf{v}}_m \left( \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left( \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) \right\rangle \\ &+ \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \left( \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left( \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) dA \\ &+ \nabla \cdot \left( \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \left( \mathbf{b}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{b}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - s_m \left( \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \right) dA \right) \end{aligned} \quad (0.69)$$

Las Ecs. (0.68) y (0.69) contienen términos que pueden ser agrupados de acuerdo a su naturaleza, ya sea conductiva o convectiva, además de las variables de cerradura. Al realizar la agrupación de los términos es posible obtener los coeficientes escalados efectivos, los cuales contienen la información de los coeficientes locales y las variables de cerradura. La

Ec. (3.70) es la ecuación escalada cerrada para la fase sólida, en la cual se establecen los siguientes coeficientes efectivos  $\mathbf{K}_{ff}, \mathbf{K}_{fm}, \mathbf{u}_{ff}, \mathbf{u}_{fm}, a_v h$ .

$$\varepsilon_f (\rho C p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} - \mathbf{u}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - \mathbf{u}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m = \nabla \cdot \left[ \mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m \right] - a_v h \left( \langle T_f \rangle^f - \langle T_m \rangle^m \right) + \langle q^m(\mathbf{r}, t) \rangle^f \quad (0.70)$$

Los coeficientes efectivos escalados para la fase sólida, están dados por las Ecs. (3.71)-(3.75), lo cual es consistente con el trabajo presentado por Quintard y Whitaker (1998).

$$\mathbf{K}_{ff} = k_f \left( \varepsilon_f \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{ff} dA \right) \quad (0.71)$$

$$\mathbf{K}_{fm} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \mathbf{b}_{fm} dA \quad (0.72)$$

$$\mathbf{u}_{ff} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ff} dA + \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \quad (0.73)$$

$$\mathbf{u}_{fm} = \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla \mathbf{b}_{fm} dA - \frac{k_f}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} s_f dA \quad (0.74)$$

$$a_v h = k_f \left( \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \right) = -k_m \left( \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \right) \quad (0.75)$$

De manera análoga, agrupando los términos de la ecuación (0.69), se obtiene la ecuación escalada cerrada para la fase líquida, dada por

$$\varepsilon_m (\rho C p)_m \frac{\partial \langle T_m \rangle^m}{\partial t} + (\rho C p)_m \varepsilon_m \nabla \cdot \left( \langle \mathbf{v}_m \rangle^m \langle T_m \rangle^m \right) = \mathbf{u}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{u}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \nabla \cdot \left[ \mathbf{K}_{mm} \cdot \nabla \langle T_m \rangle^m + \mathbf{K}_{mf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f \right] - a_v h \left( \langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f \right) \quad (0.76)$$

En donde los coeficientes efectivos  $\mathbf{K}_{mm}, \mathbf{K}_{mf}, \mathbf{u}_{mm}, \mathbf{u}_{mf}, a_v h$  están dados por

$$\mathbf{K}_{mm} = k_m \left( \varepsilon_m \mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mm} dA \right) - (\rho Cp)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mm} \rangle \quad (0.77)$$

$$\mathbf{K}_{mf} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{mf} \mathbf{b}_{mf} dA - (\rho Cp)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m \mathbf{b}_{mf} \rangle \quad (0.78)$$

$$\mathbf{u}_{mm} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mm} dA - \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA + (\rho Cp)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \quad (0.79)$$

$$\mathbf{u}_{mf} = \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla \mathbf{b}_{mf} dA + \frac{k_m}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} s_m dA - (\rho Cp)_m \langle \tilde{\mathbf{v}}_m s_m \rangle \quad (0.80)$$

$$a_v h = k_m \left( \frac{1}{V} \int_{A_{mf}} \mathbf{n}_{mf} \cdot \nabla s_m dA \right) = -k_f \left( \frac{1}{V} \int_{A_{fm}} \mathbf{n}_{fm} \cdot \nabla s_f dA \right) \quad (0.81)$$

La solución a los problemas de cerradura en una celda unitaria específica lleva a mapear las variables de cerradura  $\mathbf{b}_{ff}$ ,  $\mathbf{b}_{fm}$ ,  $\mathbf{b}_{mf}$ ,  $\mathbf{b}_{mm}$ ,  $s_f$  y  $s_m$  en las ecuaciones anteriores, y a través de estas variables de cerradura, a su vez, se puede obtener los coeficientes efectivos  $\mathbf{K}_{ff}$ ,  $\mathbf{K}_{fm}$ ,  $\mathbf{K}_{mf}$ ,  $\mathbf{K}_{mm}$ ,  $\mathbf{u}_{ff}$ ,  $\mathbf{u}_{fm}$ ,  $\mathbf{u}_{mf}$ ,  $\mathbf{u}_{mm}$  y  $a_v h$  (Perez-Valseca et al., 2020).

### 3.3 Estimación numérica de los coeficientes efectivos

La estimación numérica de los coeficientes efectivos definidos en las Ecs. (0.70) y (0.76) se realiza mediante la solución de los problemas de cerradura presentados en la Sección 3.2.3. En esta parte, se utiliza el software COMSOL Multiphysics 4.3b, para resolver los campos de velocidad y los problemas de cerradura.

#### 3.3.1 Modelo de velocidad del refrigerante

La velocidad del fluido se calcula resolviendo el modelo de las ecuaciones promediadas de Navier-Stokes (RANS, por sus siglas en inglés). Las ecuaciones tipo RANS se obtienen mediante el promediado de las ecuaciones en una escala mayor que el de la turbulencia. Por lo tanto, las ecuaciones resultantes describen la velocidad y presión en el flujo. El modelo RANS está dado por la Ec. (3.82).

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[ -p \mathbf{I} + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \right] + \mathbf{F} - \nabla \cdot \overline{(\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}')} \quad (0.82)$$

donde  $\mathbf{u}$  es el vector de velocidad del fluido,  $\rho$  la densidad,  $p$  la presión,  $\mu$  la viscosidad,  $\mathbf{F}$  es la fuerza externa y  $\overline{(\rho \mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'')}$  representa el vector de esfuerzos de Reynolds. Éste último posee 6 componentes por ser simétrico. El proceso de calcular el tensor de esfuerzos de Reynolds es lo que se conoce como modelado de la turbulencia.

Para modelar el flujo turbulento, la versión 4.3a de COMSOL ofrece varios modelos, cada uno de ellos es en realidad un modelo de cierre dentro del modelo tipo RANS, o bien, modelos para la viscosidad turbulenta.

En el caso del SFR, el sodio líquido es un fluido incompresible y turbulento, con un número de Reynolds arriba de 50,000 (Roelofs et al., 2013). La velocidad de entrada del fluido es de 5 m/s (velocidad de diseño de SFR).

El modelo de turbulencia para este trabajo es el  $\kappa - \varepsilon$ , debido a que se tiene un número de Reynolds alto. Es el modelo de turbulencia más común y es usado con frecuencia en aplicaciones industriales por su robustez y por su bajo costo computacional (COMSOL, 2021). A pesar que no se desempeña bien en casos de fuertes gradientes de presión adversa. Consiste en resolver dos ecuaciones adicionales: para el transporte de energía cinética turbulenta  $\kappa$  (que determina la energía en la turbulencia) y para la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta  $\varepsilon$  (que determina la escala de la turbulencia). Esto le permite considerar efectos en la historia del flujo como convección y difusión de la energía turbulenta (CFD, 2021). Se usa para flujos a alto número de Reynolds, sea en régimen incompresible o compresible con  $Ma < 0.3$ . Sin embargo, este modelo ha sido poco explorado para diversos fluidos, como los metales líquidos (Manservigi y Menghini, 2015).

Con el módulo de flujo turbulento de COMSOL Multiphysics, se resuelven los perfiles de velocidad utilizados en la solución de los problemas de cerradura, obteniendo la velocidad promedio y la desviación de velocidad.

### 3.3.2 Solución de los problemas de cerradura

Los problemas de cerradura se resuelven en una celda unitaria representativa del subcanal. La celda se programa en el software COMSOL Multiphysics 4.3b, el cual se basa en el método de elementos finitos. Los problemas de cerradura se toman como un conjunto de EDP (Ecuaciones Diferenciales Parciales) con condiciones de contorno. Varios aspectos numéricos se mantuvieron por configuración predeterminada dentro del entorno de COMSOL, los elementos de los subdominios consisten en numerosos tetraedros que se refinan automáticamente cerca de los límites con el objetivo de calcular mejor las derivadas. El método PARDISO (Parallel Direct Sparse Solver) se utiliza para resolver directamente el sistema linealizado de ecuaciones en cada iteración, este método es capaz de manejar grandes matrices dispersas. COMSOL usa un número finito de funciones de prueba para aproximar la solución en cada subdominio de elemento.

Las variables de cerradura presentan un comportamiento simétrico o asimétrico en torno a planos ortogonales y periodicidad, según las condiciones planteadas en los problemas de cerradura y la geometría del sistema. Este comportamiento contribuye a moldear los coeficientes efectivos de transporte, dado que también pueden ser simétricos o asimétricos.

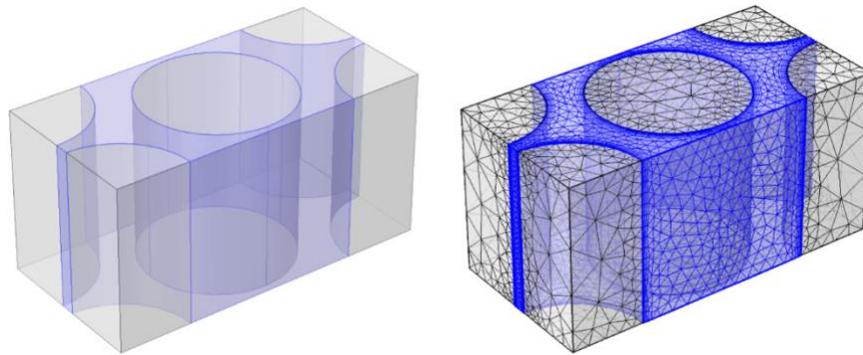
**Tabla 3.1.** Propiedades físicas del combustible y del sodio.

<b>Propiedad</b>	<b>Fase sólida (combustible)</b> (Buiron et al., 2017)	<b>Fase líquida (sodio)</b> (Waltar et al., 2012)
Calor específico [J/(kg K)]	390.98	1269
Conductividad [W/(m K)]	2.529	68.8
Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]	10,162.89	845
Viscosidad [Pa-s]	-	$2.5 \times 10^{-4}$

En la Tabla 3.1 se presentan las propiedades físicas del combustible y del sodio. Las propiedades se consideran constantes dentro de la región de promediado, lo cual es uno de los supuestos básicos. De otra manera, el esfuerzo algebraico puede conducir a formulaciones matemáticas extremadamente complejas que complican su aplicabilidad en la ingeniería. Se puede considerar que detrás de tal suposición está el hecho de que la dinámica del proceso

de transporte de calor en la escala de combustible es demasiado rápida en comparación con la dinámica a escala del reactor. En ese sentido, las propiedades se pueden evaluar a la temperatura del centroide del REV. Esto le da relevancia a la selección correcta del REV, en otras palabras, el sistema heterogéneo debe satisfacer disparidades de escalas espaciales y temporales de un proceso de transporte particular.

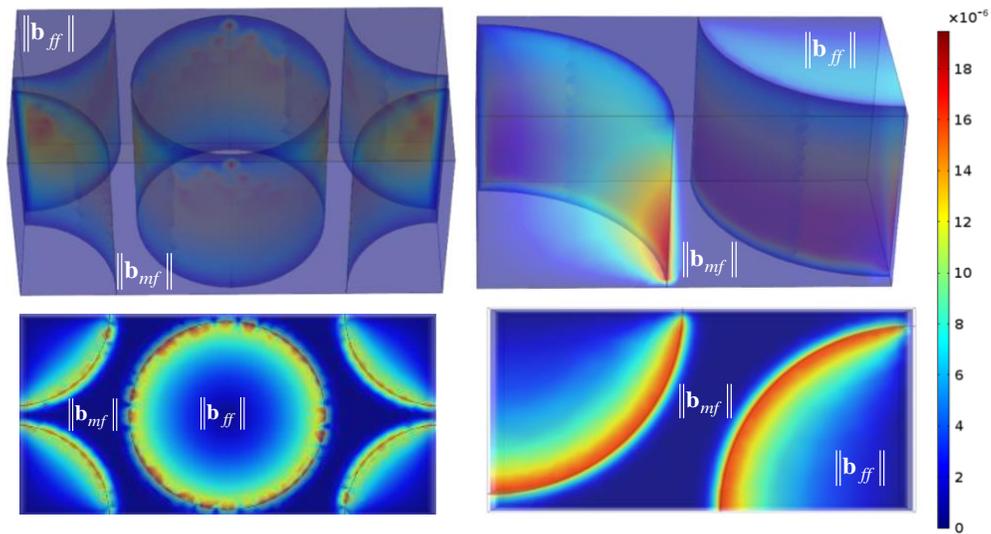
La Figura 3.4, muestra la celda representativa 3D empleada para resolver los problemas de cerradura y también presenta el número de elementos de dominio apropiados. De acuerdo a las pruebas realizadas, se considera que tal número de elementos tetraédricos es suficiente para asegurar la independencia de los resultados. 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.



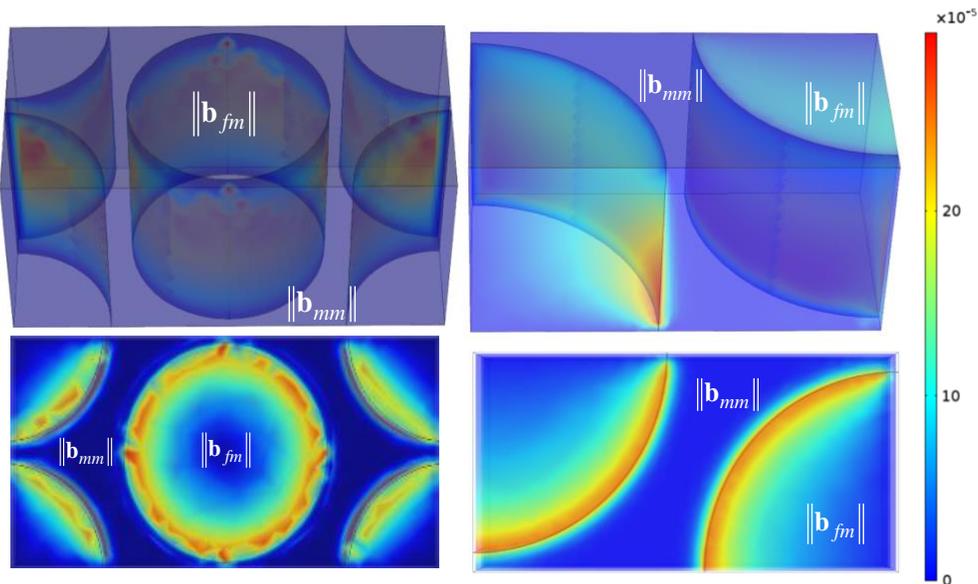
**Figura 3.4.** Celda unitaria representativa, con 60595 elementos de dominio.

La norma euclidiana de las variables de cerradura  $\|\mathbf{b}_{ff}\|$  y  $\|\mathbf{b}_{mf}\|$  se presenta en la Figura 3.5. Estas variables se utilizan para obtener los coeficientes de transporte de la fase sólida, dados por las Ecs. (0.71)-(0.75). En la Figura 3.5 se muestran dos tipos de gráficos, en el lado izquierdo se grafica la variable de cerradura en el límite entre el sólido y el líquido en la celda unitaria. Tal ubicación es de interés ya que varios coeficientes efectivos dependen explícitamente de la solución en ese punto, y se incluye la representación de la variable de a lo largo de un plano de corte horizontal central de la Figura 3.4. En el lado derecho, se muestra la solución en un cuarto de celda. Los resultados están presentes 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 cerradura cuando se proyecta sobre el plano  $xy$ . También es evidente que es más intenso en la pared de la barra y menos intenso en el centro, mientras que permanece con baja intensidad en el volumen del fluido y aumenta su intensidad en la interfaz barra-fluido.



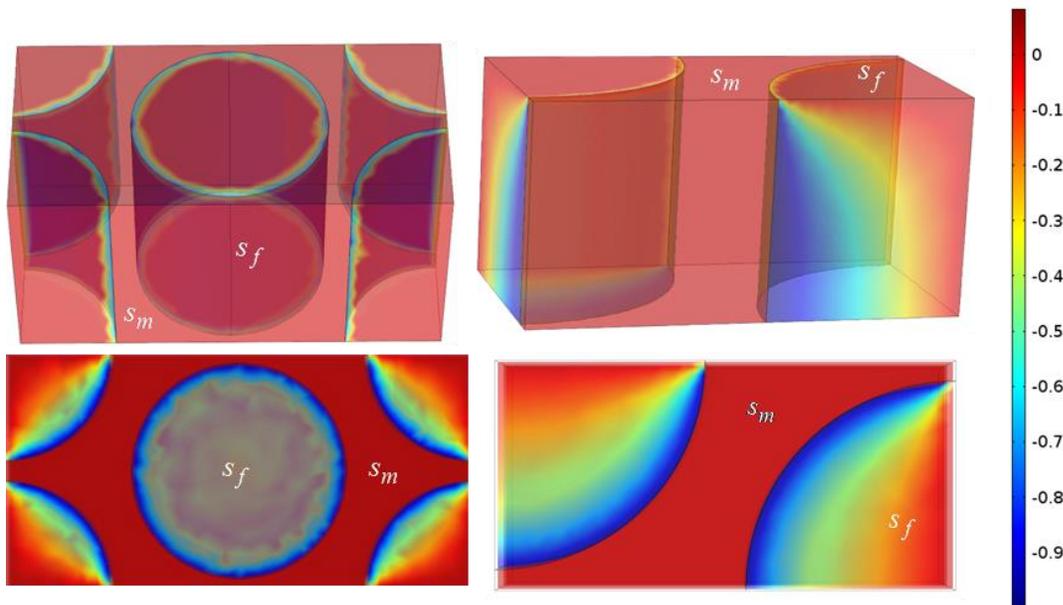
**Figura 3.5.** Proyección de norma euclidiana de las variables de cerradura  $\|b_{ff}\|, \|b_{mf}\|$  (m).



**Figura 3.6.** Proyección de norma euclidiana de las variables de cerradura  $\|b_{fm}\|, \|b_{mm}\|$  (m).

En la Figura 3.6, se presenta la norma euclidiana correspondiente de las variables de cerradura  $\|\mathbf{b}_{fm}\|$  y  $\|\mathbf{b}_{mm}\|$ . La tendencia general de estas variables de cerradura es similar a la presentada para  $\|\mathbf{b}_{ff}\|$  y  $\|\mathbf{b}_{mf}\|$ , pero las primeras son un orden de magnitud mayor. La proyección de estas variables en el plano xy permite observar la periodicidad y simetría de las variables en la celda representativa.

La Figura 3.7, presenta los campos de las variables de cerradura  $s_f$  y  $s_m$ , que se utilizan para determinar el coeficiente de transporte relacionado con el proceso de transferencia de calor interfacial, dado por las Ecs. (0.75) y (0.81), y los coeficientes pseudoconvectivos. En este caso, las variables de cerradura son simétricas en la celda, y si se proyectan sobre el plano xy es posible observar la periodicidad de la celda. Es importante señalar que  $s_f$  y  $s_m$  son al menos tres órdenes de magnitud mayores que las otras variables de cerradura. Esto indica que la contribución a las desviaciones de temperatura puede estar dominada por las diferencias de temperatura entre el combustible y el fluido.



**Figura 3.7.** Proyección de las variables de cerradura  $s_f, s_m$  (adimensional).

**Tabla 3.2.** Componentes de los coeficientes escalados del tensor térmico efectivo [W/ mK] a diferentes velocidades de entrada del refrigerante.

$v[m/s]$	$K_{ff}$			$K_{fm}$		
	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
$v[m/s]$	$K_{mf}$			$K_{mm}$		
	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

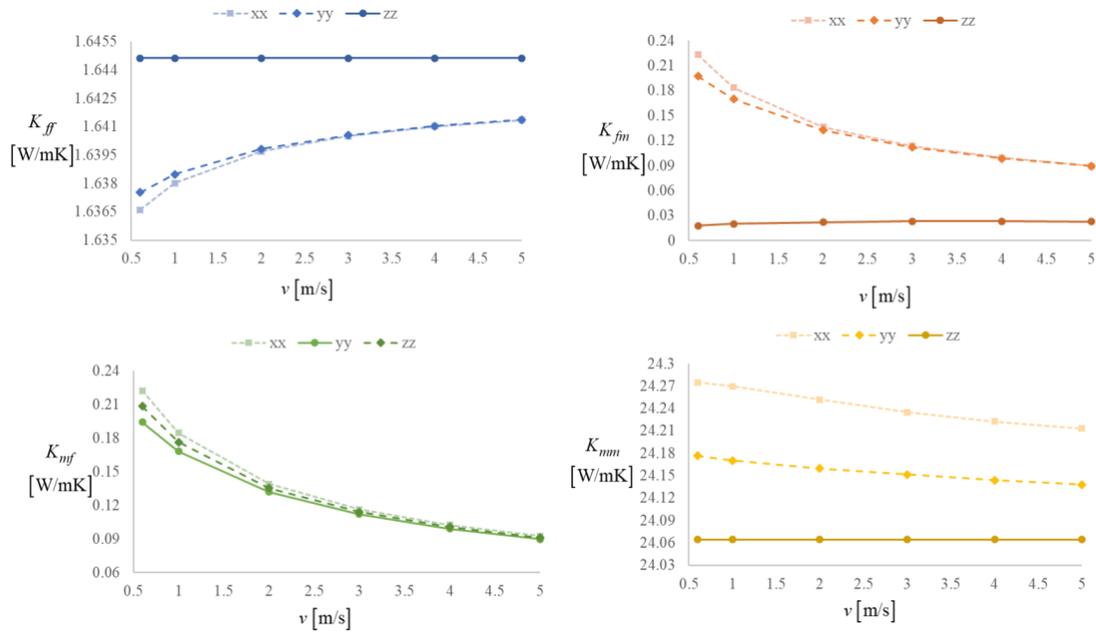
En un reactor nuclear, podría haber una variación en el flujo de entrada debido a un evento como la pérdida de flujo sin protección (ULOF, por sus siglas en inglés). Es un evento transitorio que se inicia cuando se pierde la potencia de la bomba primaria o se produce una rotura del eje. Durante el funcionamiento de los reactores, la pérdida de fluido en circulación es un aspecto clave de la seguridad. En el procedimiento de este trabajo, los coeficientes efectivos se pueden volver a calcular 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 efectivos también debe abarcar efectos dinámicos en la escala pin-fuel. Dentro del método de promedio volumétrico, esto se puede lograr resolviendo los problemas de cerradura en el estado transitorio en el que las perturbaciones de flujo se suministran como datos de entrada al nivel del problema de cerradura. Este procedimiento ha sido aplicado previamente para estimar coeficientes efectivos de difusión de neutrones en eventos transitorios en reactores nucleares (Aguilar-Madera et al., 2019) y también ha sido sugerido,

como ejemplo, en el contexto de problemas de transporte de masa (Municchi et al., 2020) y calor (Moyne, 1997).

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

Las Tablas 3.1 y 3.2 presentan los coeficientes efectivos escalados  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{u}$  para la fase sólida  $ff$ , la fase líquida  $mm$  y cruzados  $fm$  y  $mf$ , respectivamente. Las componentes cruzadas  $xy$ ,  $xz$ ,  $yx$ ,  $yz$ ,  $zx$  y  $zy$  son pequeñas comparadas con los coeficientes escalados evaluados en la diagonal de la matriz, es decir  $xx$ ,  $yy$  y  $zz$ , por lo que se presenta el valor de éstos últimos solamente.

De acuerdo con los resultados de la Tabla 3.2, es interesante notar que los tensores térmicos  $\mathbf{K}$ , no presentan diferencias apreciables en sus componentes internos, por lo que el conjunto es prácticamente isotrópico. 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 más bajos que  $\mathbf{K}_{ff}$ . Para las conductividades del material, el coeficiente de combustible escalado  $\mathbf{K}_{ff}$  es aproximadamente 1.5 veces más pequeño que el valor local, mientras que  $\mathbf{K}_{mm}$  es aproximadamente 2.8 más bajo en comparación con el valor global. Significa que la resistencia a la transferencia de calor entre el combustible y el metal líquido cambia apreciablemente a gran escala (macroscópico). Es de primordial importancia, ya que la predicción correcta de la temperatura es fundamental para el funcionamiento y la predicción de los reactores nucleares en diferentes escenarios transitorios. Los resultados relacionados con las variaciones de la velocidad del enfriamiento muestran que los coeficientes efectivos permanecen prácticamente invariables.



**Figura 3.8.** Componentes de coeficientes efectivos de los tensores térmicos en función de la velocidad del refrigerante.

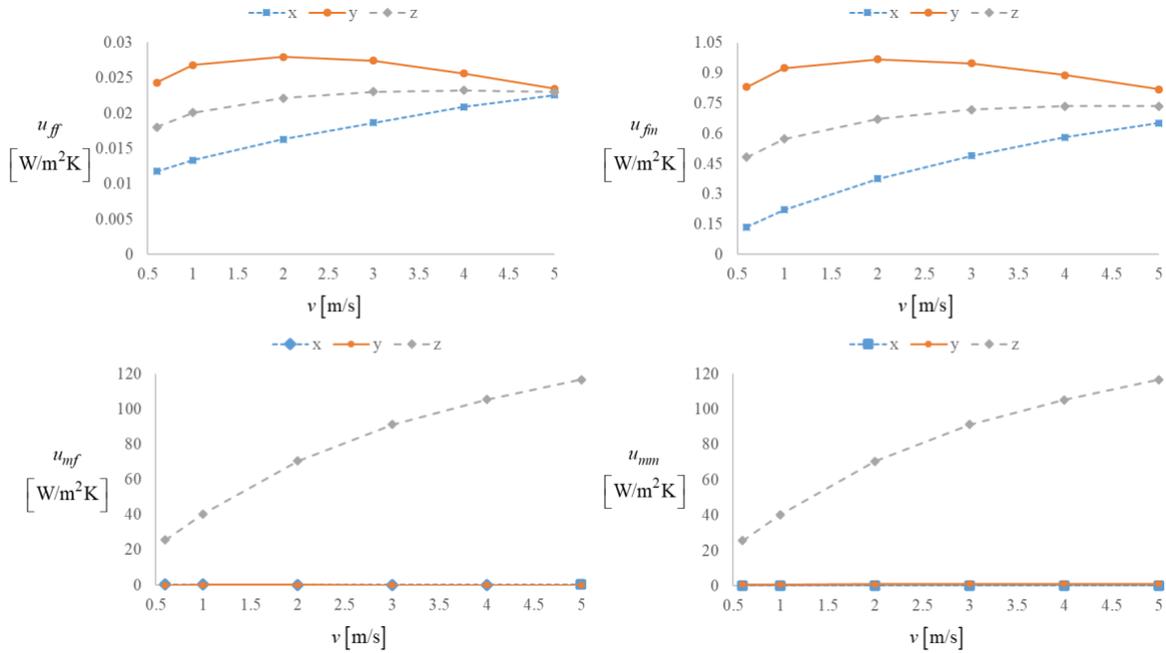
En la Figura 3.8, se muestra el comportamiento de las componentes del tensor térmico efectivo en función de la velocidad, en el caso del coeficiente  $\mathbf{K}_{ff}$ , el componente  $zz$  no se ve afectado por la velocidad, y las componentes  $xx$  e  $yy$  aumentan conforme la velocidad aumenta, permitiendo una mayor transferencia convectiva. Las componentes  $xx$  e  $yy$  del coeficiente  $\mathbf{K}_{fm}$  se comportan de manera inversa a la de  $\mathbf{K}_{ff}$ , pero el  $zz$  se mantiene constante. El tensor  $\mathbf{K}_{mf}$  tiene un comportamiento en donde conforme aumenta la velocidad el coeficiente disminuye, disminuyendo el valor del coeficiente efectivo, predominando el transporte de calor macroscópico, similar al transporte de calor molecular o conducción. El tensor más importante en función de la velocidad es  $\mathbf{K}_{mm}$ , en este caso el cambio en cada componente disminuye conforme aumenta la velocidad, indicando que predomina el transporte macroscópico en la dirección obtenida.

Los coeficientes escalados  $\mathbf{u}$  (Tabla 3.3) están asociados con el proceso de transporte de calor convectivo-conductivo, estas variables están directamente relacionadas con las temperaturas promedio intrínsecas y con la velocidad del metal líquido refrigerante.

**Tabla 3.3.** Componentes de los coeficientes escalados del vector efectivo de pseudo-velocidad [ $W/m^2K$ ].

$v [m/s]$	$\mathbf{u}_{ff}$			$\mathbf{u}_{fm}$		
	$x$	$y$	$z$	$x$	$y$	$z$
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
$v [m/s]$	$\mathbf{u}_{mf}$			$\mathbf{u}_{mm}$		
	$x$	$y$	$z$	$x$	$y$	$z$
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

En la Figura 3.9 se presenta el comportamiento de las componentes  $xx$ ,  $yy$  y  $zz$  de los coeficientes efectivos  $\mathbf{u}_{ff}$ ,  $\mathbf{u}_{fm}$ ,  $\mathbf{u}_{mf}$ ,  $\mathbf{u}_{mm}$  en función de la velocidad de entrada del refrigerante. Este coeficiente está asociado con el vector *pseudo-convectivo*, es decir, considera la transferencia de calor por convección, el cual está directamente relacionado con la velocidad. Para los coeficientes  $\mathbf{u}_{ff}$ ,  $\mathbf{u}_{fm}$ , la componente  $xx$  tienen un incremento a medida que la velocidad aumenta, para la componente  $yy$ , el comportamiento se puede considerar constante. En el caso de los coeficientes  $\mathbf{u}_{mf}$ ,  $\mathbf{u}_{mm}$  las componentes  $xx$  e  $yy$  se mantienen constantes, y la componente  $zz$  aumenta en función del aumento en la velocidad del fluido. Esto es consistente con el modelo, ya que se considera que el fluido se encuentra en movimiento en dirección axial.



**Figura 3.9.** Componentes de los coeficientes efectivos del vector *pseudo-convectivo* en función de la velocidad del refrigerante.

**Tabla 3.4.** Coeficiente volumétrico de transferencia de calor.

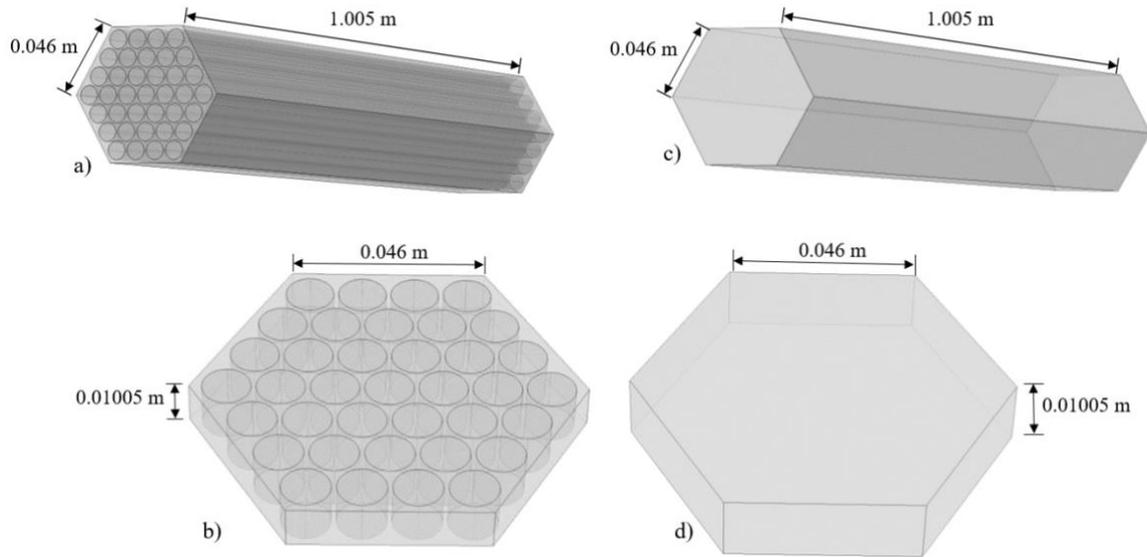
$v$ [m/s]	0.6	1	2	3	4	5
$a_v h$ [W/m <sup>3</sup> K]	2,210,230	2,210,980	2,211,370	2,212,730	2,213,620	2,214,940

El coeficiente volumétrico de transferencia de calor  $a_v h$  obtenido con las Ecs. (0.75) y (0.81) se muestra en la Tabla 3.4. Debido a que el volumen de la celda unitaria es pequeño, el valor del coeficiente de transferencia de calor es grande, permitiendo que el calor producido en el combustible sea transportado al metal líquido. Este parámetro se ve débilmente afectado por la velocidad del fluido ya que depende principalmente de la diferencia de temperatura fluido-varilla a través de la variable de cerradura  $s$ .

### 3.4 Resultados del modelo escalado

En esta Sección, se presenta la comparación de los resultados numéricos obtenidos con la solución numérica del modelo escalado, dado por las Ecs. (0.70)-(0.81), y la simulación

numérica directa a escala de pines. El modelo a escala de pines son las formulaciones para el proceso de transferencia de calor, que se describe mediante las ecuaciones matemáticas locales (0.1)-(0.4).



**Figura 3.10.** a) y b) Ensamble representativo del reactor nuclear para las simulaciones numéricas a escala de pin; c) y d) geometría equivalente homogeneizada del ensamble de combustible para la simulación del modelo escalado.

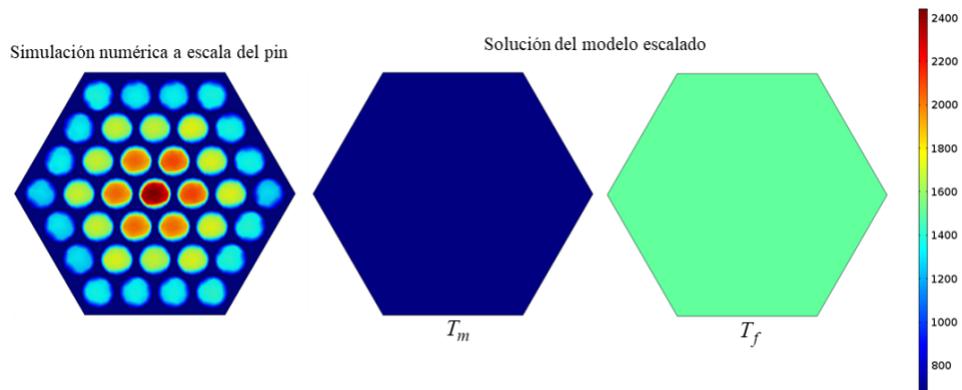
El problema de la transferencia de calor a escala de pin se establece en una geometría que incluye varias barras de combustible y lejos de los límites del núcleo y los extremos superior e inferior de los conjuntos de combustible (ver Figura 3.10a). Se consideran las condiciones de simetría en los límites del conjunto externo porque está rodeado por otros conjuntos.

Las ecuaciones escaladas se aplican en una geometría equivalente de un conjunto combustible (ver Figura 3.10c), los valores de los coeficientes efectivos se dan en las Tablas 3.1 y 3.2. La velocidad del metal es 5 m/s y la temperatura de entrada es 668.15 K, el término fuente se toma como constante de potencia volumétrica en todas las direcciones de la barra de combustible, ya que aún no se desarrolla el modelo neutrónico. En el ensamble, la barra central tiene un valor nominal de la fuente, las barras alrededor de la barra central tienen 0,9 de valor nominal, las siguientes barras tienen 0,8 y las barras en el límite del conjunto tienen 0,7 del valor. Para el modelo escalado, la potencia volumétrica se distribuye uniformemente

y se toma como el promedio de la fuente de potencia en el conjunto, que es 0,773 del valor nominal. Se resuelve el modelo a escala de pin y el modelo escalado en el dominio de menor escala (ver Figura 3.10b y d), tomando la décima parte de la longitud del ensamble, considerando un volumen alejado de los límites axiales y centrándonos principalmente en el perfil radial de temperaturas.

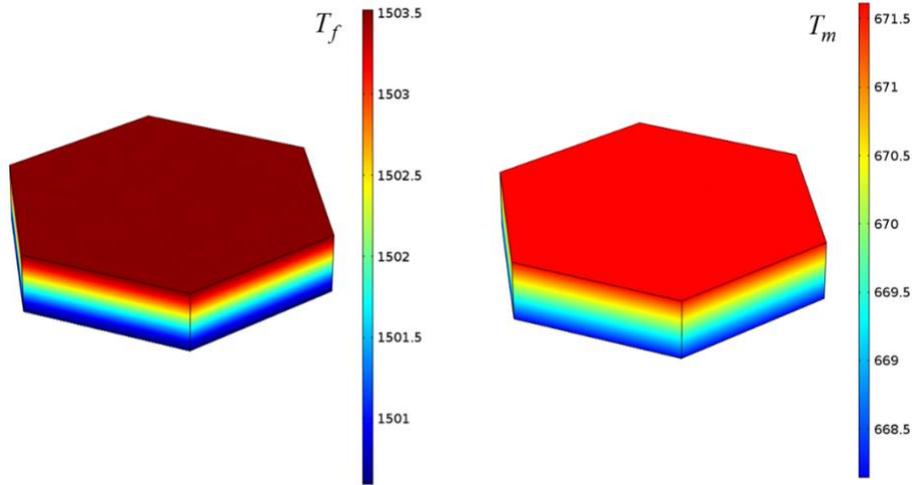
En la Figura 3.11 se presenta la comparación, se observa que en el modelo a escala de pin se pueden distinguir zonas que pertenecen a la barra de combustible y zonas ocupadas por fluido refrigerante. Por otro lado, en el modelo escalado, todo el dominio está homogeneizado y se tiene que trazar por separado 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 de 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 obtiene 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 de pin y del modelo escalado son del 0.24% para el combustible y del 0.15% para el metal líquido, respectivamente. En este aspecto se obtuvo un excelente resultado.



**Figura 3.11.** Comparación de las temperaturas del combustible  $T_f$  (K) y de metal líquido  $T_m$  (K) en la simulación numérica a escala de pin y la simulación numérica del modelo escalado.

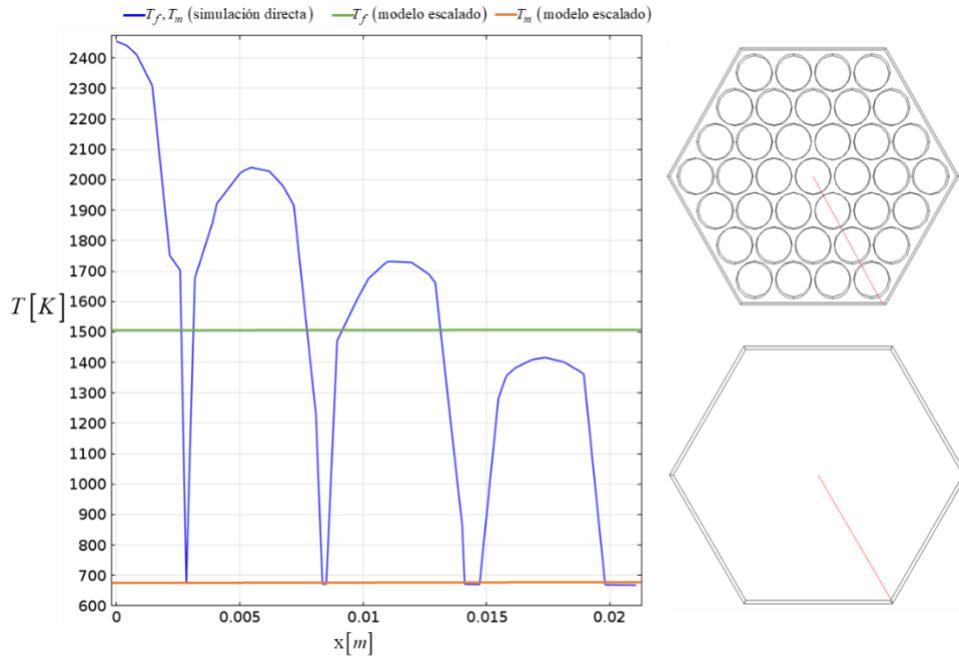
En la Figura 3.12 se muestran los perfiles de temperatura de  $T_f$  y  $T_m$ . Es posible observar la distribución de temperatura en la dirección axial, que es causada por el movimiento del metal líquido.



**Figura 3.12.** Temperatura del combustible  $T_f$  (K) y del metal líquido  $T_m$  (K) obtenidas con el modelo escalado.

La temperatura del metal líquido refrigerante aumenta en la dirección axial como consecuencia de la transferencia de calor que tiene lugar mientras la fase fluida se mueve de abajo hacia arriba; el calor se extrae parcialmente de la varilla y entra refrigerante nuevo por la parte inferior.

La Figura 3.13 muestra el perfil de temperatura a través de uno de los vértices del conjunto (ver la línea roja en el esquema de la izquierda en la Figura 3.13). 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. Dentro de la barra de combustible, la temperatura disminuye gradualmente hasta que se alcanza la interfaz entre la varilla y el fluido. En este punto, la temperatura desciende abruptamente hasta alcanzar la temperatura de la masa del fluido.



**Figura 3.13.** Perfil de temperatura de la simulación numérica a escala de pin y del modelo escalado a través del ensamble.

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 en todo el ensamblaje. Además, en el modelo escalado, la potencia volumétrica se distribuye uniformemente en todo el dominio a medida que la barra de combustible y el fluido se homogeneizan en un dominio equivalente donde los dominios individuales ya no existen.

## **4. Difusión de neutrones**

El núcleo del reactor cuenta con dos regiones de combustible, la zona interna y la externa, además de los reflectores que se encuentran alrededor del combustible (Figura 3.1). En esta sección se describe el modelo neutrónico utilizado para modelar los procesos neutrónicos en las regiones del núcleo.

### **4.1 Modelo de la de cinética neutrónica**

La cinética neutrónica de un sistema multiplicador reflejado constituye un problema de física matemática que permite describir el proceso de multiplicación en medios no homogéneos, como la configuración ilustrada en la Figura 3.1. El modelo para el análisis de los procesos neutrónicos parte de la teoría de difusión de neutrones.

La suposición de que el flujo es linealmente anisótropo es precisa, excepto en un medio fuertemente absorbente o cuando las propiedades del medio cambian sustancialmente en distancias comparables a la trayectoria libre media de los neutrones. Para muchos cálculos de reactores rápidos, estas limitaciones no son particularmente importantes. Las secciones eficaces de neutrones rápidos suelen ser pequeñas y las trayectorias libres medias suelen ser de 0,1 m o más largas. Las propiedades nucleares del combustible, el refrigerante y la estructura son muy diferentes, pero debido a que las dimensiones de los elementos combustibles individuales y de los materiales estructurales suelen ser de solo unos pocos milímetros, en distancias comparables con la trayectoria libre media, las grandes regiones del reactor pueden tratarse como homogéneas y es posible utilizar la teoría de difusión. Incluso en las barras de control, las secciones eficaces de captura para neutrones rápidos son lo suficientemente bajas como para que la teoría de la difusión sea una buena aproximación para muchos propósitos. Las inexactitudes surgen en el borde del núcleo y en lo profundo del blindaje de neutrones que rodea el reactor (Judd, 2014).

Para describir la neutrónica en función del tiempo en el SFR se utilizará la teoría de un grupo, es decir, se supone que el proceso de producción, difusión y absorción de neutrones se lleva a cabo con una sola energía y que en las colisiones de dispersión no se producen variaciones energéticas.

#### 4.1.1. Teoría de difusión

La difusión se refiere al desplazamiento neto que tienen los neutrones desde regiones de mayor densidad neutrónica a otras de densidad menor (Glasstone y Sesonske, 1990). La ecuación de difusión considera la producción de neutrones por fisión, la pérdida de neutrones por escape y absorción y la ganancia neta de neutrones. La base de la teoría de la difusión es asumir que el flujo  $\phi(\mathbf{r}, t)$  es isótropo o linealmente anisótropo. (Esto es equivalente a la teoría del transporte P1).

La ecuación (4.1) describe esta aproximación, el primer término es la variación del flujo neutrónico en función del tiempo, el segundo es el término de difusión de neutrones, el cual representa el desplazamiento de que los neutrones recorren antes de ser capturados o que escapen del sistema, el tercero considera la absorción de los neutrones en función de la sección eficaz macroscópica de absorción y  $S(\mathbf{r}, t)$  es el término fuente.

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) \quad (0.83)$$

Para describir el segundo término, se utiliza la Ley de Fick (Ec.(4.2)), en donde  $D(\mathbf{r})$  es el coeficiente de difusión. Se puede observar que aquí se llama Ley de Fick por la similitud con la ley constitutiva de transferencia de masa, no obstante el coeficiente de difusión del neutrón tiene unidades de longitud.

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -D(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) \quad (0.84)$$

Sustituyendo la Ec. (0.84) en (0.83) se obtiene

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) \quad (0.85)$$

El coeficiente de difusión del neutrón  $D(\mathbf{r})$  está dado por (Duderstadt, 1976)

$$D(\mathbf{r}) = \frac{1}{3 \Sigma_{tr}(\mathbf{r})} = \frac{1}{3 [\Sigma_t(\mathbf{r}) - \bar{\mu}_0 \Sigma_s(\mathbf{r})]} \quad (0.86)$$

Donde  $\bar{\mu}_0$  es el promedio del coseno del ángulo de dispersión por colisión, dado por  $\bar{\mu}_0 = \frac{3}{2A}$ , con  $A$  como el número de masa del moderador. Los términos  $\Sigma_{tr}(\mathbf{r})$ ,  $\Sigma_t(\mathbf{r})$  y  $\Sigma_s(\mathbf{r})$  son la sección eficaz de transporte, total y de dispersión del material (refrigerante y/o moderador).

Para el término fuente es necesario considerar los neutrones inmediatos y los neutrones retardados que se forman en el proceso de fisión. Los *neutrones inmediatos* son los que se generan inmediatamente después del proceso de fisión, estos son liberados de manera casi inmediata a partir de los productos de fisión. Los *neutrones retardados* se generan a partir del decaimiento de los productos de fisión, ambos tipos de neutrones contribuyen con el modelo de difusión. Si  $\beta$  es la fracción de neutrones retardados entonces  $1 - \beta$  es la fracción de neutrones instantáneos, lo que hace que el término fuente este dado por la ecuación

$$S(\mathbf{r}, t) = (1 - \beta)v \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) + \beta v \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) \quad (0.87)$$

Para los neutrones retardados, la tasa de formación es igual a la tasa de desintegración radioactiva del precursor, en este caso se consideran seis grupos de neutrones retardados, es decir

$$\beta v \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.88)$$

donde  $\lambda_i$  es la constante de desintegración del grupo  $i$ ,  $C_i(\mathbf{r}, t)$  es la concentración de los precursores del grupo  $i$ . Sustituyendo la Ec. (0.88) en (0.87), el término fuente queda

$$S(\mathbf{r}, t) = (1 - \beta)v \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.89)$$

Con el término fuente, la ecuación de difusión toma la forma

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = (1 - \beta) \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.90)$$

El factor de multiplicación infinito se define como

$$k_{\infty} = \frac{k_{eff}}{P_{NL}} = \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a} \quad (0.91)$$

En donde  $k_{eff}$  es el factor de multiplicación efectivo, el cual se define como la relación entre el número de neutrones que se producen por fisión en cada generación y número de neutrones absorbidos en la generación anterior, correspondiente a un sistema de tamaño infinito. Y  $P_{NL}$  es la probabilidad de no escape, es decir, es la probabilidad de que no escapen físicamente neutrones del sistema, de que un neutrón no cruce la frontera del reactor como neutrón rápido o térmico. Es la relación entre el número de neutrones absorbidos por segundo en el reactor y los que son producidos en total (Espinosa-Paredes y Vázquez, 2016), éste término está dado por

$$P_{NL} = \frac{1}{1 + L^2 B^2} \quad (0.92)$$

Sustituyendo las Ec. (0.91) en (0.90), se obtiene

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = (1 - \beta) \frac{k_{eff}}{P_{NL}} \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.93)$$

Introduciendo el término de reactividad, el cual se refiere al cambio fraccional en la población de neutrones por generación y se define como

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} = 1 - \frac{1}{k_{eff}} \quad (0.94)$$

Desarrollando algebraicamente la ecuación de difusión para poder introducir la reactividad

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = \left(1 - \frac{1}{k_{eff}} + \frac{1}{k_{eff}} - \beta\right) \frac{k_{eff}}{P_{NL}} \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) \\ + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (0.95)$$

La ecuación de difusión queda

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = \left(\rho(\mathbf{r}, t) - \beta + \frac{1}{k_{eff}}\right) \frac{k_{eff}}{P_{NL}} \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) \\ + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (0.96)$$

Para los neutrones inmediatos, la ecuación que define el tiempo medio de generación es

$$\Lambda = \frac{P_{NL}}{k_{eff} \nu \Sigma_a} = \frac{1}{k_{\infty} \nu \Sigma_f} \quad (0.97)$$

Considerando el tiempo de generación de neutrones inmediatos, la Ec. (0.96) queda

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\nu} \left( \frac{\rho(\mathbf{r}, t) - \beta}{\Lambda} + \frac{\nu \Sigma_a}{P_{NL}} \right) \phi(\mathbf{r}, t) \\ + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (0.98)$$

Definiendo el tiempo de vida de los neutrones en el reactor por la Ec. (4.17)

$$\ell \equiv \frac{P_{NL}}{\nu \Sigma_a} \quad (0.99)$$

Este término solo depende de la composición y del tipo de reactor, siendo independiente del tamaño ya que solo depende del factor de multiplicación, la velocidad y la sección eficaz macroscópica. Usando el tiempo de vida de los neutrones dentro de la ecuación de difusión, ésta última queda como

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - D(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\nu} \left( \frac{\rho(\mathbf{r}, t) - \beta}{\Lambda} + \frac{1}{\ell} \right) \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.100)$$

La ecuación de difusión de neutrones puede ser usada en la región del núcleo y la región del reflector, solo que en esta última no se consideran efectos por reactividad, ni aportación por precursores de neutrones retardados.

Para conocer el flujo neutrónico, se requiere conocer la variación de las concentraciones  $C_i$  de los precursores para los neutrones retardados. Esta concentración está dada por la siguiente expresión

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.101)$$

Sustituyendo la definición de factor de multiplicación infinito (Ec. (0.91)) en la ecuación (0.101), se obtiene

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \frac{k_{eff}}{P_{NL}} \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.102)$$

Usando la definición del tiempo medio de generación, la ecuación para la concentración de precursores queda

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \frac{1}{\nu \Lambda} \phi(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (0.103)$$

El modelo de difusión de neutrones para el reactor reflejado en presencia de precursores de neutrones retardados y con reactividad de retroalimentación se presenta a continuación.

*Región del núcleo (interno y externo)*

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_c \nabla^2 \phi_c(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ac} \phi_c(\mathbf{r}, t) \\ + \frac{1}{\nu} \left( \frac{\rho(\mathbf{r}, t) - \beta}{\Lambda} - \frac{1}{\ell_n} \right) \phi_c(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \end{aligned} \quad (0.104)$$

*Región reflectada*

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_r(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = D_r \nabla^2 \phi_r(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ar} \phi_r(\mathbf{r}, t) \quad \mathbf{r} \in \Omega_r \quad (0.105)$$

*Precursores de neutrones*

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\beta_i}{\nu \Lambda} \phi_c(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, 2, \dots, G; \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (0.106)$$

Las condiciones iniciales están dadas por

$$\text{C.I. 1} \quad \phi_c(\mathbf{r}, 0) = \phi_{c0}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (0.107)$$

$$\text{C.I. 2} \quad \phi_r(\mathbf{r}, 0) = \phi_{r0}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in \Omega_r \quad (0.108)$$

$$\text{C.I. 3} \quad C_i(\mathbf{r}, 0) = \frac{\beta_i \nu \Sigma_f}{\lambda_i} \phi_c(\mathbf{r}, 0), \quad i = 1, 2, \dots, G; \quad \mathbf{r} \in \Omega_c \quad (0.109)$$

Las condiciones de frontera son

$$\text{C.F. 1} \quad \phi_c(\mathbf{r}_c) = \phi_r(\mathbf{r}_r) \quad \Omega_c \cap \Omega_r \quad (0.110)$$

$$\text{C.F. 2} \quad -\mathbf{n}_{cr} \cdot D_c \nabla \phi_c(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{n}_{cr} \cdot D_r \nabla \phi_r(\mathbf{r}, t) \quad \Omega_c \cap \Omega_r \quad (0.111)$$

$$\text{C.F. 3} \quad \phi_r(\mathbf{r}_r) = 0 \quad (0.112)$$

Donde  $\mathbf{r}_c$  es el vector de posición efectiva del núcleo, incluidas las regiones del subconjunto de combustible interna y externa, y  $\mathbf{r}_r$  es la posición del vector externo efectivo de la zona reflectora.

Considerando como aproximación un núcleo de reactor en forma de paralelepípedo rectangular finito (Duderstadt y Hamilton, 1976), el valor de inicio del perfil de flujo de neutrones se obtiene de

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \phi_{\max} \cos\left(\frac{\pi x}{x_{eff}}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{y_{eff}}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{H_{eff}}\right), \quad \Omega_c \cup \Omega_r \quad (0.113)$$

en donde  $x_{eff}$ ,  $y_{eff}$  y  $H_{eff}$  son las dimensiones extrapoladas del núcleo del reactor, y  $\phi_{\max}$  es una función de la potencia térmica del reactor  $P_x$ , dada por

$$\phi_{\max} = \frac{3.8758 P_x}{w_f \Sigma_f V_x} \quad (0.114)$$

El volumen del núcleo se calcula considerando las dimensiones efectivas, es decir,  $V_x = x_{eff} y_{eff} H_{eff}$ . La fuente de calor de fisión volumétrica es crucial para acoplar el proceso termofluido nuclear con el proceso de neutrones, y para el estado estacionario con la Ec. (4.39), en  $t = 0$  (es decir,  $\phi_0(\mathbf{r})$ ).

Con el fin de obtener los parámetros nucleares involucrados en las ecuaciones anteriores, se tomó un modelo detallado en 3D del SFR bajo análisis para el código Monte Carlo Serpent (Leppänen, 2013). 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. Las secciones eficaces y los parámetros neutrónicos para la ecuación de difusión para la región del núcleo se presentan en las Tablas 4.1 y 4.2.

El tiempo de generación de neutrones para un SFR, calculado también con el código Serpent es  $\Lambda = 4.48274 \times 10^{-7} s$ . La fracción total de neutrones retardados es la contribución de cada

uno de los neutrones retardados del grupo  $i$   $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i = 0.0028881$ .

**Tabla 4.1.** Secciones eficaces y parámetros neutrónicos.

<b>Región del núcleo</b>	<b>Región del reflector</b>
$D_c = 1.4303 \text{ cm}$	$D_c = 1.5162 \text{ cm}$
$\Sigma_a = 0.004835 \text{ cm}^{-1}$	$\Sigma_a = 0.001842 \text{ cm}^{-1}$
$\Sigma_f = 0.001782 \text{ cm}^{-1}$	-
$\nu \Sigma_f = 0.005217 \text{ cm}^{-1}$	-
$\nu = 88.46 \times 10^6 \text{ cm/s}$	$\nu = 33.330 \times 10^6 \text{ cm/s}$
$w_f = 208.087 \text{ MeV}$	-
$\nu = 2.92$	-

**Tabla 4.2.** Precursores de neutrones retardados SFR.

<b>Grupo</b>	<b>Constante de decaimiento</b> $\lambda(s^{-1})$	<b>Fracción de neutrones retardados</b> $\beta$
1	0.0127095	$6.75 \times 10^{-5}$
2	0.0301051	$6.66 \times 10^{-4}$
3	0.112269	$5.11 \times 10^{-4}$
4	0.327525	$1.43 \times 10^{-3}$
5	1.23099	$6.43 \times 10^{-4}$
6	8.1784	$1.7 \times 10^{-4}$

#### 4.1.2. Modelo de Reactividad

El modelo de reactividad aplicado en este trabajo considera cuatro contribuciones de reactividad para calcular la reactividad total  $\rho(\mathbf{r}, t)$ : la reactividad externa  $\rho_{ext}(\mathbf{r}, t)$  debida a las barras de control; la reactividad por expansión térmica del refrigerante  $\rho_m(\mathbf{r}, t)$ ; la

reactividad por expansión térmica del combustible  $\rho_f(\mathbf{r},t)$  y la reactividad por efecto Doppler  $\rho_D(\mathbf{r},t)$ .

$$\rho(\mathbf{r},t) = \rho_{ext}(\mathbf{r},t) + \rho_m(\mathbf{r},t) + \rho_f(\mathbf{r},t) + \rho_D(\mathbf{r},t) \quad (0.115)$$

en donde

$$\rho_m(\mathbf{r},t) = \alpha_m \left( \langle T_m(\mathbf{r},t) \rangle^m - \langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m \right) \quad (0.116)$$

$$\rho_f = \alpha_f \left( \langle T_f(\mathbf{r},t) \rangle^f - \langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f \right) \quad (0.117)$$

$$\rho_D(\mathbf{r},t) = \alpha_D \ln \left( \frac{\langle T_f(\mathbf{r},t) \rangle^f}{\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f} \right) \quad (0.118)$$

El subíndice 0 en las ecuaciones (0.116)-(0.118) representa el valor de referencia, el cual corresponde al reactor en estado estacionario. Los coeficientes de reactividad aplicados son:  $\alpha_m = -0.455 pcm / K$ ,  $\alpha_f = -0.2625 pcm / K$  y  $\alpha_D = -834 pcm$  (Waltar et al., 2017). El coeficiente de expansión del combustible, considera también los efectos de expansión en el encamisado.

## 4.2 Término fuente de calor

La energía liberada en un reactor de fisión nuclear se distribuye entre una variedad de productos de reacción caracterizados por diferentes rangos y retrasos de tiempo (Duderstadt y Hamilton, 1976). La deposición de energía que se distribuye 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 del producto de fisión, los neutrinos y las reacciones de no fisión como captura de neutrones. La tasa total de generación de calor es proporcional a la tasa de fisión ( $\Sigma_f \phi$ ). Entonces, la generación de energía considerando el núcleo del reactor independiente está dada por

$$P(t) = \int_{V_{fuel}} q'''(\mathbf{r}, t) dV \quad (0.119)$$

La fuente de calor de fisión volumétrica en el núcleo está dada por

$$q_c'''(\mathbf{r}, t) = \sum_i w_{f_i} N_i(\mathbf{r}) \int_0^\infty \sigma_{f_i}(E) \psi(\mathbf{r}, E, t) dE \quad (0.120)$$

En donde  $w_{f_i}$  representa a energía recuperable liberada por cada evento de fisión,  $N_i$  es el número de núcleos fisiles por unidad de volumen del combustible en función de la posición del núcleo del reactor,  $\sigma_{f_i}(E)$  es la sección microscópica en función de la energía del neutrón, y  $\psi(\mathbf{r}, E, t)$  es el flujo neutrónico en el núcleo del reactor, el cual está en función de la posición del reactor ( $\mathbf{r}$ ), la energía del neutrón ( $E$ ), y el tiempo  $t$ . El término integral puede ser reescrito como  $\sigma_{f_i} \phi(\mathbf{r}, t)$  y si se considera que la sección eficaz macroscópica está definida como  $\Sigma_f(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r})\sigma_f$ , la ecuación (0.120) puede ser reescrita como

$$\langle q_c'''(\mathbf{r}, t) \rangle^f = w_f \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi_c(\mathbf{r}, t) \quad (0.121)$$

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 de calor en el refrigerante y en el combustible con los procesos neutrónicos, por medio del flujo neutrónico del núcleo  $\phi_c(\mathbf{r}, t)$ .

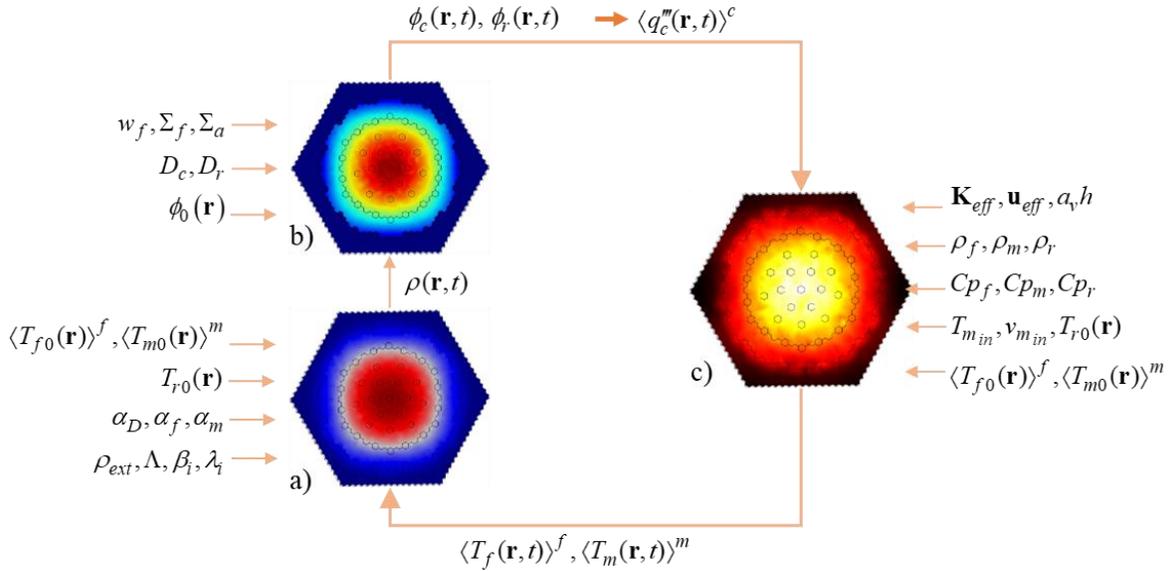
## 5. Acoplamiento multi-físico

En los reactores nucleares, varios fenómenos están fuertemente acoplados. En general, un cambio en la condición del refrigerante tiene un impacto en los procesos neutrónicos y, a su vez, dicho cambio retroalimenta las condiciones de enfriamiento. Es decir, un aumento de temperatura da como resultado una expansión térmica de los materiales, disminuyendo la concentración de los átomos y por lo tanto la absorción de neutrones en los materiales. Al disponer de más neutrones, el primer efecto de retroalimentación es una reactividad positiva, aunque muy pequeña produce un aumento de las fisiones. Por otro lado, y especialmente para reactores rápidos pequeños, este efecto es opuesto debido a la disminución de las capacidades reflectantes y, por tanto, al aumento de las fugas. En consecuencia, el efecto neto del aumento de temperatura depende de la posición y debe analizarse en detalle, pero no es el alcance de este trabajo ir más allá en esta dirección.

Los efectos de retroalimentación presentan el comportamiento contrario al disminuir la temperatura en el reactor. Por tanto, el efecto global es función de la composición isotópica del reactor. El efecto Doppler o agitación térmica de las moléculas del combustible otro efecto de retroalimentación. A medida que aumenta la temperatura del combustible, se reduce la autoprotección de resonancia en los isótopos del combustible. La reducción de autoprotección da como resultado un aumento en todas las secciones eficaces de los isótopos del combustible. Aunque todas las probabilidades de reacciones nucleares aumentan, incluida la reacción de fisión, las secciones eficaces de captura son las que más aumentan y en el efecto neto, la captura de neutrones supera la fisión. Debido a eso, un aumento en la temperatura del combustible tiene un efecto negativo en la reactividad del sistema.

El diagrama de acoplamiento entre los dos modelos, considerando el núcleo reflectado, se compone de tres módulos principales: a) módulo de acoplamiento, b) módulo neutrónico y c) módulo de transferencia de calor, como se ilustra en la Figura 5.1. El campo de temperaturas requiere una condición inicial de las temperaturas promediadas  $\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f$  y  $\langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m$  (Figura 5.1a), con el fin de calcular la reactividad a partir de las Ecs. (0.116)-

(0.118) además de considerar una reactividad externa  $\rho_{ext}$ , debida por ejemplo a las barras de control del sistema primario o secundario

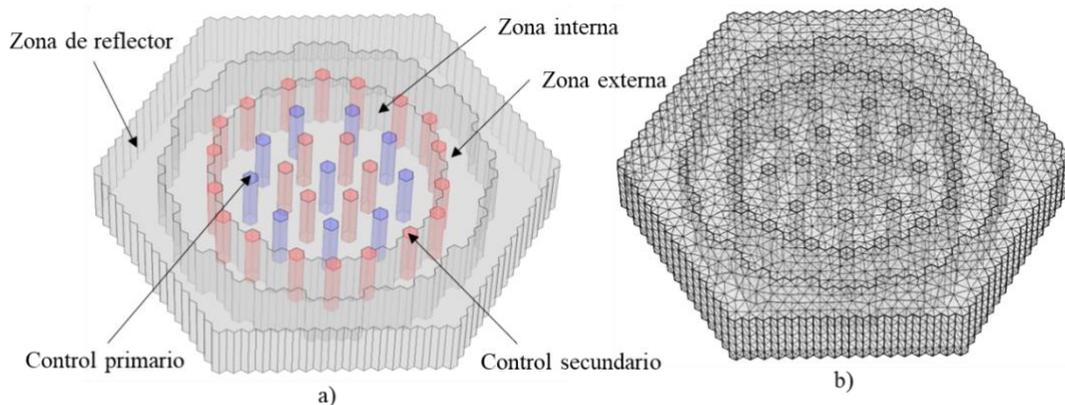


**Figura 5.1.** Diagrama esquemático de acoplamiento entre la neutróica del núcleo reflectado y el modelo escalado de transferencia de calor. (a)Módulo de acoplamiento (b)Módulo neutrónico, y (c)Módulo de transferencia de calor.

La condición inicial del flujo neutrónico  $\phi_0(\mathbf{r})$  es aproximada con la Ec. (0.113) y los parámetros nucleares (Tablas 4.1 y 4.2) son requeridos para el cálculo del flujo neutrónico en el núcleo  $\phi_c$  y en la zona de reflectores  $\phi_r$  (Figura 5.2b). Ahora, para calcular los campos de temperaturas del combustible  $\langle T_f \rangle^f$  y del líquido  $\langle T_m \rangle^m$ , se utilizan las Ecs. (0.70)-(0.81), calculando con la Ec. (0.121) el término fuente  $\langle q^m(\mathbf{r},t) \rangle^f$ . A demás se utilizan las condiciones iniciales de temperatura ( $\langle T_{f0}(\mathbf{r}) \rangle^f$  y  $\langle T_{m0}(\mathbf{r}) \rangle^m$ ), los coeficientes escalados y las propiedades físicas (Figura 5.1c). Posteriormente, estas temperaturas son enviadas de regreso al modelo acoplado para recalculer el valor de la reactividad y el flujo neutrónico en cada región, obteniendo un término fuente actualizado, es decir, retroalimentación entre procesos térmicos y neutrónicos.

## 6. Implementación de los modelos

Para realizar el acoplamiento multi escala, es necesario modelar la geometría del núcleo del reactor en 3D, considerando cada región del núcleo, la zona de reflectores y los sistemas primario y secundario de seguridad. En este trabajo se utilizó el Software COMSOL Multiphysics 4.3b para desarrollar la geometría y resolver el modelo. En la Figura 6.1 se presenta la geometría utilizada, la cual contiene 46,441 elementos de volumen.

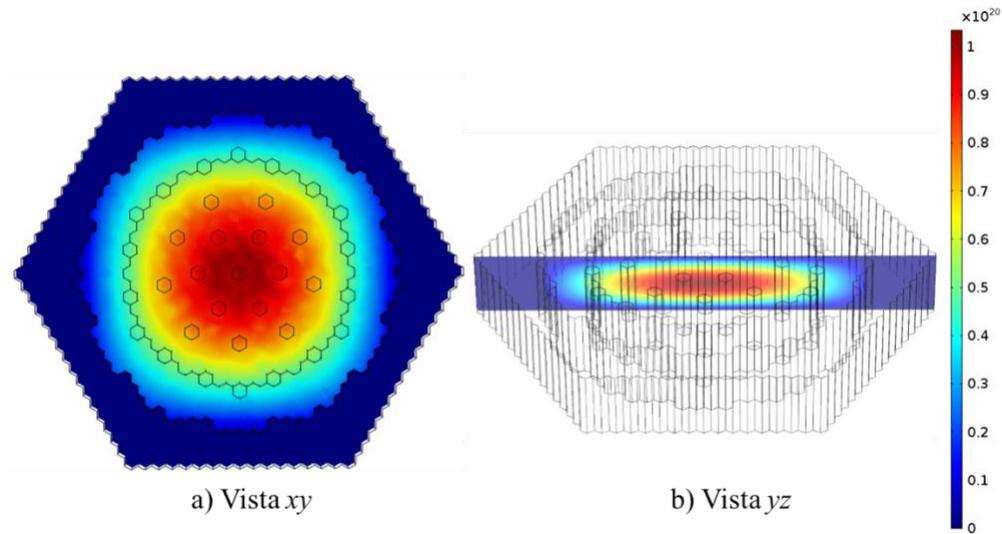


**Figura 6.1.** (a) Geometría modelada del núcleo SFR, (b) malla aplicada en la geometría.

### 6.1 Estado estacionario

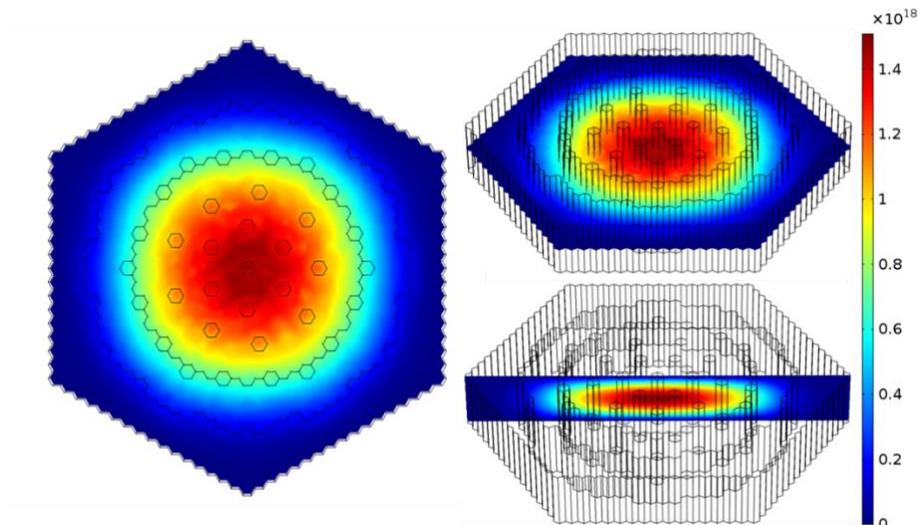
En esta sección se presentan los resultados de la implementación del modelo neutrónico y el modelo de transferencia de calor. A partir del valor inicial del flujo neutrónico, se calcula el valor del flujo de neutrones, considerando las características del combustible y el refrigerante SFR.

En la Figura 6.2, se presenta el flujo neutrónico máximo, calculado a partir de la Ec. (0.114) el cual es considerado como valor inicial para el cálculo inicial del término fuente de calor y de las temperaturas. Se puede observar el comportamiento uniforme de flujo neutrónico, en este caso, debido a la naturaleza de la ecuación, el máximo valor del flujo se encuentra en el centro del núcleo. A demás se observa que la presencia de neutrones se encuentra en las regiones del combustible.

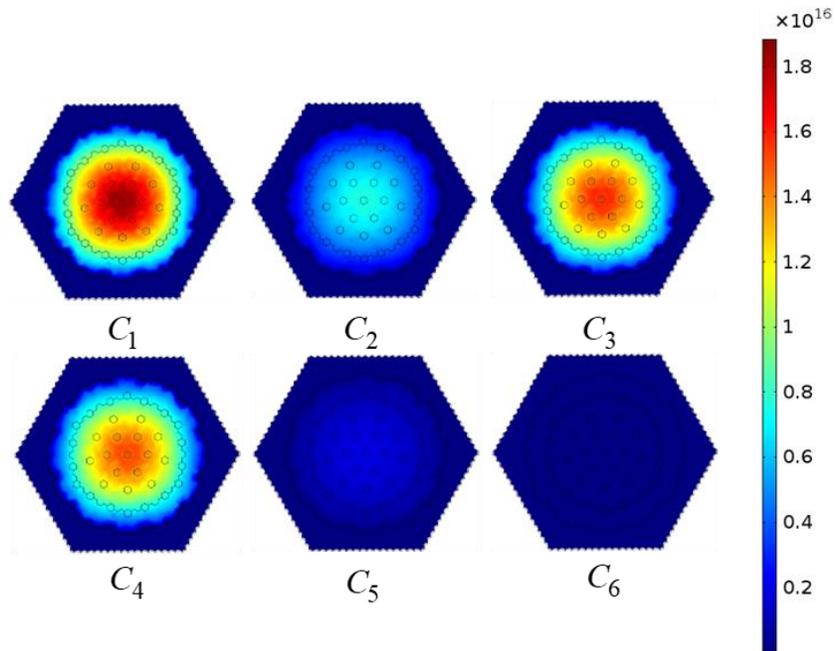


**Figura 6.2.** Valor inicial del flujo neutrónico [ $nv's$ ].

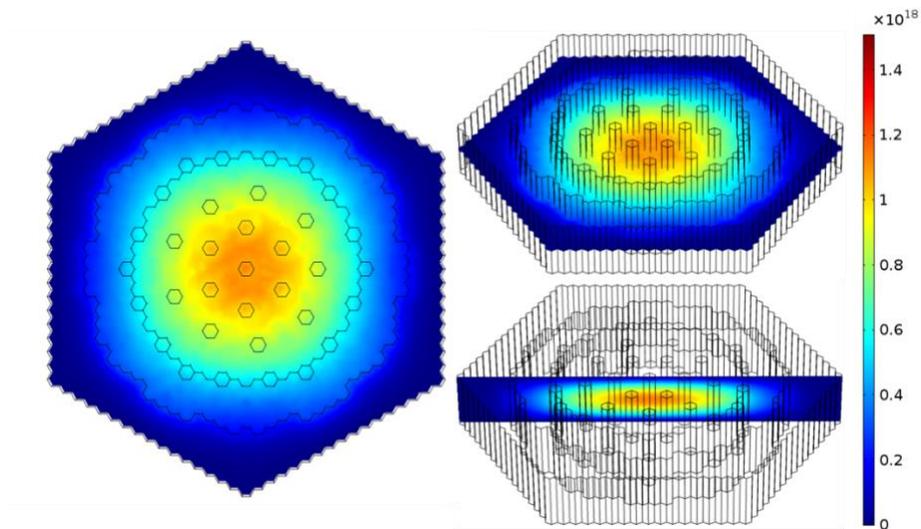
Para comprobar el comportamiento de los modelos acoplados, se calcula el flujo neutrónico, el término fuente y la temperatura para el núcleo a un 100% de potencia nominal y a un 75%. El flujo neutrónico para cada potencia se presenta en las Figuras 6.3 y 6.5, para 100% y 75% respectivamente. A demás se presentan la contribución de los precursores de neutrones retardados, Figuras 6.4 y 6.6.



**Figura 6.3.** Flujo neutrónico a 100% de potencia [ $nv's$ ].



**Figura 6.4.** Distribución de los precursores de neutrones retardados (6 grupos) a 100% de potencia [ $\text{precursores} / \text{cm}^3$ ].

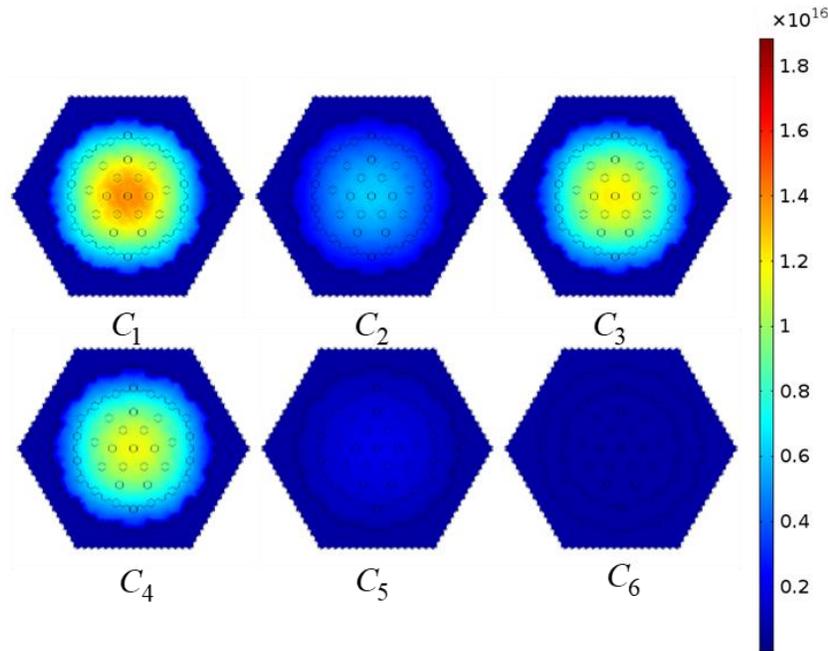


**Figura 6.5.** Flujo neutrónico a 75% de potencia [ $n\nu's$ ].

En estas figuras se observa el comportamiento del flujo, el valor máximo está en el centro del núcleo, y debido a la geometría y las propiedades de los materiales, el flujo disminuye a

través del núcleo, e inicialmente, el flujo neutrónico es cero en el área externa del núcleo, correspondiente a la zona reflectora.

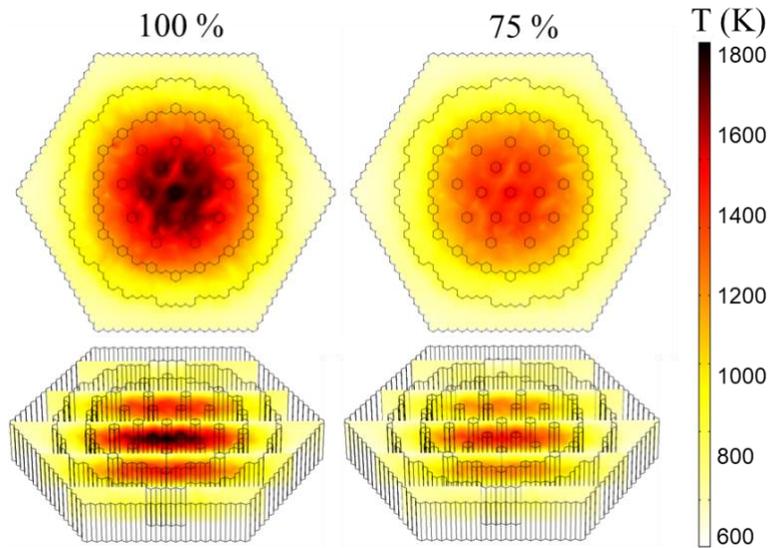
Para el 75% de potencia, el flujo de neutrones disminuye en magnitud, pero el comportamiento es el mismo, teniendo el valor máximo en el centro del núcleo.



**Figura 6.6.** Distribución de los precursores de neutrones retardados (6 grupos) a 75% de potencia [ *precursores / cm<sup>3</sup>* ].

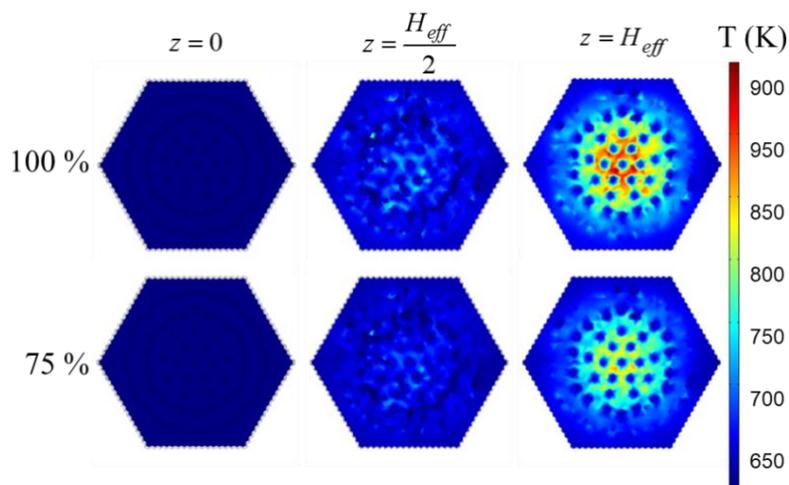
De acuerdo con el diagrama de acoplamiento (Figura 5.1) y la Ec. (0.121), el flujo de calor de fisión volumétrico se obtiene del flujo de neutrones. El flujo de calor se utiliza en el modelo termohidráulico para calcular la temperatura del combustible y del sodio.

La temperatura del combustible para el 100% y el 75% de la potencia se presenta en la Figura 6.7. La temperatura máxima está en el centro del núcleo y es de alrededor de 2000 K (1727 °C), el valor promedio de la temperatura del combustible al 100% es 1499 K, un grado por debajo del valor del diseño (1500 K) y 1253,93 K para el 75% de la potencia. En el modelo en tres dimensiones es posible observar los perfiles radial y axial que se generan en la temperatura del núcleo. La mayor temperatura se obtiene en el centro del núcleo, pero en caso de alguna perturbación, será posible identificar las zonas más calientes del reactor.



**Figura 6.7.** Temperatura del combustible a 100% y 75% de potencia.

Para la temperatura del metal líquido refrigerante (sodio), se presenta la proyección de la temperatura en el plano  $xy$  en tres diferentes alturas del núcleo,  $z = 0, \frac{H_{eff}}{2}, H_{eff}$ , con la finalidad de observar el comportamiento debido a la velocidad del fluido y a la altura. La temperatura promedio a 100% de potencia, es 813.63 K, cinco grados debajo del valor de diseño (818.15K). Para 75% de potencia la temperatura es de 777.26 K.



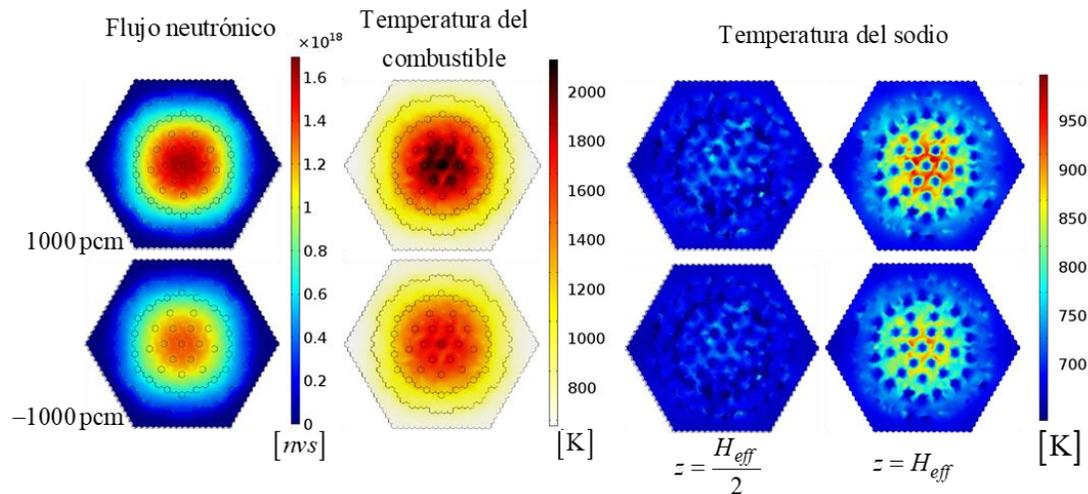
**Figura 6.8.** Temperatura del refrigerante a 100% de potencia y 75% de potencia, en tres posiciones en el eje axial.

## 6.2 Experimentos numéricos

Una vez que se realiza la implementación del modelo neutrónico y el modelo de transferencia de calor, se realizan algunos experimentos numéricos de reactividad. Se presentan tres escenarios: 1) un cambio global en la reactividad, 2) un cambio en el sistema de control secundario de reactividad, y 3) un cambio en una barra de control. El cambio de reactividad es positivo y negativo para analizar el comportamiento del flujo de neutrones, la temperatura del combustible y la temperatura del sodio.

### 6.2.1 Reactividad global

Como primer experimento numérico, se aplica un cambio global de reactividad, es decir, que se agrega un valor de reactividad al valor inicial de reactividad, dado por la Ec. (0.115). El efecto del cambio en el flujo neutrónico, la temperatura del combustible y la temperatura del sodio se presentan en la Figura 6.9. En la parte superior de la figura se aplicó un aumento de 1000 pcm en la reactividad. En este caso, el aumento del flujo neutrónico provocó un cambio positivo de la temperatura del combustible y de la temperatura del sodio. En la parte inferior de la figura se aplicó un cambio de -1000 pcm, como se esperaba, el flujo neutrónico disminuye a medida que las temperaturas del combustible y del sodio disminuyen.



**Figura 6.9.** Efectos en el núcleo debido a un cambio de reactividad global.

En la Tabla 6.1 (a) se muestran los valores de cambio de temperatura del sodio debido a la inserción de reactividad, también se incluyen los valores de temperatura promedio del

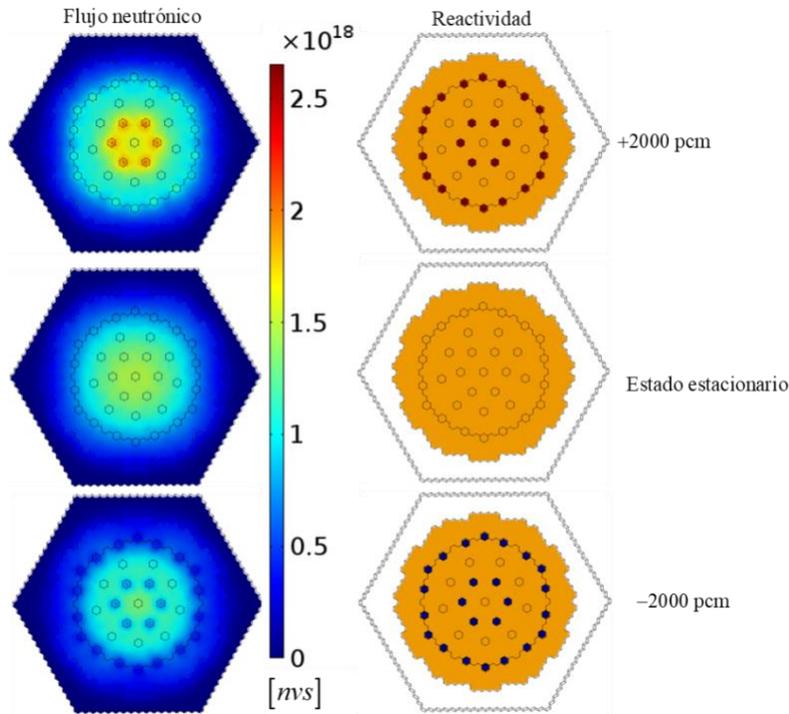
combustible y flujo de neutrones. En este experimento, el comportamiento del flujo neutrónico y las temperaturas se mantiene uniforme, debido a que el cambio se aplica de manera uniforme.

**Tabla 6.1.** Parámetros del núcleo del SFR en función de la reactividad (a) cambio global, (b) cambio en el sistema secundario de control, y (c) cambio en una barra de control.

Reactividad	Temperatura de salida del sodio [K]	Temperatura promedio del combustible [K]	Flujo neutrónico máximo [nv's]	Flujo neutrónico promedio [nv's]	Potencia [W]	
<b>Estado estacionario</b>	811.87	1439.73	1.51064E+18	3.43112E+17	3.60161E+09	
<b>a)</b>	<b>(+)1000 pcm</b>	826.73	1517.97	1.66349E+18	3.78942E+17	3.97423E+09
	<b>(-)1000 pcm</b>	799.01	1371.83	1.37793E+18	3.12125E+17	3.27903E+09
<b>b)</b>	<b>(+)2000 pcm</b>	830.45	1535.48	2.08446E+18	3.88842E+17	4.05758E+09
	<b>(-) 2000 pcm</b>	790.72	1330.10	1.38352E+18	2.91456E+17	3.08162E+09
<b>c)</b>	<b>(+) 2000 pcm</b>	813.54	1452.15	2.06422E+18	3.47109E+17	3.64230E+09
	<b>(+) 2000 pcm</b>	810.75	1431.37	1.50998E+18	3.40443E+17	3.57412E+09

### 6.2.2 Reactividad en el sistema de control secundario

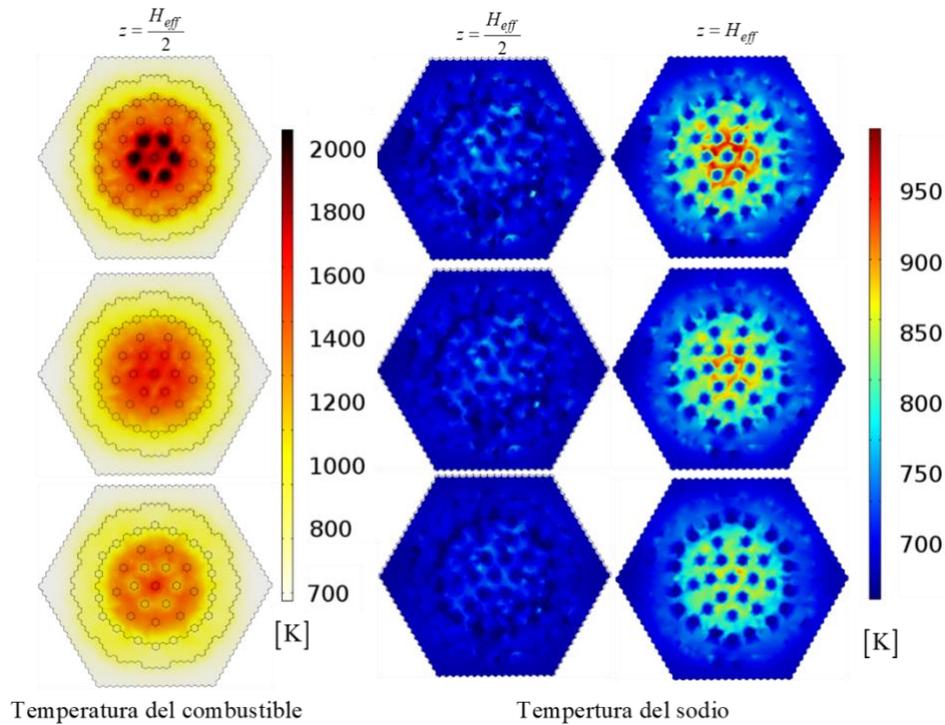
El segundo experimento, es el cambio de reactividad del sistema de control secundario, simulando un movimiento de este sistema de control. En la Figura 6.10, se presenta la reactividad en el núcleo, el valor inicial de reactividad (centro de la figura), como la inserción de la reactividad positiva (2000 pcm) y negativa (-2000 pcm) en el sistema de control. Las figuras del lado derecho muestran los ensambles del sistema de control secundario en donde se modificó la reactividad para el experimento. Es posible observar el aumento del flujo neutrónico cuando se inserta una reactividad positiva, el campo del flujo se expande hacia afuera. En el caso de la inserción negativa, se observa la disminución del flujo neutrónico en la región externa del núcleo, concentrándose principalmente en la región interna.



**Figura 6.10.** Comportamiento del flujo neutrónico [ $nv's$ ] debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario.

El cambio de reactividad se realiza en algunos conjuntos específicos, correspondientes al sistema de control secundario, provocando un cambio en el flujo de neutrones. El comportamiento del flujo de neutrones no es uniforme debido a la inserción de reactividad, para el caso de inserción positiva el flujo aumenta alrededor de las barras de control, en caso contrario, para una inserción negativa, el flujo disminuye alrededor de los conjuntos del sistema de control.

En la Figura 6.11 se muestra el comportamiento de la temperatura del combustible y la temperatura del sodio con un cambio en la reactividad en el sistema de control secundario. A diferencia del primer experimento, en este caso la distribución de temperaturas no es uniforme. Es posible observar este efecto en la temperatura del combustible principalmente, con un aumento de la reactividad la temperatura del combustible aumenta de cerca que las barras de control, y con una inserción de reactividad negativa, la temperatura disminuye debido a la disminución del flujo de neutrones. Estos cambios en la temperatura del combustible impactan directamente en la temperatura del sodio.

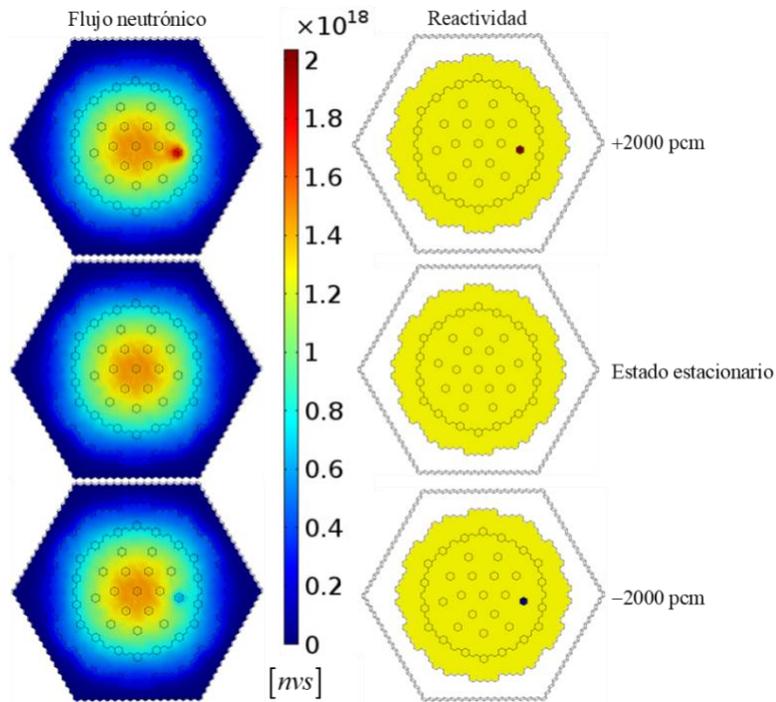


**Figura 6.11.** Comportamiento de la temperatura debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario.

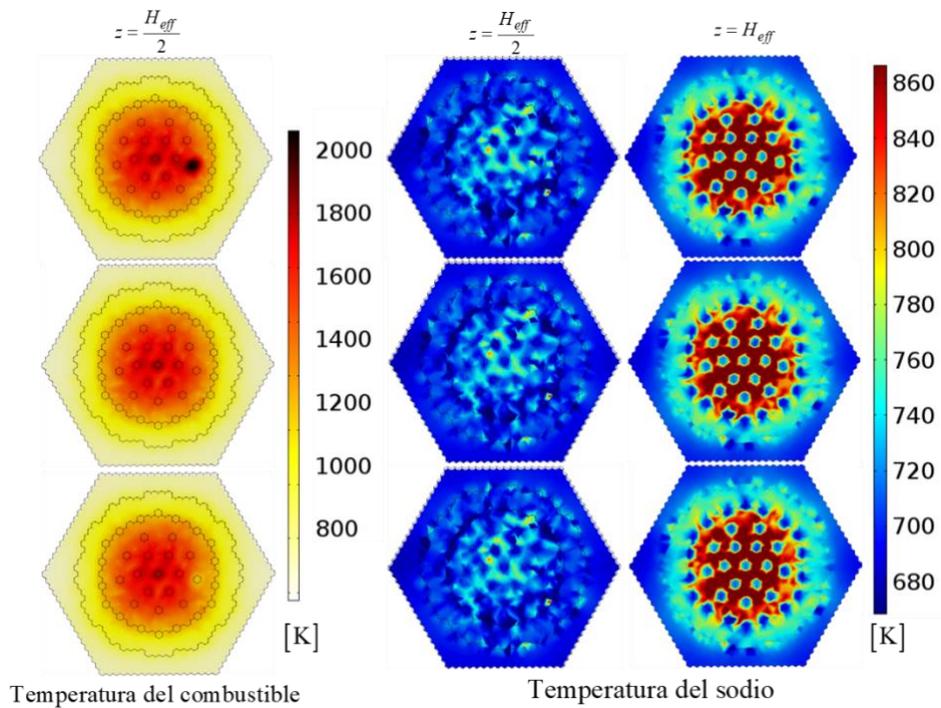
En la Tabla 1 (b), se presentan los valores de la temperatura en el núcleo, como el flujo de neutrones y la potencia. En este caso, el cambio en la potencia es relevante, sin embargo la temperatura promedio del combustible no cambia significativamente, pero es posible que la región donde el flujo de neutrones aumenta la temperatura del combustible aumenta, en este caso, es necesario hacer un análisis más específico en esta región, pero desde el perfil global del núcleo es posible identificar estos puntos a analizar.

### 6.2.3 Reactividad en una barra 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 que se agrega es de 2000 pcm y -20000 pcm. La Figura 6.12, muestra la reactividad en el núcleo y la barra de control seleccionada para hacer el cambio de reactividad. En el lado izquierdo de la figura es posible observar el impacto de la reactividad en el flujo de neutrones, en este caso el comportamiento del flujo no es uniforme alrededor de la varilla modificada.



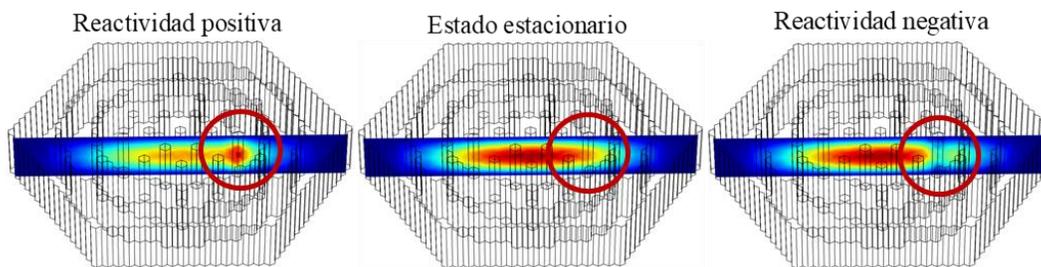
**Figura 6.12.** Comportamiento del flujo neutrónico [ $nv's$ ] debido al cambio de reactividad en una barra de control.



**Figura 6.13.** Comportamiento de la temperatura debido al cambio de reactividad en el sistema de control secundario.

El cambio en la reactividad de una barra de control genera un cambio en la temperatura del combustible y del sodio de manera más local, el efecto de este cambio en la temperaturas se presenta en la Figura 6.13. Como se observa, la temperatura cambia en la región circundante a la barra de control en donde se realizó la inserción de reactividad. En el caso del combustible, la temperatura esta alrededor de 2000K, lo que indica que ahí hay un punto importante de calor que debe ser atendido.

En la Tabla 6.1 (c), se presentan los valores de temperatura del combustible y del sodio, como el flujo de neutrones y la potencia. En este caso, el cambio en la potencia y temperaturas promedio es pequeño, pero es posible que la región donde el flujo de neutrones aumente, la temperatura del combustible aumente o disminuya. En este caso, es necesario hacer un análisis más específico en esta región, pero el perfil global permitió identificar las áreas para realizar un análisis específico.



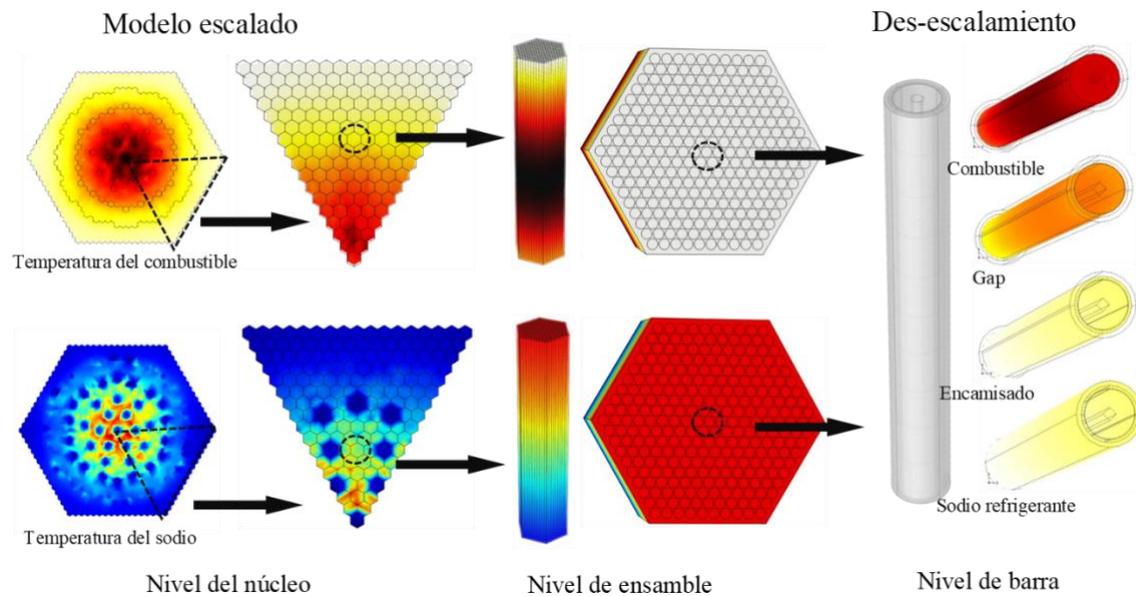
**Figura 6.14.** Comportamiento del flujo de neutrones debido a la inserción de reactividad positiva y negativa en una barra de control.

En la Figura 6.14, se presentan cortes transversales del núcleo, para observar el efecto del cambio de reactividad en una barra de control en el flujo de neutrones. Es posible ver el impacto en la distribución del flujo de neutrones, generando un cambio en esta sección del núcleo.

## 7. Análisis multi-escala

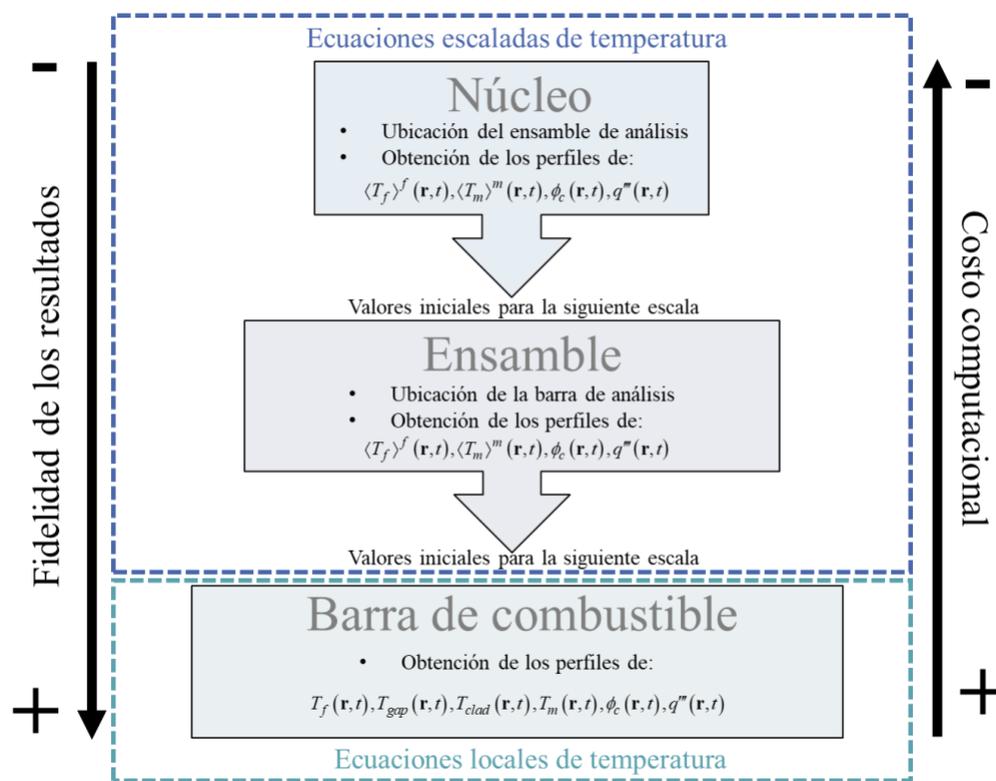
En la Sección 3 se presentó el modelo de transferencia de calor a mayor escala y fue acoplado con el modelo neutrónico (Sección 4). Posteriormente, se implementó en un modelo 3D del núcleo de un SFR para obtener la distribución de la temperatura del combustible y del sodio. Este modelo permite conocer el comportamiento del núcleo completo y la distribución del flujo neutrónico, la temperatura del combustible y la temperatura del sodio. Si un área del núcleo presenta una perturbación como se presenta en la Sección 6, es posible observar el efecto en el núcleo, utilizando menos tiempo y recursos computacionales. Esto es una ventaja, pero con estos resultados solo es posible examinar una distribución global de la temperatura del combustible (promedio de la barra de combustible, gap, revestimientos y materiales de estructura) y la temperatura del sodio, es decir, tener una aproximación del flujo de neutrones y comportamiento de transferencia de calor.

En cuanto a la fidelidad de los resultados, con el método de escalamiento se modera la fidelidad, por lo anterior, para obtener una mayor fidelidad en el resultado se utiliza un proceso de “des-escalamiento”, para obtener resultados a nivel de ensamble y barra de combustible.



**Figura 7.1.** Escalas de análisis en el núcleo del reactor.

En la Figura 7.1, se presentan los niveles en cada escala, en el lado izquierdo se presenta el modelo escalado, en esta sección se presenta la distribución de temperatura del combustible y sodio, luego, la información de este nivel se envía al nivel de ensamble, en donde las temperaturas se calculan mediante un modelo escalado (Pérez-Valseca et al., 2021). Posteriormente, para conocer la información a nivel de la barra de combustible es necesario desarrollar un modelo de cada sección de la barra de combustible, para obtener la información de la temperatura de la pastilla de combustible, la temperatura del gap, la temperatura del encamisado y la temperatura del sodio. El modelo de este nivel se basa en el modelo de subcanal (Todreas y Kazimi, 1990) y fue desarrollado en el trabajo de Larios-Ramírez (2021).

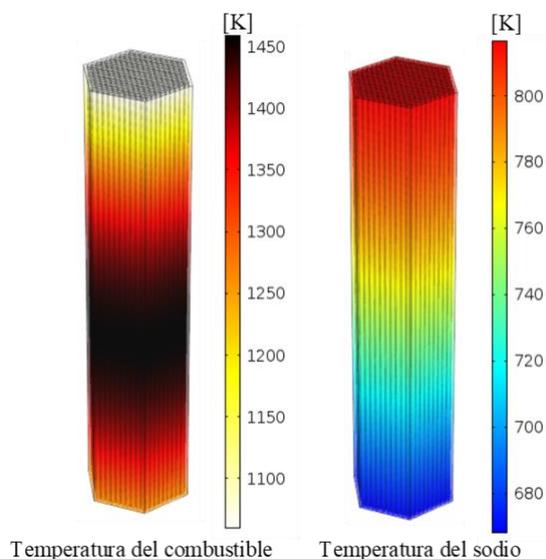


**Figura 7.2.** Proceso de “des-escalamiento” en el núcleo del reactor.

En la Figura 7.2 se presenta el proceso de “des-escalamiento” propuesto para incrementar el análisis en las diferentes escalas del reactor. Como se observa, se consideran tres escala, la mayor es la escala a nivel del núcleo, en donde se modelan todas los ensambles de combustible y del reflector del núcleo a partir del modelo escalado de transferencia de calor

y el modelo de difusión de neutrones. El siguiente nivel considera los ensambles de combustible, modelando la transferencia de calor con el modelo escalado, a esta escala también es posible modelar los procesos neutrónicos con la ecuación de difusión. El tercer nivel es el de las barras de combustible, en donde se modela cada sección de la barra y el refrigerante con ecuaciones locales. En este caso el modelo de transferencia de calor se acopla con el modelo de la cinética puntual.

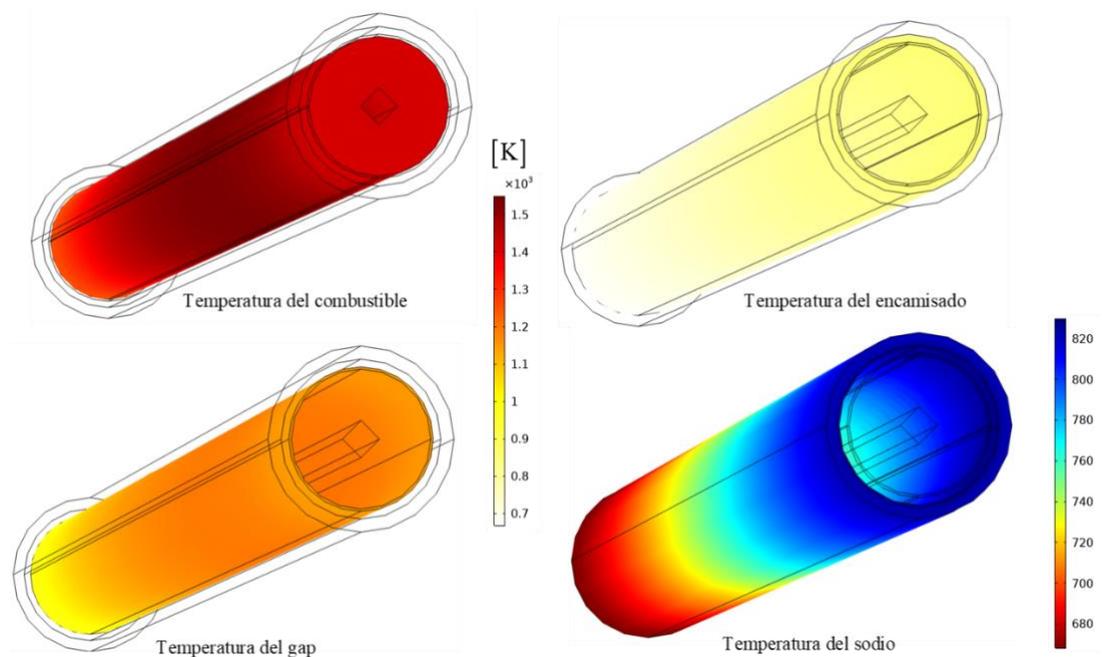
Dos factores importantes al analizar la escala es la fidelidad de los resultados y el costo computacional. Al pasar de una escala menor a mayor, la fidelidad es moderada, pero se obtiene una disminución en el costo computacional, además de que es posible visualizar todo el núcleo. Al tener resultados en la escala mayor, se sugiere pasar de una escala mayor a una menor para aumentar la fidelidad de los perfiles, ubicando los puntos de interés y la información de una manera más eficiente.



**Figura 7.3.** Temperatura del combustible y del sodio en el ensamble de combustible.

La temperatura del combustible y del sodio en el ensamble de combustible, obtenida por el modelo de transferencia de calor a mayor escala, se presenta en la Figura 7.3. En el caso del perfil de temperatura del combustible, se refleja la distribución de potencia, teniendo el máximo en el medio de la altura. Para la temperatura del sodio, el máximo se obtiene en la

parte superior de la altura del conjunto, los valores obtenidos son cercanos a los valores de diseño.



**Figura 7.4.** Temperatura del combustible, gap, encamisado y sodio. (Larios-Ramírez, 2021).

Con la información del ensamble se obtiene la distribución de temperatura del combustible, gap, encamisado y sodio. En la Figura 7.4 se presentan estos perfiles de temperatura, los cuales se obtuvieron con base en la información del comportamiento del núcleo escalado. Los valores obtenidos se encuentran en el margen de los valores de diseño (Tabla 1.1). Los recursos computacionales en este cálculo son más grandes que los utilizados para el modelo escalado, por lo que suponer simular todas las barras de combustible de un ensamble o de todo el núcleo, requeriría una gran cantidad de recursos computacionales.

## Conclusiones

Aplicando el método de promediado volumétrico, se desarrolló el modelo de dos ecuaciones para el proceso de transferencia de calor en el núcleo de un reactor SFR, que incluye una fase sólida (combustible) y una fase líquida (metal líquido). De esta forma se obtuvieron los coeficientes efectivos relacionados con la transferencia de calor conductiva y convectiva en el contexto de las variables de cerradura. Se estimaron los coeficientes efectivos resolviendo los problemas de cerradura en una celda unitaria representativa del conjunto de combustible, que es periódica en el dominio. A su vez, el campo de velocidad a escala de pin se obtuvo mediante la solución numérica de la ecuación del momento en condiciones turbulentas, que a menudo se encuentran en las operaciones de los reactores nucleares.

Se presentan los valores numéricos de las componentes de los tensores de conductividad y otros nuevos coeficientes asociados con los fenómenos convectivos, así como el coeficiente de transferencia de calor. Para validar la formulación del modelo escalado y los coeficientes efectivos involucrados, la solución del modelo escalado se comparó con la simulación numérica directa a escala de pin, en un ensamble de combustible representativo. Los resultados del modelo escalado son similares a los obtenidos con el modelo matemático a escala de pines, este último con un requerimiento computacional mayor pero con mayor fidelidad en los resultados.

La idea de derivar un modelo escalado es modelar el comportamiento del núcleo del reactor sin perder información de cada zona.

Con estos resultados, es posible observar que el análisis multi-escala propuesto, permite observar el impacto de los cambios de reactividad en las temperaturas del núcleo del reactor, sin utilizar muchas herramientas computacionales complejas. Sin embargo, la fidelidad de los resultados disminuye, ya que no es posible realizar un análisis térmico en cada sección de la barra de combustible, lo que impide verificar las temperaturas específicas del encamisado o temperatura máxima en la pastilla del combustible.

El modelo escalado fue acoplado un modelo neutrónico que parte de la ecuación de difusión de neutrones. Los modelos fueron implementados en una geometría 3D basada en el núcleo de un SFR, para obtener perfiles del flujo de neutrones (potencia térmica), temperatura del combustible y temperatura del sodio.

Los modelos acoplados permiten obtener el comportamiento del flujo neutrónico y las temperaturas del núcleo, incluidas las zonas de combustible y reflector. Con esta aproximación disminuye el uso de recursos computacionales, pero se modera la fidelidad de los resultados.

Esta propuesta tiene como finalidad disminuir los recursos computacionales y el tiempo de cálculo, comenzando por el núcleo completo y terminando en una barra específica. Los resultados obtenidos en este trabajo son cercanos a los valores de diseño de la temperatura del combustible y la temperatura del sodio, lo que demuestra que el uso de modelos escalados podría proporcionar buena información sobre el núcleo del reactor.

Para aumentar el grado de fidelidad en el análisis, se presenta un proceso de des-escalamiento del núcleo del reactor, que considera la escala de un conjunto combustible y el problema directo con varios pines hasta la escala más pequeña que es un pin de combustible en el metal líquido circundante. Este punto es de particular importancia para el análisis de puntos calientes en el núcleo del reactor.

En los experimentos numéricos de reactividad (Sección 6.2), se demostró que los perfiles globales obtenidos por modelos a escala superior nos permiten observar el comportamiento del núcleo utilizando menos recursos computacionales, y es posible identificar las zonas que necesitan un análisis detallado debido a alguna perturbación. El uso de un proceso de reducción de escala nos permite obtener un análisis detallado, aumentando la fidelidad de los resultados.

## Recomendaciones

Con base en los resultados obtenidos en este trabajo, se realizan las siguientes recomendaciones:

- Realizar pruebas de validación adicionalmente a la escala del ensamble.
- Análisis transitorio del reactor SFR con el modelo multi-escala.
- Acoplar un modelo de difusión de neutrones con más de un grupo de energía.
- Considerar el fenómeno de transferencia de calor por radiación en las ecuaciones escaladas de transferencia de calor.
- Desarrollar una teoría metodológica rigurosa de des-escalamiento a partir de la información a escala del reactor, para obtener información hasta la escala de la barra de combustible, pasando por los ensambles de combustible y ensambles de barras de control.
- Explorar un modelo de las desviaciones espaciales del flujo de calor por unidad de volumen de origen nuclear. Para lo cual se requiere desarrollar un modelo promedio del reactor de los procesos neutrónicos.
- Realizar un análisis del modelo Kappa-épsilon para el modelo de flujo turbulento de los metales líquidos.
- Explorar la inclusión de transferencia de calor por radiación en el modelo de transferencia de calor, así como la linealización de las ecuaciones debido al término de temperatura a la cuarta potencia.
- Incluir más de un grupo de energía en el modelo de difusión de neutrones.

## Nomenclatura

$A_m$	Área de flujo del metal [ $m^2$ ]
$A_{fm}$	Interface sólido-fluido [ $m^2$ ]
$a_\nu h$	Coefficiente escalado de transferencia de calor volumétrico [ $W/m^3K$ ]
$b_{\gamma\gamma}$	Variable de cerradura para la fase $\gamma$ ( $\gamma = f, m$ ) [ $m^{-1}$ ]
$C_i$	Concentración de neutrones retardados[-]
$C_p$	Calor específico [ $J/kgK$ ]
$D$	Coefficiente de difusión de neutrones [ $cm$ ]
$H_{eff}$	Longitud-extrapolada $z$ del núcleo del reactor [ $m$ ]
$\mathbf{I}$	Tensor identidad [-]
$K_D$	Constante Doppler [-]
$\mathbf{K}_{\gamma\gamma}$	Coefficiente efectivo térmico en la ecuación macroscópica de $\nabla\langle T_\gamma \rangle^\gamma$ [ $W/mK$ ]
$k$	Conductividad térmica [ $W/mK$ ]
$L_a$	Longitud característica del ensamble [ $m$ ]
$\ell$	Longitud característica en la escala local [ $m$ ]
$\mathbf{n}_{fm}$	Vector normal unitario apuntando de la fase sólida a la líquida [-]
$N_i$	Numero de núcleos fisiles por unidad de volumen [-]
$P_x$	Potencia del reactor [ $W$ ]
$Q$	Fuente externa de neutrones [ $nv's$ ]
$q'''$	Fuente de calor [ $W/m^3$ ]
$s_f$	Variable de cerradura en la ecuación macroscópica ( $\langle T_m \rangle^m - \langle T_f \rangle^f$ ) [-]
$T$	Temperatura [ $K$ ]
$\langle T_\gamma \rangle^\gamma$	Temperatura promedio intrínseca para la fase $\gamma$ ( $\gamma = f, m$ ) [ $K$ ]
$\tilde{T}_\gamma$	Desviación espacial de la temperatura en la fase $\gamma$ [ $K$ ]
$t$	Tiempo [ $s$ ]
$\mathbf{u}_{\gamma\gamma}$	Término conductivo-convectivo en la ecuación macroscópica de $\nabla\langle T_\gamma \rangle^\gamma$ [ $W/m^2K$ ]
$V_x$	Volumen del núcleo [ $m^3$ ]
$V$	Región de promediado [ $m^3$ ]
$\mathbf{v}$	Campo de velocidad [ $m/s$ ]
$\langle \mathbf{v}_m \rangle^m$	Velocidad intrínseca de la fase $m$ [ $m/s$ ]
$\tilde{\mathbf{v}}_m$	Desviaciones espaciales de la velocidad [ $m/s$ ]
$\mathcal{U}$	Velocidad del neutrón [ $m/s$ ]
$w_f$	Energía recuperable por evento de fisión [ $eV$ ]

$x_{eff}$	Longitud extrapolada del núcleo coordenada x [m]
$y_{eff}$	Longitud extrapolada del núcleo coordenada y [m]

### Símbolos griegos

$\alpha$	Coefficiente de reactividad [ $K^{-1}$ ]
$\beta$	Fracción total de neutrones retardados [-]
$\varepsilon_\gamma$	Fracción volumen de la fase $\gamma$ ( $\gamma = f, m$ ) [-]
$\lambda_i$	Constante de decaimiento de los neutrones retardados [ $s^{-1}$ ]
$\Lambda$	Tiempo de generación de neutrones [s]
$\rho$	Densidad másica [ $kg/m^3$ ]
$\rho(\mathbf{r}, t)$	Reactividad total [pcm]
$\rho_{ext}(\mathbf{r})$	Reactividad externa [pcm]
$\sigma_f$	Sección eficaz microscópica de fisión [barns]
$\Sigma_a$	Sección eficaz macroscópica de absorción [ $cm^{-1}$ ]
$\Sigma_f$	Sección eficaz macroscópica de fisión [ $cm^{-1}$ ]
$\psi$	Flujo neutrónico [ $nv's$ ]

### Subíndices

D	Doppler
$f$	Fase sólida (combustible)
$m$	Fase líquida (metal líquido)
$c$	región del núcleo
$r$	región del reflector
$\gamma$	Subíndice auxiliar ( $= f, m$ )

## Referencia Bibliográfica

- Aguilar-Madera, F. Valdés-Parada, B. Goyeau, A. Ochoa-Tapia, (2011). *One-domain approach for heat transfer between a porous medium and fluid*. International Journal of Heat and Mass Transfer 542089-2099.
- 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.
- Anderson T.B., R. Jackson. (1967). *A fluid mechanical description of fluidized beds*. Ind. Eng. Chem. Fundamentals 6 527-539.
- Aufiero M., A. Cammi, C. Fiorina, L. Luzzi and A. Sartori, (2013). *A multi-physics time-dependent model for the Lead Fast Reactor single-channel analysis*. Nuclear Engineering and Design, 256, 14-27.
- Auriault, J. L., and Ene, H. I., (1994). *Macroscopic modeling of heat transfer in composites with interfacial thermal barrier*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 37(18) 2885
- Bereznev, V. (2016). *Nodal SN-Method for HEX-Z geometry*. Nuclear Energy and Technology 2 (20-23).
- Billings, J., Deyton, J., Forest, S., Lingerfelt, E. y Wojtowicz A. (2015) *A domain-specific analysis system for examining nuclear reactor simulation data for light-water and sodium-cooled fast reactors*. Annals of nuclear Energy. Volumen 85 (856-868).
- Bubelis, E., Tosello, A., Pfrang, W., Schikorr, M., Mikityuk, K., Panadero, A., Martorell, S., Ordóñez, J., Seubert, A., Lerchl, G., Stempniewicz, M., Alcaro, F., De Geus, E., Delmaere, T., Pomerouly, S. y Wallenius, J. (2012). *Systems codes benchmarking on a low sodium void effect SFR heterogeneous core under ULOF conditions*. Nuclear Engineering and Design. Vol 320(325-345).
- Buiron et al., (2017). *Benchmark for uncertainty analysis in Modelling (UAM) for design, operation and safety analysis of SFRs, core definitions*. AEN-WPRS.
- Chen, R. Li, A. Rineiski, W. Jäger. (2015). *Macroscopic pin bundle model and its blockage simulations*. Energy Conversion and Management 91, 93–100.

- Cinotti, L., Smith, G., Artiolo, C., Grasso, G. y Corsini, G. (2010). *Lead-Cooled Fast Reactor (LFR) Design, Safety, Neutronics, Thermal Hydraulics, Structural Mechanics, Fuel, Core, and Plant Design*. Handbook of Nuclear Engineering. 2749-2840.
- COMSOL Multiphysics, (2021) «Navier-Stokes Equation,» Multiphysics Cyclopedia, [En línea]. Disponible en: <https://www.COMSOL.com/multiphysics/navier-stokes-equations>.
- CFD-Online, (2021) «K-epsilon Models,» [En línea]. Disponible en: [https://www.cfd-online.com/Wiki/Kepsilon\\_models](https://www.cfd-online.com/Wiki/Kepsilon_models).
- Cushman, J.H., (1990). *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*. Academic Press, London.
- Damiani, L.; Giribone, P.; Revetria, R.; Pini Prato A. (2015). *A passive decay heat removal system for the lead cooled fast reactor demonstrator “Alfred”*. Progress in Nuclear Energy, 83, 294-304.
- Davit, Y. et al. (2013). *Homogenization via formal multiscale asymptotics and volume averaging: How do the two techniques compare?.* Advances in Water Resources. 62 178-206.
- del-Valle-Gallegos, E., López-Solís, R., Arriaga-Ramírez, L., Gómez-Torres, A. y 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).
- Derstine, K.L (1982). *DIF3D: A Code to Solve One-, Two-, and Three-Dimensional Diffusion Theory Problems*. ANL-82-64, Argonne National Laboratory.
- Du, J. Shan, B. Zhang and L. K.H. Leung, (2019). *Thermal-hydraulics analysis of flow blockage events for fuel assembly in a sodium-cooled fast reactor*. International Journal of Heat and Mass Transfer 138 496–507.
- Dubey A. and A. K. Sharma, (2018). *Melting and multi-phase flow modelling of nuclear fuel in fast reactor fuel rod*. International Journal of Thermal Sciences. 125 256–272.
- Duderstadt, J. J., & Hamilton, L. J. (1976). *Nuclear reactor analysis*. New York: Wiley.
- 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.

- Esquivel, J. (2015). *Métodos nodales aplicados a la ecuación de difusión de neutrones dependiente del tiempo en geometría hexagonal – Z*. Tesis de Maestría. Instituto Politécnico Nacional.
- Facchini, A., Giusti, V., Ciolini, R., Tucek, K., Thomas, D., and 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.
- Foro nuclear (2021). Foro de la Industria Nuclear Española. <https://www.foronuclear.org/recursos/infografias/generaciones-de-reactores-nucleares/>. Consultado en enero de 2021.
- Gheorghiu, H. (1989) *Group theory applied to a 3-D Hexagonal Response Matrix Method*. Annals of Nuclear Energy, Vol.16 (477-482).
- GIF (2002). *A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems*. U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and the Generation IV International Forum.
- GIF. (2017). *Generation IV International Forum*. [https://www.gen4.org/gif/jcms/c\\_9260/Public](https://www.gen4.org/gif/jcms/c_9260/Public). Consultado en febrero de 2018.
- GIF (2020). *GIF 2020 annual report*. [https://www.gen-4.org/gif/jcms/c\\_178290/gif-2020-annual-report](https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_178290/gif-2020-annual-report).
- Glassone, S., Sesonske, A. (1990). *Ingeniería de reactores nucleares*. Reverté
- Goyeau, B. Benihaddadene D., Gobin, D. and Quintard, M, (1997). Averaged momentum equation for flow through a nonhomogeneous porous structure. Transport in Porous Media 28 19-50.
- Grasso, G., Petrovich, C., Mattioli, D., Artioli, C., Sciora, P., Gugiu, D. (2014). *The core design of ALFRED, a demonstrator for the European lead-cooled reactors*. Nuclear Engineering and Design, 287-301.
- Gray, W.G. 1975. *A derivation of the equations for multiphase transport*. Chemical Engineering Science. Vol. 30(229-233)

- Griseri, M., Fiorito, L., Stankovskiy, A., y Vand den Eynde, G. (2017). *Nuclear data uncertainty propagation on a sodium fast reactor*. Nuclear Engineering and Design Vol. 324 (122-130).
- Grötzbach, G., (2013). *Challenges in simulation and modeling of heat transfer in low-Prandtl number fluids*. Nuclear Engineering & Design, vol. 264, p.p. 42-55.
- Grundmann, U., Rohde, U. y Mittag, S. (2000). *DYN3D – three-dimensional core model for steady-state and transient analysis of thermal reactors*. In: Proc. PHYSOR 2000, Pittsburgh, Pennsylvania, USA.
- Howes F.A., S. Whitaker. (1985). *The spatial averaging theorem revisited*, Chem. Eng. Sci. 40 1387-1392.
- Hassan Saadati, Kamal Hadad, Ataollah Rabiee (2018). *Safety margin and fuel cycle period enhancements of VVER-1000 nuclear reactor using water/silver nanofluid*. Nuclear Engineering and Technology.
- IAEA (2012). *Status of Fast Reactor Research and Technology Development*. IAEA-TECDOC-1691. Viena, Austria.
- IAEA (2013). *Status of innovative fast reactor design and concepts*. A supplement to the IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS). Octubre 2013
- IAEA (2017). *International Atomic Energy Agency. Nuclear technology and applications/Energy*. <https://www.iaea.org/topics/energy>. Consultado en febrero de 2018.
- Judd A.M. (2014). *An introduction to the engineering of fast nuclear reactors*. Cambridge University Press. Pág. 8-10
- Kamide H., Ohshima H., Sakai T., Tanaka M., (2015). *Progress of Thermal Hydraulic Evaluation Methods and Experimental Studies on a Sodium-cooled Fast Reactor and its Safety*. NURETH16, Chicago, USA.
- Kislitsina, T., Manturov, G., Nikolaev, M., Pivovarov, V., Seregin, A. y Tsibulya, A. (2013) *Certificate of state registration of computer code no. 2013618540, TRIGEX*. Date of registration: November 11, 2013.
- Larios-Ramírez, Luis Ángel, (2021). *Análisis Multifísico en un Subcanal de un Reactor Nuclear Rápido Enfriado con Sodio*. Tesis de Maestría. Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería en Energía. Universidad Nacional Autónoma de México.

- Lázaro, A., Ammirabile, L., Bandini, G., Darmet, G., Massara, S., Dufour, Ph., Tosello, A., Gallego, E., Jimenez, G., Mikityuk, K., Schikorr, M., Bubelis, E., Ponomarev, A., Kruessmann, R., Stempniewicz, M. (2014). *Code assessment and modelling for Design Basis Accident Analysis of the European sodium fast reactor design. Part I: System description, modelling and benchmarking*. Nuclear Engineering and Design. 266 (1-16).
- 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.
- Li, L. Cao, M. S. Khan and H. Chen, (2017). *Development of a sub-channel thermal hydraulic analysis code and its application to lead cooled fast reactor*. Applied Thermal Engineering 117 443–45.
- Malambu, E., Sobolev, V., Messaoudi, N., Aït Abderrahim, H., Struwe, D., Schikorr, M. y Bubelis, E. (2008). *Preliminary core design of the European lead-cooled system*. En: Proceedings of the 2008 International Conference on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”. PHYSOR-2008, 14–19 de septiembre de 2008. Casino-Kursaal Conference Center, Suiza. pp. 1–11.
- Manservigi, S., Menghini, F., (2015). *CFD simulations in heavy liquid metal flows for square lattice bare rod bundle geometries with a four parameter heat transfer turbulence model*. Nuclear Engineering and Design, Volume 295, 2015, 251-260.
- Mikityuk, K., Pelloni, S., Coddington, P., Bubelis, E. y Chawla, R. (2005). *FAST: an advanced code system for fast reactor transient analysis*. Annals of Nuclear Energy. 32 (1613–1631)
- Mikityuk, K., Schikorr, M. (2013). *New transient analysis of the Superphénix start-up tests*. En: Proceedings of International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Safe Technologies and Sustainable Scenarios (FR13). 4–7 de marzo de 2013, Paris, Francia.
- Moyne, C.. (1997) *Two-equation model for a diffusive process in porous media using the volume averaging method with an unsteady-state closure*. Advances in Water Resources, 20(2-3) 63-76.

- Municchi, F., Icardi, M., (2020). *Generalized multirate models for conjugate transfer in heterogeneous materials*, Physical Review Research 2.
- Nikiti, E., Fridman, E. y 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).
- Nouri-Borujerdi, S.I. Tabatabai Ghomsheh. (2015) *An improved porous media approach to thermal-hydraulics analysis of high-temperature gas-cooled reactors*. Annals of Nuclear Energy 76, 485–492.
- OECD/NEA (2004). *CRISSUE-S-WP2. Neutronics/Thermal-hydraulics coupling in LWR Technology: State-of-the-art Report (REAC-SOAR)*. ISBN 92-64-02084-5
- Pérez-Valseca, A. (2017). *Análisis Termofluido y Neutrónico de un reactor nuclear rápido enfriado con plomo*. Tesis de Maestría. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.
- Pérez-Valseca Alejandría-D., Quezada-García Sergio, Gómez-Torres Armando-M., Vázquez-Rodríguez Alejandro, Espinosa-Paredes, Gilberto. (2019). *Reactor behavior comparisons for two liquid metal-cooled fast reactors during an event of loss of coolant*, Case Studies in Thermal Engineering, Volume 16, 2019, 100556.
- Pérez-Valseca, A. D., Aguilar-Madera, C. G., Herrera-Hernández, E. C., & Espinosa-Paredes, G. (2021). *Upscaled heat transfer coefficients for a liquid metal-cooled fast nuclear reactor*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 165, 120622.
- Ponciroli, R., Bigoni, A., Cammi, A., Lorenzi, S., Luzzi, L. (2014a). *Object-oriented modelling and simulation for the ALFRED dynamics*. Progress in Nuclear Energy, 71, 15-29.
- Ponciroli, R., Cammi, A., Lorenzi, S., Luzzi, L. (2014b). *A preliminary approach to the ALFRED reactor control strategy*. Progress in Nuclear Energy, **73**, 113-128.
- Quintard, M. and Whitaker, S., (1998) *Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media IV: Large-scale mass equilibrium for solute transport with adsorption*. Adv. Water Resource, 22 33-57.
- Rachamin, R., Wempe, C. y Fridman, E. (2013). *Neutronic analysis of SFR core with HELIOS-2, Serpent, and DYN3D codes*. Annals of Nuclear Energy. 55 (194-2014).

- Roelofs F., Gopala V.R., Van Tichelen K., Cheng X., Merzari E., Pointer W.D., (2013). *Status and Future Challenges of CFD for Liquid Metal Cooled Reactors*. FR13, Paris, France.
- Roelofs F., Gopala V.R., Van Tichelen K., Cheng X., Merzari E., Pointer W.D., (2013A). *Status and Future Challenges of CFD for Liquid Metal Cooled Reactors*. FR13, Paris, France.
- Roelofs F., Gopala V.R., Jayaraju S., Shams A., Komen E., (2013B). *Review of Fuel Assembly and Pool Thermal Hydraulics for Fast Reactors*. Nuclear Engineering & Design, vol. 265, p.p. 1205-1222
- Roelofs F., Shams A., Otic I., Böttcher M., Duponcheel M., Bartosiewicz Y., Lakehal D., Baglietto E., Lardeau S., Cheng X., (2015). *Status and perspective of turbulence heat transfer modelling for the industrial application of liquid metal flows*. Nuclear Engineering and Design, vol 290, p.p. 99-106.
- Sanchez, V., Imke, U., Ivanov, A., & Gomez, (2010)R. *SUBCHANFLOW: a thermal hydraulic sub-channel program to analyse fuel rod bundles and reactor cores*.
- Slattery J.C.. (1967). *Flow of viscoelastic fluids through porous media*, AICHE J. 13 1066-1071.
- Sun, R. L., Zhang, D. L., Liang, Y., Wang, M. J., Tian, W. X., Qiu, S. Z., & Su, G. H. (2018). Development of a subchannel analysis code for SFR wire-wrapped fuel assemblies. *Progress in Nuclear Energy*, 104, 327-341.
- Tenchine, D., Baviere, R., Bazin, P., Ducros, F., Geffraye, G., Kadri G., Perdu, F., Pialla, D., Rameau, B. y Tauveron, N. (2012) *Status of CATHARE code for sodium cooled fast reactors*. Nuclear Engineering and Design. Volumen 245 (140-152).
- Tenchine D., (2010). *Some Thermal Hydraulic Challenges in Sodium Cooled Fast Reactors*. Nuclear Engineering & Design, vol. 240, pp. 1195-1217.
- Todreas, N. E., Kazimi, M. (2001). *Nuclear Systems II. Elements of Thermal Hydraulic Design*. Chapter SIX, Subchannel analysis. Editorial Taylor and Francis. Pág. 209-284.
- TRACE v5. 840 *Theory and User's manual*. Office for Nuclear Regulatory Research. USA
- Uršič M. and M. Leskovar, (2012) *Temperature profile modeling in fuel-coolant interaction codes*. International Journal of Heat and Mass Transfer. 55 5350–5356.

- Valdés-Parada F., (2010) *Integral Formulation for the solution of closure problems in upscaling processes*. Revista Mexicana de Ingeniería Química. 9 53-66.
- Velusamy K., Chellapandi P., Chetal S., Raj B., (2010). *Overview of pool hydraulic design of Indian prototype Fast Breeder Reactor*. Sadhana 35, 97–128.
- Waltar, A.E., Todd, D.R., Tsvetkov, P.V. (2012). *Fast Spectrum Reactors*, Springer, New York, 2012, 720p.
- Whitaker, S.. (1967). *Diffusion and dispersion in porous media*, AICHE J. 13 420-427.
- Whitaker S., (1999). *The Method of Volume Averaging*. Kluwer Academic Publishers. London.
- Won, J., Cho, N., Par, H. y Jeong, Y. (2014) *Sodium-cooled fast reactor (SFR) fuel assembly design with graphite-moderating rods to reduce the sodium void reactivity coefficient*. Nuclear Engineering and Design. 208(223-232).
- Won-Seok, K., Young-Gyun, K. y Young-Jin, K. (2002) *A subchannel analysis code MATRA-LMR for fire wrapped LMR subassembly*. Annals of Nuclear Energy. 29(303-321).
- Wood B., (2009). *The role of scaling laws in upscaling*. Advances in Water Resources, 32 723–736.
- 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.
- Zhou, N.E. Hansen, D.J. Geb, I. Catton. (2011). *Obtaining closure for fin-and-tube heat exchanger modeling based on volume averaging theory (VAT)*, J. Heat Transf. 133 (11)

## Artículos publicados

**A.D. Pérez-Valseca**, S. Quezada-García, A.M. Gómez-Torres, A. Vázquez-Rodríguez, G. Espinosa-Paredes. *Reactor behavior comparisons for two liquid metal-cooled fast reactors during an event of loss of coolant*, Case Studies in Thermal Engineering, Volume 16, 2019, 100556, ISSN 2214-157X. <https://doi.org/10.1016/j.csite.2019.100556>.

**A.D. Pérez-Valseca**, C.G. Aguilar-Madera, E.C. Herrera-Hernández, G. Espinosa-Paredes. *Upscaled heat transfer coefficients for a liquid metal-cooled fast nuclear reactor*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 165, Part A, 2021, 120622, ISSN 0017-9310. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120622>

**A.D. Pérez-Valseca** , G. Espinosa-Paredes, C.G. Aguilar-Madera, E.C. Herrera-Hernández, A.M. Gómez-Torres (2022). *Upscaling and downscaling the heat transfer process coupled with neutronic reflected core for sodium-cooled fast nuclear reactor*. International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 189, 122713. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.122713>