



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA**

FACULTAD DE INGENIERÍA

**Teoría de difusión de neutrones lineal
extendida para sistemas energéticos
nucleares**

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERÍA

CAMPO DEL CONOCIMIENTO EN ENERGÍA

P R E S E N T A

M.I. RODOLFO VÁZQUEZ RODRÍGUEZ



Director de tesis:

DR. GILBERTO ESPINOSA PAREDES

MÉXICO, D. F. 2010

JURADO ASIGNADO:

Presidente: DR. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE

Secretario: DR. GILBERTO ESPINOSA PAREDES

Vocal: DRA. CECILIA MARTÍN DEL CAMPO MARQUEZ

1^{er.} Suplente: DR. JAIME B. MORALES SANDOVAL

2^{do.} Suplente: DR. ALEJANDRO NUÑEZ CARRERA

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

Facultad de Ingeniería-UNAM y Laboratorio de Análisis en Ingeniería de Reactores Nucleares, Jiutepec, Estado de Morelos, México.

TUTOR DE TESIS:
DR. GILBERTO ESPINOSA PAREDES

A handwritten signature in black ink, consisting of several overlapping loops and lines, positioned above a horizontal line.

FIRMA

Agradecimientos

A mis ángeles, y Alejandra, José Alberto y Joseph Alexander

Quiero expresar mi agradecimiento a mi Comité Tutorial, por su profesionalismo, por el seguimiento de este trabajo, por su orientación, por su crítica constructiva, por sus preguntas en los seminarios de avance de cada fin de semestre, por su comprensión,...

Quiero agradecer en especial la labor del Dr. Gilberto Espinosa Paredes, tutor principal y Director de esta tesis doctoral. Sin su apoyo, sin sus ánimos y empuje característicos en él, no hubiera sido posible terminar este trabajo de investigación.

Al Área de Ingeniería en Recursos Energéticos y al Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica (IPH) de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, por permitirme el tiempo necesario para desarrollar este proyecto de investigación doctoral. En este contexto quiero expresar mi agradecimiento al Dr. Eduardo S. Pérez Cisneros y al Dr. Juan José Ambríz García.

A la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM, la más grande Universidad de México, en todos los aspectos.

CONTENIDO

Índice	Página
Agradecimientos	iii
Lista de Figuras	v
Lista de Tablas	vii
Resumen	viii
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN Y MOTIVACIÓN	1
Capítulo 2. Estructura del Núcleo de un Reactor de Agua Ligera	11
Capítulo 3. CONCEPTOS DE TEORÍA DE HOMOGENIZACIÓN CLÁSICA.	16
Capítulo 4. ECUACIÓN FRACCIONAL PROMEDIO VOLUMÉTRICA PARA EL FLUJO NEUTRÓNICO EN REACTORES NUCLEARES.	24
Capítulo 5. CASOS ESPECIALES: LAS ECUACIONES DE ONDA Y DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA DEL FLUJO NEUTRÓNICO EN REACTORES NUCLEARES.	36
Capítulo 6. LA ECUACION DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA EN FORMA CERRADA.	55
Capítulo 7. FACTORES DE CORRECCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA.	67
Capitulo 8. COMPARACIÓN DE LA TEORÍA DE DIFUSIÓN LINEAL EXTENDIDA RESPECTO A LA TEORÍA DE DIFUSIÓN CLÁSICA, MÉTODO DE MONTE CARLO Y TEORÍA DE TRANSPORTE.	73
Capitulo 9. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.	101
Apéndice 1. El método del promedio volumétrico.	105
Apéndice 2. APLICACIÓN DEL ANÁLISIS DE ORDENES DE MAGNITUD.	109
Apéndice 3. CONCEPTOS DE TEORÍA DE TRANSPORTE.	111
Referencias	123

Lista de Figuras

Figura	Página
Fig. 2.2.1. Vista superior del núcleo del reactor.	12
Fig. 2.2.2 Sección transversal de un ensamble de combustible GE12.	14
Fig. 2.2.3 Sección transversal de un módulo de 4 ensambles con barra de control cruciforme.	14
Fig. 4.1.1. Longitudes características del sistema.	25
Fig. 8.2.3.1. Variación del espesor de moderador y su influencia en el flujo térmico en el sistema.	81
Fig. 8.2.3.2. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico.	83
Fig. 8.2.3.3. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema subcrítico.	84
Fig. 8.2.3.4. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico de dos placas de U-D2O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm.	85
Fig. 8.2.3.5. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico de dos placas de U-H2O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm.	86
Fig. 8.2.3.6. Comparación entre la teoría de difusión lineal extendida contra la teoría de difusión clásica y el método estadístico (MCNPX). Sistema crítico de dos placas paralelas de U-D2O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm.	87
Fig. 8.2.3.7. Comparación entre la teoría de difusión lineal extendida contra la teoría de difusión clásica y el método estadístico (MCNPX). Sistema crítico de dos placas paralelas de U-H2O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm.	88
Fig. 8.3.2.1. Efecto del término de corriente interfacial en la ecuación de balance.	96
Fig. 8.3.2.2. Efecto del término de corriente interfacial hasta 5 trayectorias libres medias.	97
Fig. 8.3.2.3. Efecto del término de corriente interfacial hasta 10 trayectorias libres medias.	98

Figura	Página
Fig. 8.3.2.4 Efecto del término de corrección en la tasa de absorción hasta 5 trayectorias libres medias.	99
Fig. 8.3.2.5. Efecto del término de corrección en la tasa de absorción hasta 10 trayectorias libres medias.	100

Lista de Tablas

Tabla	Página
Tabla 1.1.1 Una propuesta de reactores para el caso de México	10

Resumen

En esta tesis se presentan los resultados relacionados con el establecimiento de un nuevo modelo para la difusión de neutrones en un reactor nuclear. El desarrollo del modelo matemático para el estudio del comportamiento de la población de neutrones en un reactor, se centró en la aplicación de la teoría de difusión junto con el método del promedio volumétrico, en la escala apropiada.

Además de la metodología desarrollada y su aplicación a reactores nucleares, esta tesis contribuye con el desarrollo de expresiones teóricas para las constantes efectivas de la ecuación de difusión de neutrones. Asimismo, se hace un estudio de la influencia de una ecuación constitutiva tipo Maxwell-Vernotte-Cataneo en el balance de neutrones, obteniéndose una ecuación de onda para el flujo de neutrones que caracteriza el movimiento de los neutrones para tiempos menores que el tiempo de relajación.

Por lo tanto la teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis doctoral toma en cuenta los efectos de interfaces combustible-moderador, i.e., heterogeneidades del núcleo de un reactor, así como los efectos temporales en la corriente de neutrones no contemplados por la ley de Fick para la difusión de neutrones.

La validación se hizo comparando la teoría de difusión clásica, teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis, Método de Monte Carlo (MCNPX) y “Benchmarks” analíticos de la Teoría de Transporte de neutrones mono-energéticos para casos asintóticos.

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN Y MOTIVACIÓN

1.1 La energía nuclear en México y el Mundo.

Este trabajo lo iniciaremos haciendo una pregunta: ¿Cuáles serán los principales problemas del mundo dentro de 50 años?

Entre los problemas más relevantes de acuerdo a Richard Smalley, premio Nobel de Química 1996, se pueden enlistar (McReady, 2004):

1. Energía
2. Agua
3. Alimentos
4. Medio Ambiente
5. Pobreza
6. Terrorismo y Guerras
7. Salud
8. Educación
9. Democracia
10. Población

La energía, el agua, los alimentos y el medio ambiente estarán entre los problemas más importantes del mundo. En el caso de la energía, se necesitará satisfacer el suministro energético de 10^{10} personas, es decir entre 30 a 60 Terawatts de capacidad instalada para la población mundial dentro de 50 años (Bookout, 1985; Episodes, 1989).

Actualmente, debido a los niveles de consumo de energía en el mundo, el encarecimiento de los combustibles derivados del petróleo (fuente primaria de

producción de energía actualmente) y la necesidad de los países de producir energía a los mejores costos, la energía nuclear está tomando un nuevo auge; superando obstáculos como el financiamiento de la inversión inicial, proliferación de armas nucleares y terrorismo.

La energía nuclear por su alta densidad energética es atractiva para impulsar el desarrollo, así como el sostenimiento de una planta industrial en la mayoría de los países del mundo, con una tecnología probada y con diseños cada vez más seguros, con costos de producción que compiten con los de las demás alternativas energéticas, con una tasa cero de emisión de gases de invernadero durante la operación y una tasa mínima de emisión de precursores de ozono troposférico en el caso del reprocesamiento de combustible usando el método químico, sin duda conformará parte importante de las políticas energéticas que se tomen en el mundo en los años venideros.

Los reactores nucleares en funcionamiento en el mundo, denotados como reactores de Generación II, fueron instalados en la década de los 70 y 80. Estos incluyen reactores de agua en ebullición y reactores de agua a presión. Diseños de reactores avanzados, han sido desarrollados para ser competitivos respecto a plantas de combustible fósil; concretamente plantas de gas natural. Los reactores de Generación III incluyen al reactor avanzado de agua hirviente (ABWR) y al reactor pasivo de agua a presión (AP1000). Asimismo, la industria nuclear ha continuado el desarrollo de diseños más innovadores designados como Generación III+.

Los reactores de Generación III+ incluyen al reactor enfriado por gas, el reactor modular de lecho de esferas (PBMR), así como innovaciones en los diseños de los reactores ABWR y AP1000. Los reactores de Generación III+ se estima que

disminuirán los costos de generación de electricidad. Sin embargo, la Comisión Reguladora Nuclear de Estados Unidos (NRC) no ha certificado estos diseños, por lo que los costos proyectados tienen grandes incertidumbres. La industria nuclear también tiene planes para las tecnologías de Generación IV, pero estos diseños no estarán disponibles en por lo menos dos décadas, y las estimaciones de sus costos tienen aún mayores incertidumbres.

Actualmente, los estudios y análisis de la energía nuclear en general y en particular los reactores nucleares se han enfocado en contar con ciclos de operación más largos entre recargas y apagados, lo que permite reducir los costos de producción de energía eléctrica aumentando el factor de disponibilidad. Esto se ha logrado parcialmente con el uso de nuevos combustibles a partir de torio o plutonio (Stephen y MacDonald, 2000). El combustible de torio tiene la ventaja de producir menos residuos de alto nivel puesto que produce menos actínidos (Núñez-Carrera, et al., 2004). Por otro lado el creciente interés por el uso de combustible MOX es debido al ahorro de uranio enriquecido, además de que proporciona una solución parcial al problema de los desechos producidos por esta industria (Joo et al., 2000). Se han desarrollado técnicas para la incineración de plutonio y la transmutación de desechos con aceleradores (Accelerator Driven System), que además están considerados para la generación de electricidad (Lilligton, 2004).

En la actualidad los reactores avanzados son de gran interés para la generación de energía eléctrica a gran escala y presentan una amplia variedad en su evolución y diseños revolucionados (Núñez-Carrera et al., 2005).

Un resumen de los principales diseños avanzados que podrían ser considerados para el caso de la construcción de futuras plantas nucleares en México se da en la Tabla 1.1.1. En la elección de los diseños de reactores de agua ligera de generación III y III+ se siguió el criterio de aprovechar el entrenamiento y conocimiento de técnicos mexicanos en la construcción, operación, mantenimiento y licenciamiento de plantas tipo BWR. De la misma forma, el uso de tecnología probada en su diseño, hacen atractiva la elección del reactor ABWR para una nueva planta nuclear en México en el corto plazo.

En el largo plazo, la propuesta de este trabajo va en el sentido de impulsar la investigación y desarrollo de diseños de reactores nucleares de generación III+ y IV. Por sus características de escalabilidad, se pueden construir plantas de potencia basadas en reactores modulares, para la generación de energía eléctrica, así como para su acoplamiento a plantas desalinizadoras de agua de mar.

El caso de los reactores modulares multipropósito representa una opción atractiva para el desarrollo de la energía nuclear en México.

En relación con el agua, las dos opciones más baratas, la constituyen el uso de parte de la electricidad producida por energía nuclear para proporcionar potencia a una planta desalinizadora de agua de mar basada en el método de osmosis inversa, así como la desalinización por medio de un proceso híbrido de destilación basada en múltiples efectos y ósmosis inversa. Ambas opciones utilizarían energía de un reactor nuclear enfriado por gas empleando un ciclo Brayton. Esta alternativa es energéticamente

viable, segura y económica para producir agua potable en México (Palacios Guevara et al., 2009).

En suma, en esta sección se hicieron una serie de propuestas y recomendaciones para el caso de México, en relación con futuras plantas nucleoelectricas basadas en nuevos diseños de reactores. Se discutió la opción de generar electricidad en base a reactores de pequeña escala, así como su uso para la producción de agua potable. Es indudable que esta alternativa energética debería tomarse en cuenta en cualquier política energética y de desarrollo sustentable de nuestro país. Por otra parte, además de ser un motor en la activación de la economía, en México existen varias instituciones con personal altamente calificado con conocimientos para evaluar nuevos diseños de reactores, así como participar en la construcción, operación, mantenimiento y licenciamiento de nuevas plantas nucleares.

En el caso de México, nuestro país no puede apostarle a un desarrollo basado solo en los hidrocarburos. México debe apostarle a un desarrollo basado en la diversificación energética. Debemos involucrarnos en la investigación y desarrollo de alternativas energéticas, entre las que podemos contar a las energías renovables y la energía nuclear.

1.2 Formación de Recursos Humanos en el campo de la Energía Nuclear en México.

La investigación y desarrollo de alternativas energéticas como la fisión nuclear a través de reactores avanzados y energías renovables requerirá de formación de recursos humanos.

En el caso de la Energía Nuclear de potencia se requerirán planes de estudio a nivel licenciatura, maestría y doctorado que contemplen la formación de ingenieros y científicos en las áreas de:

- Construcción, operación, mantenimiento y licenciamiento de reactores de generación III, por ejemplo plantas nucleoelectricas tipo ABWR.
- Impulsar la investigación y contribuir en el desarrollo de reactores nucleares de generación III+ y IV.
- Plantas Nucleares Multipropósito o Multiproceso, capaces de generar no solamente electricidad, sino también agua potable. Por sus características de escalabilidad, las plantas de potencia basadas en reactores modulares, son ideales para la generación de energía eléctrica, así como para su acoplamiento a plantas desalinizadoras de agua de mar.

En cuanto a las aplicaciones no energéticas de la energía nuclear se requerirán planes de estudio a nivel licenciatura, maestría y doctorado en las áreas de:

- Radioprotección. Dosimetría.
- Instrumentación Nuclear.

- Medicina Nuclear (Operación de equipo y diagnóstico)

1.3 Descripción del los capítulos de esta tesis.

Este trabajo contribuye al desarrollo de la energía nuclear en México en el área de Física de Reactores Nucleares.

La idea central en la concepción de este proyecto de investigación doctoral fue aplicar el método del promedio volumétrico en la Ingeniería Nuclear.

Con esta idea en mente en el Capítulo 2 comenzamos resaltando la naturaleza heterogénea del núcleo de un reactor, en particular de un reactor nuclear de agua hirviente (BWR).

En el Capítulo 3 se hace una breve revisión de las técnicas o esquemas de homogenización para la obtención de constantes nucleares que se usan en la ecuación de difusión de neutrones a gran escala.

Continuamos en el capítulo 4 con la derivación de una nueva ecuación para describir las interacciones y desplazamientos (enfoque balístico) de neutrones a través del núcleo de un reactor: la ecuación de onda fraccional para el flujo de neutrones.

Seguimos un razonamiento deductivo y en el capítulo 5 se estudian dos casos especiales de la ecuación general de onda fraccional para el flujo de neutrones. Para el estudio de transitorios muy rápidos se plantea la ecuación de onda para el flujo promedio de neutrones. A su vez se simplifica esta ecuación para el caso de tiempos de relajación igual a cero o despreciable para obtener la ecuación de difusión promedio volumétrica sin cerrar. Es decir, en forma análoga al caso de flujos turbulentos donde se manejan promedios temporales, donde aparece después del proceso de promediar el

problema de cerradura. En nuestro caso, el proceso de promediar respecto al volumen origina también un problema de cerradura que involucra a las desviaciones espaciales del flujo neutrónico. Afortunadamente, en éste último caso, y como se verá en los capítulos que siguen, el problema de cerradura es resuelto, obteniendo un conjunto de ecuaciones cuya única incógnita es el flujo de neutrones promedio.

Partiendo de la ecuación de difusión promedio volumétrica sin cerrar, en el capítulo 6 se resuelve el problema de cerradura obteniéndose la ecuación de difusión promedio volumétrica en forma cerrada. Esta ecuación contiene correcciones al coeficiente de difusión de neutrones, así como dos nuevos términos que tienen que ver con una corrección a la tasa de absorción de neutrones y una contribución de la corriente interfacial a través de la interfase de dos medios o desde una fuente de neutrones a otro medio.

Las expresiones generales para los factores de corrección que aparecen en la ecuación de difusión promedio volumétrica en forma cerrada son simplificadas en el capítulo 7. Se estudia el caso unidimensional del flujo neutrónico a través de interfaces planas. Este caso es el único que se puede tratar analíticamente, obteniéndose como corolario expresiones para el valor máximo y promedio de los factores de corrección.

Respecto a la validación de la teoría desarrollada en esta tesis, en el capítulo 8 se comparan cuatro teorías: Teoría de Difusión Clásica, Teoría de Difusión Lineal Extendida que se propuso en esta tesis, Método Estadístico (MCNPX) y Teoría de Transporte, para el caso de transporte de neutrones en una dimensión en medios finitos y semi-infinitos.

Finalmente, en el capítulo 9 se dan las principales conclusiones y recomendaciones para trabajo futuro relacionado con el conjunto de nuevas ecuaciones que se plantearon en esta tesis.

En suma, algunos de los principales resultados directamente relacionados con esta investigación, los cuales se han sometido a la consideración de los pares nacionales e internacionales, se pueden encontrar en memorias en extenso de congresos nacionales, así como en revistas internacionales con arbitraje de la comunidad científica del campo de la Energía Nuclear (Espinosa-Paredes et al., 2008), (Vázquez-Rodríguez et al., 2008), (García Barrón, et al., 2009), (Vázquez-Rodríguez et al.,2009a), (Vázquez-Rodríguez et al.,2009b).

Tabla 1.1.1 Una propuesta de reactores para el caso de México (Adaptada de Lillington, 2004)

Generación.	Tipo de Reactor.	Localización, Planta de Potencia.	Principales Características.
II	BWR (BWR-5) (Boiling Water Reactor)	Laguna Verde, Veracruz, México.	Fabricante: General Electric (GE). Potencia de 682.5Mw(e) por reactor; es un reactor intermedio o de mediana escala. Contención: Tipo Mark II de ciclo directo.
III	ABWR (Advanced Boiling Water Reactor)	Kashiwazaki-Kariwa, Japón.	Fabricante: GE-Consortio Japonés. Potencia: 1315 Mw(e) por reactor; es un reactor de gran escala. Bomba interna de recirculación. Mecanismo fino de control de barras de control. Contención de la vasija de concreto reforzado. Nuevo sistema ECCS.
III+	ESBWR (Economic Simplified Boiling Water Reactor)	Por determinarse.	Fabricante: General Electric (GE). Versión actualizada del diseño SBWR de GE. Potencia: 1560 Mw(e) por reactor. Recargas: Cada 24 meses. Vida de la planta: 60 años. Características del SBWR: Menor densidad de potencia a la de los BWR convencionales. Menores costos en el ciclo de combustible. Opera con circulación natural en el circuito del refrigerante primario. Certificación en revisión por la USA NRC.
	DISEÑOS FUTUROS:		
	PBMR (MPBR) (Pebble Bed Modular Reactor)	Localización por determinarse. En diseño en Estados Unidos y Holanda. En China existe el único prototipo en operación. Diseño y futura construcción en Sudáfrica detenida debido a un fuerte recorte presupuestal por parte del gobierno sudafricano (Nordling, L., 2010).	Fabricante: Aún no hay planes de comercialización en el mundo. No hay fabricante líder. Cumple los objetivos de diseño de los reactores de IV generación. Potencia: 110-120 Mw (e); es un reactor modular, o de pequeña escala. Opera con un ciclo directo tipo Brayton.
	IRIS (International Reactor Innovative and Secure)	Localización por determinarse. Planes para futura construcción de plantas basadas en este diseño en dos décadas (Año 2030 en adelante).	Fabricante: Westinghouse Potencia: 335 Mw (e) Es un reactor de agua a presión (PWR) de pequeña escala. Pre-solicitud de revisión de certificación sometida a la USA NRC. Característica: Todo el circuito primario y la vasija del reactor estarán alojados en una gran vasija a presión.
IV	Se han considerado varios diseños que se pueden agrupar en reactores térmicos y rápidos. Estos reactores serán enfriados por gas, metales líquidos, sales fundidas o agua ligera a presión.	Localización por determinarse.	Fabricante: Por determinarse. Potencia: Por determinarse. Planes de someter la pre-solicitud de revisión de certificación a la USA NRC en 2013. Característica: En el caso de Estados Unidos de América, se está considerando un reactor tipo VHTR dentro del programa Next Generation Nuclear Plant. En este caso el reactor será enfriado por gas. Temperatura de salida del gas será 750 C.

Capítulo 2

ESTRUCTURA DEL NÚCLEO DE UN REACTOR DE AGUA LIGERA

2.1 Introducción

Antes de empezar a aplicar el método del promedio volumétrico a la neutrónica de reactores nucleares de potencia, describiremos en este capítulo, la estructura del núcleo de un reactor de segunda generación, con el fin de ilustrar las heterogeneidades presentes en un sistema energético nuclear.

2.2 Estructura del Núcleo del Reactor.

Los reactores de agua en ebullición o BWR (Boiling Water Reactor por sus siglas en inglés), son moderados y refrigerados con agua ligera. En el caso de la Central Laguna Verde, se utiliza dióxido de uranio (UO_2) ligeramente enriquecido como combustible, el cual se fabrica en forma de pastillas cilíndricas de aproximadamente el mismo diámetro y altura (1 mm).

El combustible está dispuesto en varillas agrupadas, formando un ensamble de combustible. La forma en que el combustible se ordena dentro de éste es, como ya lo hemos mencionado aquí, juega un papel central en la operación segura del reactor, por lo cual, el contar con ensambles bien diseñados es fundamental para la operación estable del reactor. En la industria nuclear, el diseño del combustible nuclear ha variado con el tiempo tomando en cuenta la experiencia recabada a lo largo de poco más de 50 años de operación de los reactores nucleares en el mundo. Actualmente los ensambles de combustible se componen de arreglos de barras o vainas más esbeltas, con enriquecimientos ligeramente mayores, para por ejemplo, responder a las necesidades de mayor potencia o repotenciación de las plantas nucleares.

Los 444 ensamblajes de combustible forman un arreglo semejante a un cilindro vertical, entre la placa de soporte inferior y la placa guía superior, en lo que se denomina núcleo del reactor. Ver la figura 2.2.1.

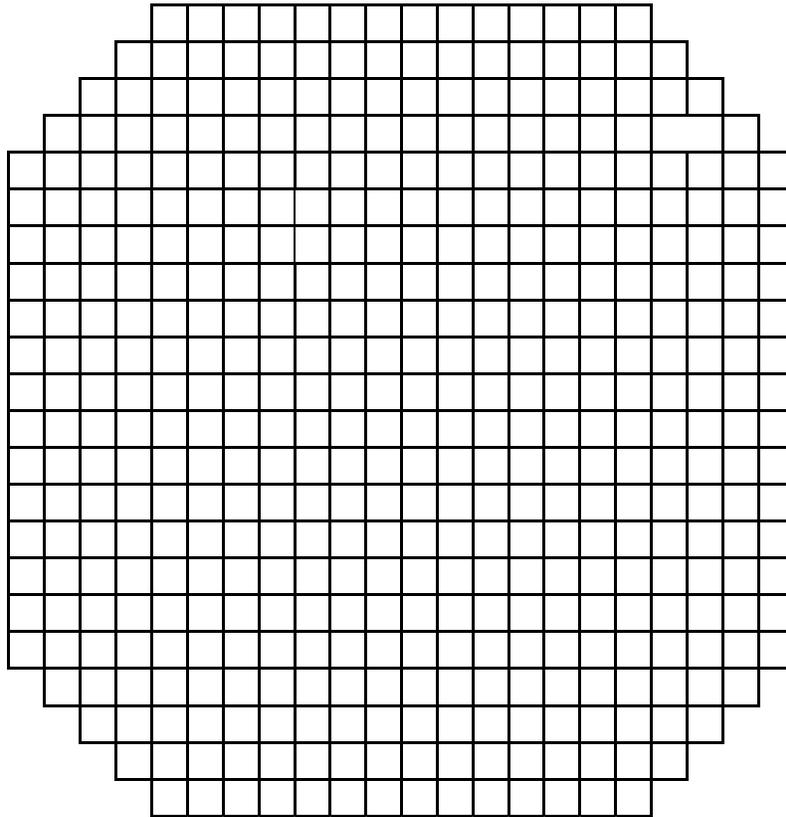


Fig. 2.2.1. Vista superior del núcleo del reactor.

Cada ensamblaje está compuesto de 92 barras con dos canales centrales de agua. Algunas barras que conforman los ensamblajes GE-12, que son los que usa la central Laguna Verde actualmente, son de longitud parcial, sin embargo, la posición que ocupan éstas dentro del ensamblaje es fija para todos los ensamblajes. El hecho de que todas las barras no tengan la longitud total del ensamblaje es, en parte, para aumentar el área de moderación de neutrones y contar con una distribución de potencia axial conveniente.

La Figura 2.2.2 muestra cómo van dispuestas las barras dentro de un ensamble GE12. Las barras de combustible soporte son barras completas que van unidas a la parte superior e inferior del ensamble, por lo cual sirven como soporte de toda la estructura del ensamble. En lo que respecta a las barras de agua centrales del ensamble se puede decir que son canales de agua que con la función de moderar neutrones, y aunque ayudan a la remoción de calor del ensamble, su objetivo principal es evitar máximos en el flujo neutrónico en el centro del arreglo de barras de combustible y contribuir a una distribución de potencia uniforme a través de la sección transversal del ensamble. Por último, los ensambles de combustible GE12 están formados por barras de combustible y el canal de refrigeración que las envuelve. El espacio entre centros de las barras o vainas de combustible, i.e., el “pitch” del arreglo de barras de combustible, define en la dirección radial la zona donde se da principalmente la transferencia de calor entre el combustible y el refrigerante, así como la generación de vapor para producir potencia mecánica y finalmente eléctrica.

La parte del control de la potencia del reactor, se da mediante 109 barras de control que se encuentran colocadas en el interior del núcleo. Estas barras son de forma cruciforme y son movidas individualmente. Ver Figura 2.2.3.

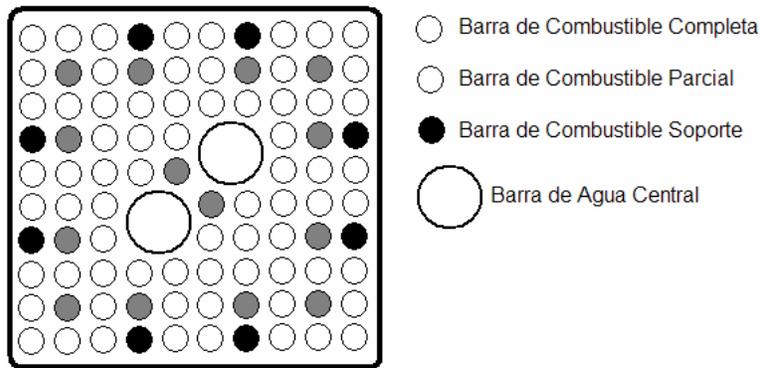


Fig. 2.2.2 Sección transversal de un ensamblaje de combustible GE12.

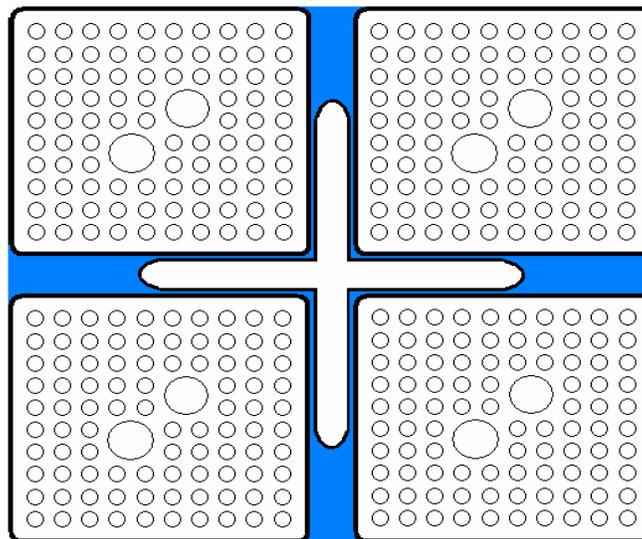


Fig. 2.2.3 Sección transversal de una celda de 4 ensamblajes con barra de control cruciforme.

El enriquecimiento del combustible y la proporción de gadolinio en los ensamblajes varían axialmente, siendo uno de los objetivos de los códigos de administración del combustible nuclear el reproducir en forma realista la distribución de potencia axial. Aumentando la potencia desde la parte inferior del núcleo hasta alrededor de la longitud de ebullición del canal refrigerante y tendiendo a disminuir hacia la parte superior del núcleo, obteniéndose un perfil de potencia axial en forma de “panza”, como el perfil abdominal de una persona obesa.

En suma, aunado a la heterogeneidad del núcleo dada la presencia de fases sólida, líquida y gaseosa (vapor), se tiene una variación de la composición del núcleo radial y axialmente.

Capítulo 3

CONCEPTOS DE TEORÍA DE HOMOGENEIZACIÓN CLÁSICA

3.1 Introducción

En este capítulo se presentan las características principales de los métodos de homogeneización, así como su limitante principal. Se hace notar que los métodos de homogeneización dependen fuertemente de un parámetro ajustable, dado por los factores de discontinuidad del flujo neutrónico y la corriente. Para la elección correcta de los valores de los factores de discontinuidad se recurre al apoyo de la teoría de transporte de neutrones, haciendo coincidir las soluciones de referencia (transporte) con las soluciones dadas por la teoría de difusión en las interfaces; a nivel de vaina y a nivel de ensamble.

Finalmente, se hace una revisión bibliográfica de los principales trabajos relacionados con los métodos de homogeneización.

3.2 Ideas básicas de los métodos de homogeneización

Algunas características de la teoría de homogeneización clásica son:

- Considera una solución de referencia generada por un cálculo de transporte en malla fina y con multigrupos para una región heterogénea.
- Un modelo de orden bajo puede reproducir cualquier solución de referencia de orden alto.

- Los parámetros de difusión para el cálculo de 2 grupos vienen de un cálculo de referencia.
- El cálculo en una malla gruesa de dos grupos en una región homogenizada puede reproducir:
 - Tasas de reacción o interacción en una celda
 - Flujo neto a través de cada superficie de la celda
- El cálculo de difusión es razonablemente preciso para regiones homogéneas grandes.

Sin embargo, conviene hacer notar que en realidad los factores de discontinuidad son lo que hacen posible que se obtengan tasas de reacción y flujos netos en la superficie de cada celda.

En términos matemáticos se procede de la siguiente manera.

Una solución a nivel de ensamble en una malla fina y con multigrupos se usa para promediar las secciones eficaces macroscópicas. Es decir, las Σ 's son promediadas sobre *intervalos de energía* “rápido” y “térmico”. Por ejemplo, para el caso térmico:

$$\Sigma_{a,i}^{lento} = \frac{\sum_{g \in \{grupos\}} \Sigma_{a,i}^g \phi_i^g}{\sum_{g \in \{grupos\}} \phi_i^g}$$

en donde

- Intervalo térmico de energías: (0,1) eV
- Intervalo rápido de energías(1,10⁷) eV

Los ensambles son “homogeneizados” promediando *espacialmente* sus secciones eficaces. Por ejemplo:

$$\frac{\Sigma_a^{rapido}}{\Sigma_a} = \frac{\sum_{i=\{regiones\}} V_i \Sigma_{a,i}^{rapido} \phi_i^{rapido}}{\sum_{i=\{regiones\}} V_i \phi_i^{rapido}}$$

Por lo que el método de homogeneización descansa en la siguiente hipótesis:

Hipótesis: Si una función promedio tiene la misma “forma” que la de la solución verdadera, entonces las secciones eficaces promediadas producen las tasas de reacción correctas en el cálculo de orden bajo.

Sin embargo, el problema de los métodos de homogeneización es que, aun secciones eficaces perfectamente promediadas no son suficientes. Aun con Σ 's perfectamente promediadas, el problema homogeneizado no puede producir tasas de reacción correctas y escapes correctos.

También se necesita el escape neto de neutrones correcto a través de superficies de “pins” y ensambles, i.e., se necesita contabilizar la influencia del ambiente que rodea vainas y ensambles.

La solución a este problema se obtiene especificando una discontinuidad en el flujo escalar en las superficies del ensamble, usando un “factor de discontinuidad:”

$$F = \frac{\phi_{exacta}}{\phi_{hom}}$$

Esto es lo que hace que la homogeneización funcione en los esquemas actuales en el cálculo de reactores nucleares.

La pregunta que surge naturalmente es si los factores de discontinuidad son un simple parámetro de ajuste para obtener cálculos correctos o si tiene algún significado físico.

De acuerdo a Richard Sanchez (2009) :

- El factor de discontinuidad en la corriente (CDF): “Físicamente, el proceso es equivalente a agregar una fuente de neutrones superficial que incrementa las corrientes parciales saliente, J^+ , y entrante, J^- ”
- Mientras que en el caso del factor de discontinuidad en el flujo (FDF): “La idea es introducir un factor de discontinuidad para recuperar el flujo de referencia en una frontera o interface”

Independientemente del significado físico que se le pudiera dar a los factores de discontinuidad en la corriente y el flujo neutrónico, el hecho es que son factores para empatar o hacer coincidir una teoría compleja con una teoría más sencilla.

Es decir, dada la imposibilidad de hacer coincidir las soluciones de referencia proporcionadas por teoría de transporte con las soluciones de la teoría de difusión con constantes nucleares promediadas en la energía y el espacio, se tiene que recurrir a “tunning factors” o parámetros de ajuste en las interfaces barra-barra y ensamble-ensamble.

Finalmente, unos comentarios en relación con cálculos globales:

Los cálculos globales deben producir potencias barra-barra (pin-by-pin) así como tasas de reacción en malla gruesa.

Con este fin, la reconstrucción de potencia en una barra (pin) se hace usando “funciones de forma.” La idea básica de las funciones de forma supone que el cociente del flujo neutrónico exacto al flujo neutrónico homogeneizado depende débilmente de las condiciones de frontera del ensamble, i.e.:

$$\text{Hipótesis: } \frac{\phi_{\text{exacta}}(x, y)}{\phi_{\text{hom}}(x, y)} \sim \text{cte.}$$

es decir, la forma del flujo exacto y el homogeneizado son prácticamente iguales. Esta hipótesis es similar a la que se usa en difusión de neutrones clásica, en teoría modificada de un grupo, donde el “buckling” del flujo rápido se supone igual al del grupo térmico, obteniéndose la ecuación crítica modificada de un grupo.

En el cálculo final de reconstrucción, tabulamos estas “funciones de forma” para cada barra combustible (pin) en el cálculo de un ensamble individual, enseguida las usamos para generar potencias en las barras después de cada cálculo de núcleo completo.

En relación con el futuro de la teoría de homogeneización hacemos otra vez referencia al trabajo de Richard Sanchez:

“...conceptos implicados en el proceso de homogeneización que, mientras se espera la panacea de cálculos detallados de núcleo completo usando teoría de transporte en 3D, seguirán aplicándose durante algún tiempo para los cálculos del núcleo de un reactor”.

3.3 Revisión de bibliografía selecta en métodos de homogeneización

Debido al trabajo pionero de Wallace y Le Caine (1946), los últimos 50 años han atestiguado el intenso estudio de la distribución de neutrones en un reactor empleando técnicas numéricas y analíticas. Actualmente, el concepto de difusión de neutrones es una herramienta comúnmente usada para entender el comportamiento complejo del movimiento de éstos. La mayoría de los estudios de un reactor tratan el movimiento de los neutrones como un proceso de difusión, donde se supone que neutrones en promedio tienden a difundir de las regiones de alta a baja densidad de neutrones. El tratamiento del transporte de neutrones como un proceso de difusión se da a gran escala, i.e., distancias del orden del tamaño del núcleo del reactor para altas energías de los neutrones, mientras que para neutrones térmicos el proceso difusivo se da en una escala pequeña, i.e., distancias del orden del tamaño de una pastilla de combustible. Por ejemplo, en un LWR la trayectoria libre media de los neutrones térmicos es normalmente del orden de 1 cm, la cual es comparable con el diámetro de un “pin” de combustible y del orden de centímetros para neutrones rápidos. Luego entonces, el modelo de difusión falla para predecir la distribución de neutrones dentro de un “pin” de combustible, donde se debe utilizar la ecuación de transporte de neutrones. Dada la comprensión del proceso de difusión, tal vez no es difícil construir una nueva ecuación de difusión de los neutrones promediada en la escala apropiada para describir la distribución de neutrones en un núcleo del reactor nuclear teniendo en cuenta su configuración heterogénea.

Métodos numéricos eficientes para resolver la ecuación de transporte de neutrones y datos nucleares precisos se han obtenido por muchos investigadores e ingenieros en el campo de física de reactores para predecir con precisión las

propiedades nucleares de un reactor (por ejemplo, métodos nodales se utilizan como herramientas estándar para el diseño y monitoreo de núcleos de reactores de agua ligera; Lawrence, 1986). Las técnicas de homogeneización y de-homogeneización (Smith, 1986) son esquemas esenciales para realizar un cálculo detallado de la distribución del flujo neutrónico. Secciones eficaces nodales (homogeneizadas) que toman en cuenta tanto los efectos espaciales y la historia del quemado del combustible se han desarrollado por varios autores (por ejemplo, Smith, 1994; Mori y Kawamura, 1995; Lee et al., 1996; Rahnema y Nichita, 1997). Métodos basados en la teoría de equivalencia generalizada (Smith, 1986), utilizan secciones eficaces homogeneizadas y factores de discontinuidad para cada nodo (ensamble combustible) que se determinan en un cálculo por ensamble utilizando una malla fina y una corriente neta igual a cero (condición de frontera de corriente nula). Smith (1994) introdujo la técnica de "re-homogeneización", donde las secciones eficaces homogeneizadas son recalculadas suponiendo que el flujo heterogéneo entre nodos puede obtenerse modulando la forma heterogénea obtenida con la condición de cero-corriente partiendo del último cálculo en un ensamble con la forma (nodal) homogénea. Sin embargo, no puede utilizarse para corregir el factor de discontinuidad. Rahnema y Nichita (1997) presentaron una técnica de homogeneización espacial corregida en las fugas de neutrones la cuál toma en cuenta el efecto de los escapes en los parámetros de homogeneización incluyendo el factor de discontinuidad. El método, que no utiliza secciones eficaces homogeneizadas (Calabrese y Grant, 1993), es tan preciso como los métodos nodales para un núcleo levemente heterogéneo y más preciso para núcleos muy heterogéneos. El método de perturbación de primer orden de Rahnema (1989) ha sido extendido a una teoría de orden superior (McKinley y Rahnema, 2000; Rahnema y McKinley, 2002). Estos métodos tienen ventajas y desventajas, y fueron discutidas y revisadas por Rahnema y

McKinley (2002). Recientemente Dall'Osso (2006) propuso un método alternativo al método de Smith (1994), para mejorar la precisión de las secciones eficaces en regiones heterogéneas cuando el medio ambiente es muy diferente de la condición de corriente cero y cuando las secciones eficaces ponderadas en el flujo neutrónico en un medio infinito no son representativas de las tasas de reacción reales.

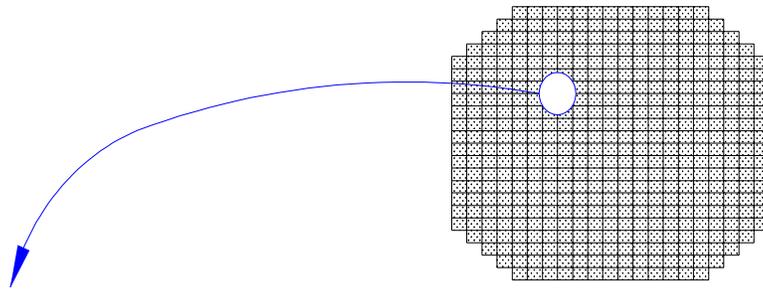
En este trabajo se presenta la técnica del promedio volumétrico como un método de homogeneización alternativo y cuyo punto de partida es el modelo clásico de difusión de neutrones. El método del promedio volumétrico es comparable a la técnica del promedio en una celda. Esto es el método tradicional de homogeneización, basada en la teoría de transporte, en donde se define un factor de desventaja, ζ , el cuál se utiliza para obtener las secciones eficaces efectivas a nivel de celda, es decir, ζ , se utiliza como el parámetro de ponderación en una celda espacial (Duderstadt y Hamilton, 1976).

Capítulo 4

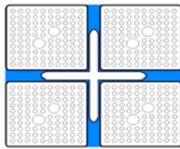
ECUACIÓN FRACCIONAL PROMEDIO VOLUMÉTRICA PARA EL FLUJO NEUTRÓNICO EN REACTORES NUCLEARES.

4.1 Introducción

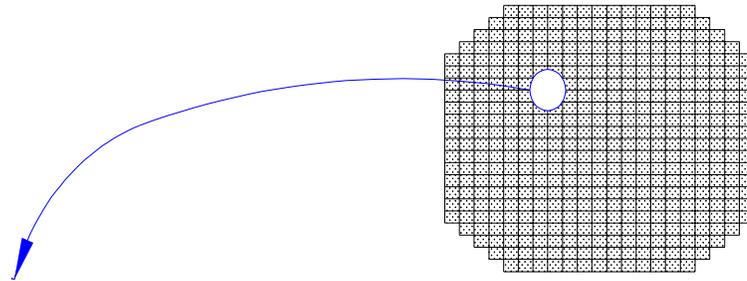
El proceso de difusión de neutrones tiene lugar en una configuración muy heterogénea, como se ilustra en la Figura 4.1.1. En las Figuras 4.1.1.a y 4.1.1.a' se representa el núcleo de un reactor nuclear. La mayor escala o longitud característica del núcleo corresponde a su radio. Mientras que en la Fig. 4.1.1.b se representan cuatro ensambles con una barra de control cruciforme. La longitud característica de este conjunto de ensambles dada por su radio equivalente, sería la escala del volumen promediante en el caso de neutrones rápidos. Similarmente, la Figura 4.1.1.b' representa un ensamble de combustible. La longitud característica de este ensamble dada por su radio equivalente, sería la escala del volumen promediante en el caso de neutrones térmicos. Normalmente estos arreglos (ensambles, celdas y varillas) son periódicos con una anisotropía que depende de arreglos nominales (Todreas y Kazimi, 1990). En este capítulo con el fin de corregir algunos fenómenos de difusión anómala debido a la configuración heterogénea de los reactores nucleares, se propone un modelo de difusión fraccionaria como una ecuación constitutiva de la densidad de corriente de neutrones. Se puede aplicar el modelo de difusión fraccionaria, desarrollado en esta tesis, en medios donde grandes variaciones de las secciones eficaces normalmente excluyen el uso de la ecuación de difusión de neutrones clásica, concretamente, la presencia de fuertes absorbedores de neutrones en el combustible, barras de control y el refrigerante. Finalmente, se hace un análisis de orden de magnitud de la relación que surge del cociente entre el tiempo de relajación y el tiempo de difusión de los neutrones en un medio multiplicativo o dispersor.



(4.1.1.a)



(4.1.1.b)



(4.1.1.a')



(4.1.1.b')

Figura 4.1.1. Longitudes características del sistema. 4.1.1.a) Sección transversal del núcleo completo de un reactor nuclear; 4.1.1.b) Escala del volumen promedio para neutrones rápidos: Escala mayor de un conjunto de cuatro ensambles rodeados de canales de refrigeración y barras de control; 4.1.1.a') De nuevo: sección transversal del núcleo completo de un reactor nuclear; 4.1.1.b') Escala del volumen promedio para neutrones térmicos: Escala mayor del ensamble combustible sin barra de control.

4.2 Teoría

Considere el proceso de interacciones en el núcleo de un reactor con las longitudes características indicadas en la Figura 4.1.1.b', donde el material combustible está distribuido en un ensamble conteniendo moderador. Se hace notar que esta figura representa sólo un tipo de distribución dentro de una variedad de diseños que se usan actualmente. Suponemos que en la configuración heterogénea hay sólo “dos materiales” presentes en el sistema; es decir, el combustible (σ) y el moderador (γ). En esta tesis, para ilustrar el análisis de procesos difusivos y no difusivos de los neutrones suponemos que todos los neutrones en el reactor tienen la misma velocidad y que el flujo angular es sólo linealmente anisotrópico. Entonces, la ecuación de conservación que gobierna las interacciones neutrón-núcleo en el moderador (γ) en este sistema, así como las condiciones iniciales y de frontera en las interfaces están dadas por (Duderstadt y Hamilton, 1976):

Moderador- γ

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{a\gamma}(\mathbf{r})\phi_\gamma(\mathbf{r}, t) = S_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (4-1)$$

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{tr\gamma}(\mathbf{r})\mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) = \mathbf{S}_{\gamma 1}(\mathbf{r}, t), \quad (4-2)$$

Condición Inicial

$$\phi_\gamma(\mathbf{r}, 0) = \phi_{\gamma 0}(\mathbf{r}) \quad (4-3)$$

Condiciones de Frontera

$$-\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma} = -\mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}, \quad \text{en } \textit{interfase-}\gamma\sigma \quad (4-4)$$

$$\phi_{\gamma} = \phi_{\sigma}, \quad \text{en } \textit{interfase-}\gamma\sigma \quad (4-5)$$

donde ϕ es el flujo de neutrones, \mathbf{J} es el vector de densidad de corriente, Σ_a es la sección eficaz de absorción, S es la fuente de neutrones, D es el coeficiente de difusión de los neutrones y $\mathbf{n}_{\gamma\sigma}$ es el vector unitario normal dirigido desde la fase γ hacia la fase σ .

En estas ecuaciones

$$\Sigma_a(\mathbf{r}) = \Sigma_t(\mathbf{r}) - \Sigma_s(\mathbf{r}) \quad (4-6)$$

$$\Sigma_{tr}(\mathbf{r}) = \Sigma_t(\mathbf{r}) - \bar{\mu}_0 \Sigma_s(\mathbf{r}) \quad (4-7)$$

donde Σ_s , Σ_t , y Σ_{tr} representan a las secciones eficaces macroscópicas de dispersión, total y de transporte, mientras que μ_0 es el coseno del ángulo de dispersión.

La Ec. (4-1) y Ec. (4-2) son conocidas en el análisis del reactor nuclear como las ecuaciones P₁. El conjunto de ecuaciones dado por (4-1) y (4-2) contiene los más importantes efectos que pueden ocurrir en un reactor nuclear. La consideración típica es despreciar la derivada temporal $\nu^{-1} \partial \mathbf{J} / \partial t$ en la Ec. (4-2). Si la tasa de cambio temporal de la densidad de corriente es mucho más lenta que la frecuencia de colisión ($\nu \Sigma_t$):

$$\frac{1}{|\mathbf{J}|} \frac{\partial |\mathbf{J}|}{\partial t} \ll \nu \Sigma_t \quad (4-8)$$

Puesto que $\nu\Sigma_t$ es típicamente del orden de 10^5 s^{-1} o mayor (Duderstadt y Hamilton, 1976), la Ec. (4-2) se simplifica a:

$$\mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) = -D_\gamma(\mathbf{r})\nabla\phi_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (4-9)$$

donde $D_\gamma(\mathbf{r})$ es el coeficiente de difusión de los neutrones, dado por:

$$D_\gamma(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r})} = \frac{1}{3[\Sigma_t(\mathbf{r}) - \bar{\mu}_0\Sigma_s(\mathbf{r})]} \quad (4-10)$$

Esta relación es análoga a la ley de Fick ampliamente conocida en Ciencias Básicas e Ingeniería., en función de gradientes de concentración. En nuestro caso, la Ec. (4-2) se conoce como la ley de Fick para la difusión de neutrones.

La teoría de difusión proporciona una descripción matemática válida del flujo de neutrones cuando las suposiciones hechas en su deducción son satisfechas (Stacey, 2004):

- H1. La absorción es mucho menos probable que la dispersión
- H2. Variación espacial suave de la distribución de neutrones
- H3. Dispersión isotrópica

La primera condición se satisface para la mayoría de los materiales estructurales y moderadores encontrados en un reactor nuclear, pero no para el combustible y los elementos de control. La segunda condición se satisface a unas pocas trayectorias libres medias de la frontera de grandes regiones homogéneas con una distribución de fuentes relativamente uniforme. La tercera condición se satisface en la dispersión en núcleos atómicos pesados, i.e., dentro de las barras de combustible. Sin embargo, el proceso de

difusión tipo Fick presenta fenómenos de difusión anómala. Por un lado, debido a que la dispersión con átomos de hidrógeno es fuertemente anisotrópica, y por otro lado la configuración heterogénea de los núcleos de los reactores, específicamente, la presencia de fuertes absorbedores de neutrones en el combustible, y barras de control, donde el flujo neutrónico tiene variaciones bruscas. La dinámica de estos absorbedores cambia radicalmente la generación local de energía y la distribución de ésta, requiriendo un tratamiento más preciso del transporte de neutrones que el proporcionado por la teoría de difusión clásica.

La teoría de difusión puede usarse sin restricciones cuando la configuración heterogénea de un reactor nuclear es reemplazada por una mezcla homogénea usando un modelo basado en promedios. Elementos de control muy absorbentes son representados por las secciones eficaces efectivas las cuales reproducen las tasas de absorción de teoría de transporte. Sin embargo, los modelos efectivos no corrigen la dinámica de la difusión anómala del flujo de neutrones. Por lo tanto, proponemos una ecuación constitutiva alternativa para la densidad de corriente neutrónica.

4.3 Ley constitutiva para la densidad de corriente neutrónica

El objetivo es obtener una ecuación de onda fraccional para el flujo de neutrones aplicando una ley constitutiva fraccional para la densidad de corriente neutrónica.

En muchos sistemas naturales, se han observado procesos de difusión que no siguen la ley de Fick. Tales fenómenos son referidos como difusión anómala. Específicamente, en el caso del sistema descrito en la Figura 4.1.1.b', este comportamiento anómalo ocurre debido a la configuración heterogénea. Contrario a los procesos de difusión, la presencia de material muy absorbente puede inducir un movimiento de los neutrones

restringido en el espacio. El resultado es una difusión anómala que no puede ser descrita como un proceso de difusión tipo Fick. Recientemente, Nec y Nepomnyashchy (2007) propusieron una ecuación constitutiva fraccional como un modelo fenomenológico para describir procesos de difusión anómala. Se ha encontrado que en muchos procesos físicos el concepto de difusión normal, con su inherente escalamiento temporal del cuadrado del desplazamiento $\langle r^2(t) \rangle \propto t$, es apropiado. Una relación más general $\langle r^2(t) \rangle \propto t^\kappa$, es característica de la sub-difusión ($0 < \kappa < 1$) o super-difusión ($\kappa > 1$). Las propiedades de estas ecuaciones han sido investigadas intensivamente (Schneider y Wyss, 1989; Metzler y Klafter, 2000; Mainard y Pagnini, 2003; Lenzy et al., 2005).

De acuerdo a estas ideas una versión de la ecuación constitutiva fraccional del vector de densidad de corriente es

$$\tau^\kappa \frac{\partial^\kappa \mathbf{J}_\gamma}{\partial t^\kappa} + \mathbf{J}_\gamma = -D_\gamma \nabla \phi_\gamma \quad (4-11a)$$

donde

$$\tau = \frac{1}{v \Sigma_{tr\gamma}} = \frac{3D_\gamma}{v} \quad (4-11b)$$

y donde el operador de derivada fraccional $\partial^\kappa / \partial t^\kappa$ está definido en el sentido de Riemann-Liouville (Oldham y Spanier, 1974) y κ es el exponente de difusión anómalo.

El cálculo fraccional trata acerca del estudio del orden fraccional de los operadores de derivadas e integrales sobre dominios reales y complejos y sus aplicaciones en varios campos de la ciencia y la ingeniería (e.g., Oldham y Spanier,

1974; Miller y Ross, 1993; Samko et al., 1993; Podlubny, 1999; Hilfer, 2000; Kilbas et al., 2006; Magin 2006).

Combinando las ecuaciones (4-1) y (4-11a), obtenemos la ecuación de onda fraccional para el flujo de neutrones:

$$\tau^\kappa \frac{1}{\nu} \frac{\partial^{\kappa+1} \phi_\gamma}{\partial t^{\kappa+1}} + \tau^\kappa \Sigma_{a\gamma} \frac{\partial^\kappa \phi_\gamma}{\partial t^\kappa} + \frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} + \Sigma_{a\gamma} \phi_\gamma = D_\gamma \nabla^2 \phi_\gamma \quad (4-12)$$

Las condiciones de frontera en las interfaces se obtienen combinando las Ecs. (4-4), (4-5) y (4-11a) para obtener

$$\tau^\kappa \frac{\partial^\kappa J_\gamma}{\partial t^\kappa} + \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \phi_\gamma = \tau^\kappa \frac{\partial^\kappa J_\sigma}{\partial t^\kappa} + \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot D_\sigma \nabla \phi_\sigma, \quad \text{en la interfase-}\gamma\sigma \quad (4-13)$$

donde $J_\gamma = \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot \mathbf{J}_\gamma$ y $J_\sigma = \mathbf{n}_{\sigma\gamma} \cdot \mathbf{J}_\sigma$. El modelo de ecuación de onda fraccional retiene las principales características dinámicas del movimiento de los neutrones.

Hasta ahora nuestro estudio se ha basado en considerar neutrones monoenergéticos. Sin embargo, los neutrones en un reactor tienen energías desde 10 MeV hasta menos de 0.01 eV y las secciones eficaces dependen de la energía de los neutrones incidentes en los materiales (Duderstadt and Hamilton, 1976). Entonces, un tratamiento más realista debe considerar la dependencia en la energía de los neutrones. Las ecuaciones de difusión en multigrupos, se aplican normalmente, las cuales están dadas por:

$$\frac{1}{\nu_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}_g + \Sigma_{ag} \phi_g - S_g + \Sigma_{sg} \phi_{\gamma g} = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g} \phi_{g'}, \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (4-14)$$

donde

$$\Sigma_{ag} = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{ag'g'} \quad (4-15)$$

$$\Sigma_{sg} = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g'} \quad (4-16)$$

$$S_g = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'g'} \phi_{g'} + S_g^{ext} \quad (4-17)$$

donde g y g' representan grupos de energía. En estas ecuaciones para simplificar la notación no se incluyó el subíndice gamma. Definimos una ley constitutiva para la densidad de corriente de los neutrones \mathbf{J}_g para el grupo g

$$\tau_g^\kappa \frac{\partial^\kappa \mathbf{J}_g}{\partial t^\kappa} + \mathbf{J}_g = -D_g \nabla \phi_g \quad (4-18)$$

Combinando las Ecs. (4-14) y (4-18) resulta

$$\begin{aligned} & \tau_g^\kappa \frac{1}{\nu_g} \frac{\partial^{\kappa+1} \phi_g}{\partial t^{\kappa+1}} + \tau_g^\kappa (\Sigma_{ayg} + \Sigma_{s\gamma g}) \frac{\partial^\kappa \phi_g}{\partial t^\kappa} + \frac{1}{\nu_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} + (\Sigma_{ag} + \Sigma_{sg}) \phi_g \\ & = D_g \nabla^2 \phi_g + \tau_g^\kappa \frac{\partial^\kappa S_g}{\partial t^\kappa} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g} \tau_{g'}^{\kappa'} \frac{\partial^{\kappa'} \phi_{g'}}{\partial t^{\kappa'}} + S_g + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g} \phi_{g'} \end{aligned} \quad (4-19)$$

donde

$$\frac{\partial^\kappa S_g}{\partial t^\kappa} = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'g'} \frac{\partial^{\kappa'} \phi_{g'}}{\partial t^{\kappa'}} \quad (4-20)$$

Este resultado muestra que cada grupo de energía está caracterizado por un tiempo de relajación τ_g^κ así como por un exponente de difusión anómalo κ (o κ').

4.4 Orden de magnitud de la relación del tiempo de relajación y tiempo de difusión

El comportamiento de ϕ_γ es afectado por procesos complejos. Así uno obtiene un modelo fraccional (Ec. 4-12 para un grupo de energía o la Ec. 4-19 para multigrupos de energía).

Enseguida, discutiremos el alcance de nuestros resultados a través de un análisis de órdenes de magnitud.

Considere que el procesos de difusión se lleva a cabo en el moderador, el cual tiene una longitud ca difusión tipo Fick y no Fick son válidas con tal que las restricciones de escala se cumplan

$$\ell_\gamma \ll L \quad (4-21)$$

Por ejemplo, en un LWR la trayectoria libre media de un neutron térmico es del orden de 1cm, la cual es comparable al diámetro de una vaina de combustible y del orden de centímetros para neutrones rápidos. El tiempo de relajación está dado por la Ec. (4-11b) ($\tau = 3\nu^{-1}D_\gamma$) y el orden de magnitud del tiempo de difusión puede definirse como

$$t_d = \mathbf{O} \left(\frac{L_\phi^2}{\nu D_\gamma} \right) \quad (4-22)$$

donde L_ϕ^2 es la longitud característica asociada con cambios en el flujo de neutrones.

Puede observarse que

$$\frac{L_\phi^2}{\nu D_\gamma t_d} \ll 1 \quad (4-23)$$

El cociente entre la Ec. (4-11b) y (4-22) da

$$\frac{\tau}{t_d} = \mathbf{O} \left(\frac{D_\gamma^2}{L_\phi^2} \right) \quad (4-24)$$

Puesto que D_γ^2 / L_ϕ^2 es mucho más pequeña que uno, la restricción en la escala de tiempo está dada por:

$$\frac{\tau}{t_d} \ll 1 \quad (4-25)$$

La forma fraccional de esta restricción está dada por

$$\left(\frac{\tau}{t_d} \right)^\kappa \ll 1 \quad (4-26)$$

En suma, si la restricción dada por la Ec. (4-21), (4-23) y (4-26) se satisfacen, el enfoque fraccional para describir el proceso de difusión en un reactor nuclear puede aplicarse.

Específicamente κ puede obtenerse de datos de planta o usando datos experimentales aplicando un análisis de fluctuaciones sin sesgo (DFA por sus siglas en inglés), el cual es un método basado en la teoría de la caminata aleatoria y fue aplicado a una señal de potencia para estudiar el ‘benchmark’ de estabilidad Forsmark (Espinosa-Paredes et al., 2006a). DFA es un método de escalamiento comúnmente usado para detectar correlación en intervalos de tiempo amplios en series de tiempo no estacionarias.

Los resultados obtenidos con el método DFA para los datos de referencia “c5.aprm” del ‘benchmark’ de estabilidad Forsmark son (Espinosa-Paredes et al., 2006a): $\kappa \cong 0.65$ para movimiento Browniano y $\kappa \cong 0.35$ para una fluctuación periódica dominante.

Capítulo 5

CASOS ESPECIALES: LAS ECUACIONES DE ONDA Y DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA DEL FLUJO NEUTRÓNICO EN REACTORES NUCLEARES.

5.1 Introducción

La primera sección muestra el desarrollo de una ecuación alternativa para el análisis de transitorios en reactores nucleares, la ecuación de onda para el flujo de neutrones local. Esta ecuación está basada en una ecuación para la corriente neutrónica tipo Maxwell-Vernotte-Cattaneo.

En la sección siguiente, se deduce la ecuación de onda promedio volumétrica para el flujo de neutrones, la cual se obtiene después de aplicar el método del volumen promedio a la ecuación de onda local presentada en la sección previa.

Finalmente, en la última sección se deduce la ecuación de difusión promedio volumétrica la cual incluye términos de corrección a la difusión en el seno y en las interfaces de una región y efectos de reacciones nucleares (absorción).

5.2 La ecuación de onda para el flujo de neutrones local.

En primer lugar, analicemos la simplificación dada por la Ec. (4-8).

La restricción dada por la Ec. (4-8) es inválida para escalas de tiempo en las cuales el flujo de neutrones tiene rápidas variaciones y bajo estas circunstancias la Ec. (4-2) toma relevancia. Entonces la Ec. (4-2) puede reescribirse usando el coeficiente de difusión de neutrones (Ec. 4-10):

$$\tau \frac{\partial \mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{J}_\gamma(\mathbf{r}, t) = -D_\gamma(\mathbf{r}) \nabla \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (5-1)$$

donde

$$\tau = \frac{1}{\nu \Sigma_{tr\gamma}} = \frac{3D_\gamma}{\nu} \quad (5-2)$$

La estructura matemática de la Ec. (5-1) es idéntica a la ecuación constitutiva de Maxwell, Vernotte y Cattaneo (1958), donde τ es el tiempo de relajación del sistema. Es importante hacer notar que la ecuación de Cattaneo es adecuada para escalas de tiempo tales que $t \leq \tau$. Combinando las ecuaciones (4-1) y (5-1), obtenemos la ecuación de onda monoenergética para el flujo de neutrones

$$\tau \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_\gamma}{\partial t^2} + (\tau \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} + \Sigma_{a\gamma}(\mathbf{r}) \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) = D_\gamma \nabla^2 \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (5-3)$$

También debe hacerse notar que el término de fuente no fue considerado, y no afecta la deducción que se hace en esta tesis. Cuando la relación dada por la Ec. (4-8) se satisface, la ecuación de Fick $\mathbf{J} = -D \nabla \phi$ es recuperada y la ecuación anterior se simplifica a:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} + \Sigma_{a\gamma}(\mathbf{r}) \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) = D_\gamma \nabla^2 \phi_\gamma(\mathbf{r}, t) \quad (5-4)$$

Como es bien conocido, la ecuación de Fick (o en general, la teoría de transferencia de momento, energía, y materia) resulta en una ecuación diferencial parabólica para el flujo de neutrones y, como una consecuencia, una rapidez de propagación infinita. Se propone que el flujo de neutrones $\phi_\gamma(\mathbf{r}, t)$ es un campo escalar, con una densidad de corriente \mathbf{J} dada por la ley de Fick (Eq. 4-9). En este campo existen *superficies equipotenciales*, i.e., $\phi_\gamma[\mathbf{r}(t), t] = \text{constante}$.

En muchos artículos de investigación (Cattaneo, 1958; Vernotte, 1958; Sadler and Dhaler, 1964; Luikov, 1966; Kadafar, 1976; Bubnov, 1976; Sieniutycz, 1979; Kaminski, 1990; Ozisik and Tzou, 1994; Barletta and Zanchini, 1994, entre otros), se ha enfatizado que la ecuación parabólica implica una rapidez de propagación infinita. Para tomar en cuenta una rapidez de propagación finita, el modelo debería reemplazarse por una ecuación de tipo hiperbólica que resulte de combinar la ecuación de Maxwell-Vernotte-Cattaneo y el balance de neutrones.

La ecuación (5-3) también puede ser deducida como un caso especial de la Ec. (4-16) o Ec. (4-23) haciendo:

H1. $\kappa = 1$, en la ecuación de onda fraccional monoenergética, Ec. (4-16)

H2. $\kappa = 1$ y $g = 1$, en la ecuación de onda fraccional para multigrupos, Ec. (4-23).

5.3 La ecuación de onda promedio volumétrica para el flujo de neutrones

Se desea aplicar el método de promedio volumétrico a la ecuación de onda de la concentración de neutrones (flujo), presentada en la sección anterior. En este caso sí consideramos un medio multiplicativo y si denotamos al moderador como la fase ν , y al combustible como la fase σ :

$$\tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\sigma}}{\partial t^2} + \left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} + (\Sigma_{\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot (D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}) \quad (5-5)$$

O bien

$$\tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\sigma}}{\partial t^2} + (\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} - \nabla \cdot (D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}) + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \phi_{\sigma}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (5-6)$$

Mientras que en el moderador se cumple que:

$$\tau_{\gamma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\gamma}}{\partial t^2} + (\tau_{\gamma} \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_{\gamma}}{\partial t} - \nabla \cdot (D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma}) + \Sigma_{a\gamma} \phi_{\gamma}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (5-7)$$

En nuestro caso, nuestro volumen mínimo será el correspondiente al área de una celda equivalente por la altura dada por una longitud característica de una pastilla de combustible y nuestro volumen promedio, V, corresponderá al área de un ensamble de combustible por la altura de una pastilla de combustible y el volumen total del sistema estaría dado por el área transversal del reactor por la altura del núcleo. Con esta definición de volúmenes se cumpliría la condición de restricciones de escala para la aplicación del método del promedio volumétrico: el radio de la celda equivalente debe ser mucho menor que el radio equivalente de un ensamble y éste a su vez debe ser mucho menor que el radio del núcleo del reactor.

Comenzamos por promediar la ecuación de onda en el moderador:

$$\frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \tau_{\gamma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\gamma}}{\partial t^2} dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} (\tau_{\gamma} \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_{\gamma}}{\partial t} dV - \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \nabla \cdot (D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma}) dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \Sigma_{a\gamma} \phi_{\gamma} dV = 0 \quad (5-8)$$

Mientras que para el combustible, podemos escribir:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\sigma}}{\partial t^2} dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} (\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} dV \\
& - \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \nabla \bullet (D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}) dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \phi_{\sigma} dV = 0
\end{aligned} \tag{5-8'}$$

Utilizando el teorema de transporte de Reynolds (Whitaker, 1999), en los dos primeros términos, de las ecuaciones para las fases γ y σ , éstas se pueden reescribir como:

Región del moderador:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \tau_{\gamma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\gamma}}{\partial t^2} dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} (\tau_{\gamma} \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{\partial \phi_{\gamma}}{\partial t} dV = \\
& \left. \frac{d}{dt} \left[\tau_{\gamma} \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \phi_{\gamma} dV \right] - \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \phi_{\gamma} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \right] \right. \\
& \left. - \tau_{\gamma} \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \frac{\partial \phi_{\gamma}}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right. \\
& \left. + \frac{d}{dt} \left[(\tau_{\gamma} \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \phi_{\gamma} dV \right] - (\tau_{\gamma} \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \phi_{\gamma} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right.
\end{aligned} \tag{5-9}$$

Mientras que en la región del combustible:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \phi_{\sigma}}{\partial t^2} dV + \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} dV = \\
& \frac{d}{dt} \left[\tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \right] - \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_{\sigma} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right\} \right] \\
& - \tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
& + \frac{d}{dt} \left[\left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \right] - \left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_{\sigma} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-9'}$$

En las ecuaciones anteriores $\vec{n}_{\gamma\sigma}$ es el vector normal dirigido desde la fase- γ hacia la fase- σ y $\vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma}$ representa la velocidad de desplazamiento de la interfase γ - σ . Asimismo, $\vec{n}_{\sigma\gamma}$ es el vector normal dirigido desde la fase- σ hacia la fase- γ y $\vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma}$ representa la velocidad de desplazamiento de la interfase σ - γ .

Haciendo uso del teorema del promedio espacial aplicado a una divergencia, el segundo término de la izquierda de las ecuaciones (5-8) queda como sigue

$$\frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} \nabla \bullet (D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma}) dV = \nabla \bullet \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\gamma(x,t)}} (D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma}) dV \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \tag{5-10}$$

$$\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \nabla \bullet (D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}) dV = \nabla \bullet \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} (D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma}) dV \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \tag{5-10'}$$

Aplicando de nuevo el teorema del promedio espacial, al caso de un gradiente, el primer término de la derecha de las ecuaciones (5-10), para el caso de difusividad neutrónica constante, puede escribirse como

$$\left[\frac{D_\gamma}{V} \int_{V_\gamma(x,i)} (\nabla \phi_\gamma) dV \right] = D_\gamma \nabla \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,i)} \phi_\gamma dV \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,i)} \phi_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \quad (5-11)$$

$$\left[\frac{D_\sigma}{V} \int_{V_\sigma(x,i)} (\nabla \phi_\sigma) dV \right] = D_\sigma \nabla \left[\frac{1}{V} \int_{V_\sigma(x,i)} \phi_\sigma dV \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,i)} \phi_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \quad (5-11')$$

Sustituyendo (5-11) en (5-10) resulta

$$\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,i)} \nabla \cdot (D_\gamma \nabla \phi_\gamma) dV = D_\gamma \nabla \cdot \left\{ \nabla \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,i)} \phi_\gamma dV \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,i)} \phi_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,i)} D_\gamma \nabla \phi_\gamma \cdot \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \quad (5-12)$$

$$\frac{1}{V} \int_{V_\sigma(x,i)} \nabla \cdot (D_\sigma \nabla \phi_\sigma) dV = D_\sigma \nabla \cdot \left\{ \nabla \left[\frac{1}{V} \int_{V_\sigma(x,i)} \phi_\sigma dV \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,i)} \phi_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right\} + \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,i)} D_\sigma \nabla \phi_\sigma \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \quad (5-12')$$

Sustituyendo el resultado anterior junto con las ecuaciones (5-9) en (5-8) se llega a la siguiente ecuación para el moderador

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\tau_\gamma \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] - \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \right] \\
& - \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA + \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] \\
& - \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA - D_\gamma \nabla^2 \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] + \frac{\Sigma_{a\gamma}}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \\
& = D_\gamma \nabla \bullet \left[\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} D_\gamma \nabla \phi_\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA
\end{aligned} \tag{5-13}$$

Mientras que para el combustible resulta:

$$\begin{aligned}
& \left. \frac{\partial}{\partial t} \left[\tau_\sigma \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_\sigma dV \right] - \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right\} \right] \right. \\
& - \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \frac{\partial \phi_\sigma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA + \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_\sigma dV \right] \\
& - \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA - D_\sigma \nabla^2 \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_\sigma dV \right] \\
& + \frac{(\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma})}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_\sigma dV \\
& = D_\sigma \nabla \bullet \left[\frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} D_\sigma \nabla \phi_\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-13'}$$

Reordenando las ecuaciones anteriores, con los términos interfaciales combustible-moderador en el lado derecho resulta:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\tau_\gamma \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] \right\} \right] + \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] \\
& - D_\gamma \nabla^2 \left[\frac{1}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \right] + \frac{\Sigma_{a\gamma}}{V} \int_{V_\gamma(x,t)} \phi_\gamma dV \\
& = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \\
& + \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\
& + D_\gamma \nabla \bullet \left[\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \phi_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} D_\gamma \nabla \phi_\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA
\end{aligned} \tag{5-14}$$

Mientras que para el combustible resulta:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \left[\tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \right] \right\} \right] + \frac{\partial}{\partial t} \left[\left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \right] \\
& - D_{\sigma} \nabla^2 \left[\frac{1}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \right] + \frac{(\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma})}{V} \int_{V_{\sigma(x,t)}} \phi_{\sigma} dV \\
& = \frac{\partial}{\partial t} \left[\tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \left\{ \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_{\sigma} \vec{w} \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right\} \right] \\
& + \tau_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \frac{\partial \phi_{\sigma}}{\partial t} \vec{w} \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA + \left(\tau_{\sigma} \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_{\sigma} \vec{w} \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
& + D_{\sigma} \nabla \cdot \left[\frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \phi_{\sigma} \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} D_{\sigma} \nabla \phi_{\sigma} \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-14'}$$

Haciendo uso de la definición de promedio volumétrico:

$$\langle B \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_i} B dV; \quad i = \gamma, \sigma.$$

Entonces, las ecuaciones (5-14) pueden escribirse en el caso del moderador como:

$$\begin{aligned}
& \tau_\gamma \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t^2} + (\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{V}) \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t} - D_\gamma \nabla^2 \langle \phi_\gamma \rangle + \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle \\
&= \tau_\gamma \frac{1}{V} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \\
&+ \tau_\gamma \frac{1}{V} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA + (\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{V}) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\
&+ \frac{D_\gamma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \phi_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \nabla \phi_\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA
\end{aligned} \tag{5-15}$$

Mientras que para el combustible obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \tau_\sigma \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \langle \phi_\sigma \rangle}{\partial t^2} + (\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{V}) \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle}{\partial t} - D_\sigma \nabla^2 \langle \phi_\sigma \rangle + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \langle \phi_\sigma \rangle \\
&= \tau_\sigma \frac{1}{V} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left[\left\{ \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \phi_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right\} \right] \\
&+ \tau_\sigma \frac{1}{V} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \frac{\partial \phi_\sigma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA + (\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{V}) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \phi_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
&+ \frac{D_\sigma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \phi_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \nabla \phi_\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-15'}$$

En las ecuaciones (5-15) se entiende que las cantidades promedio están asociadas con el centroide del volumen promedio identificado por el vector de posición \mathbf{x} . Asimismo, los términos de acumulación se han expresado en función de derivadas parciales puesto que cada uno de los promedios $\langle \Phi_i \rangle$, $i=\gamma, \sigma$, es asociado con un punto fijo en el espacio.

Ahora, como parte final de la derivación de nuestra ecuación de onda promedio volumétrica, introducimos la descomposición espacial de Gray (1975):

$$\phi_i = \langle \phi_i \rangle^i + \tilde{\phi}_i \quad (5-16)$$

Sustituyendo la ec. (5-16) en las ecs. (5-15), resulta para el moderador

$$\begin{aligned} & \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t^2} + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t} - D_\gamma \nabla^2 \langle \phi_\gamma \rangle + \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle \\ &= \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \\ &+ \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\ &+ \frac{D_\gamma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\ &+ \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right\} \\ &+ \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\gamma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\ &+ \frac{D_\gamma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \end{aligned} \quad (5-17)$$

Mientras que para el combustible nos queda:

$$\begin{aligned}
& \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \langle \phi_\sigma \rangle}{\partial t^2} + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle}{\partial t} - D_\sigma \nabla^2 \langle \phi_\sigma \rangle + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \langle \phi_\sigma \rangle \\
&= \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] \\
&+ \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
&+ \frac{D_\sigma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \nabla \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \tag{5-17'} \\
&+ \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] \\
&+ \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\sigma}{\partial t} \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{1}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{w} \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
&+ \frac{D_\sigma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned}$$

En las ecuaciones anteriores las constantes nucleares, velocidad del neutrón y el tiempo de relajación se han supuesto constantes.

Las ecuaciones anteriores aplicarían para el caso de una interfase combustible-moderador en movimiento, como en el caso de esferas o partículas de combustible inmersas en una corriente de fluido moderador/refrigerante.

Para una interfase s3lida-l3quida, o s3lida-gaseosa, en donde la fase s3lida se encuentre fija, $\bar{w} = 0$, la ecuaci3n se simplifica a la siguiente ecuaci3n

$$\begin{aligned}
& \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \varepsilon_\gamma \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t^2} + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \varepsilon_\gamma \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \\
& - D_\gamma \varepsilon_\gamma \nabla^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \Sigma_{a\gamma} \varepsilon_\gamma \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \\
& = \frac{D_\gamma}{V} \nabla \cdot \left[\int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \cdot \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \\
& + \frac{D_\gamma}{V} \nabla \cdot \left[\int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \tilde{\phi}_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}(x,t)} \nabla \tilde{\phi}_\gamma \cdot \vec{n}_{\gamma\sigma} dA
\end{aligned} \tag{5-18}$$

Mientras que en el caso de la regi3n con material multiplicativo resulta

$$\begin{aligned}
& \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \varepsilon_\sigma \frac{\partial^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t^2} + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \varepsilon_\sigma \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} \\
& - D_\sigma \varepsilon_\sigma \nabla^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \varepsilon_\sigma \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \\
& = \frac{D_\sigma}{V} \nabla \cdot \left[\int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \nabla \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \\
& + \frac{D_\sigma}{V} \nabla \cdot \left[\int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \tilde{\phi}_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma}(x,t)} \nabla \tilde{\phi}_\sigma \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-18'}$$

en donde ε_i es la fracci3n volumen ocupada por la fase i ; $i = \gamma$ (moderador), $j = \sigma$ (combustible).

El sistema anterior de ecuaciones, combustible-moderador, puede ser fácilmente extendido para considerar varios grupos de energía.

Ahora, podemos usar las siguientes simplificaciones, en donde $i = \gamma$ (moderador), $j = \sigma$ (combustible):

$$\frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \langle \phi_i \rangle^i dA = \left\{ \frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} dA \right\} \langle \phi_i \rangle^i \quad (5-19)$$

Este tipo de aproximación fue examinada por Carbonell y Withaker (1984). Este estudio indica que la Ec. (5-19) es válida siempre que las restricciones dadas por:

$$\ell_i, \ell_j \ll r_0 \ll L \quad (5-20)$$

son satisfechas. En esta ecuación ℓ_i, ℓ_j, r_0 son las escalas del moderador, combustible y volumen promediante, ver (Fig. 4.1.1), y L es la longitud característica del sistema (núcleo). Es importante remarcar que el método del volumen promedio pasa de campos locales a campos promedios que varía suavemente cuando las restricciones de escala dadas por la Ec. (5-20) se satisfacen.

Aplicando el teorema del promedio espacial (Howes y Whitaker, 1985) a una cantidad constante, obtenemos la siguiente relación:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} dA = -\nabla \varepsilon_i \quad (5-21)$$

y esto nos permite expresar la Ec. (5-19) como:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \langle \phi_i \rangle^i dA = -(\nabla \varepsilon_i) \langle \phi_i \rangle^i \quad (5-22)$$

Un análisis análogo se aplica a la siguiente integral:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \langle \phi_i \rangle^i dA = \left\{ \frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} D_i dA \right\} \cdot \nabla \langle \phi_i \rangle^i = -(\nabla \varepsilon_i) \cdot D_i \nabla \langle \phi_i \rangle^i \quad (5-23)$$

Un análisis de orden de magnitud nos permite mostrar que

$$(\nabla \varepsilon_i) \cdot D_i \nabla \langle \phi_i \rangle^i \ll \frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \tilde{\phi}_i dA \quad (5-24)$$

Esto sucede debido a que el operador gradiente dentro de la integral tiene una longitud característica igual a ℓ_i mientras que el gradiente de una cantidad promedio tiene una longitud característica igual a L . Entonces, podemos obtener la siguiente restricción de escalas:

$$\frac{\ell_i}{L_\phi L_\varepsilon a_{ij}} \ll 1 \quad (5-25)$$

La deducción de este resultado requiere de un estimado de $\tilde{\phi}_i$ y de varias definiciones de longitudes características. Este análisis es dado en el Apéndice 2.

Sustituyendo las Ecs. (5-19), (5-22), (5-23) y (5-24) en las Ecs. (5-18) obtenemos la ecuación de onda promedio volumétrica para el flujo de neutrones para el moderador y el combustible:

$$\begin{aligned} & \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \varepsilon_\gamma \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t^2} + (\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu}) \varepsilon_\gamma \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} \\ & - D_\gamma \varepsilon_\gamma \nabla^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \Sigma_{a\gamma} \varepsilon_\gamma \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \\ & = \frac{D_\gamma}{V} \nabla \cdot [-(\nabla \varepsilon_\gamma) \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma] \\ & + \frac{D_\gamma}{V} \nabla \cdot \left[\int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\gamma \cdot \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \end{aligned} \quad (5-26a)$$

$$\begin{aligned}
& \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \varepsilon_\sigma \frac{\partial^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t^2} + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \varepsilon_\sigma \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} \\
& - D_\sigma \varepsilon_\sigma \nabla^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \varepsilon_\sigma \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \\
& = \frac{D_\sigma}{V} \nabla \bullet \left[-(\nabla \varepsilon_\sigma) \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \right] \\
& + \frac{D_\sigma}{V} \nabla \bullet \left[\int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-26b}$$

Para obtener la *forma cerrada* de las Ecs. (5-26), necesitamos desarrollar el problema de valores a la frontera para $\tilde{\phi}$ (Capriste et al., 1986; Whitaker, 1999). Suponiendo que la fracción volumen es constante, podemos simplificar y dividir la Ec. (5-26) por ε_γ para obtener:

$$\begin{aligned}
& \tau_\gamma \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t^2} + \left(\tau_\gamma \Sigma_{a\gamma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} + \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \\
& = D_\gamma \nabla \bullet \left[\nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\gamma \bullet \vec{n}_{\gamma\sigma} dA
\end{aligned} \tag{5-27a}$$

$$\begin{aligned}
& \tau_\sigma \frac{1}{\nu} \frac{\partial^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t^2} + \left(\tau_\sigma \Sigma_{a\sigma} + \frac{1}{\nu} \right) \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \\
& = D_\sigma \nabla \bullet \left[\nabla \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma + \frac{1}{V_\sigma} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V_\sigma} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\sigma \bullet \vec{n}_{\sigma\gamma} dA
\end{aligned} \tag{5-27b}$$

donde $V_\gamma = \varepsilon_\gamma V$.

5.4 La ecuación de difusión promedio volumétrica

La ecuación promedio volumétrica para el flujo neutrónico se puede obtener a su vez como un caso particular de las ecuaciones (5-27), deducidas en la sección anterior, considerando la siguiente hipótesis:

Hipótesis: Suponer despreciable el tiempo relajación en el combustible y en el moderador.

En base a la hipótesis anterior se obtienen las siguientes ecuaciones para el flujo promedio, con la estructura típica de la ecuación de difusión de neutrones clásica más dos términos adicionales en el lado derecho de cada ecuación:

Para la fase moderador tenemos que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} + \Sigma_{a\gamma} \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma - D_\gamma \nabla^2 \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \\ & = \left[\frac{1}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \tilde{\phi}_\gamma \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \right] + \frac{D_\gamma}{V_\gamma} \int_{A_{\gamma\sigma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\gamma \cdot \vec{n}_{\gamma\sigma} dA \end{aligned} \quad (5-28a)$$

Mientras que para la fase combustible

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma}{\partial t} + (\Sigma_{a\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma}) \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma - D_\sigma \nabla^2 \langle \phi_\sigma \rangle^\sigma \\ & = \left[\frac{1}{V_\sigma} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \tilde{\phi}_\sigma \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \right] + \frac{D_\sigma}{V_\sigma} \int_{A_{\sigma\gamma(x,t)}} \nabla \tilde{\phi}_\sigma \cdot \vec{n}_{\sigma\gamma} dA \end{aligned} \quad (5-28b)$$

En esta parte de esta tesis conviene hacer notar su alcance:

La solución de las ecuaciones de difusión promedio volumétricas del flujo de neutrones definidas por las ecuaciones (5-28) serán el objetivo central de análisis de este trabajo de investigación y dado que desde su concepción, la filosofía de este trabajo fue el tratar de resolver los modelos matemáticos analíticamente, nos restringiremos a geometrías sencillas tales como los de geometría plana, cilíndrica, esférica, así como medios infinitos o semi-infinitos unidimensionales con el flujo de neutrones en estado estacionario.

Capítulo 6

LA ECUACION DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA EN FORMA CERRADA

6.1 Introducción

Dado que la ecuación de difusión promedio volumétrica depende de la función incógnita: $\langle \phi_i \rangle^i$ y $\tilde{\phi}_i$, donde $i = \gamma, \sigma$. Tenemos un problema de cerradura en estas ecuaciones. El propósito de este capítulo es resolver el problema de cerradura y encontrar una funcional del tipo:

$$\tilde{\phi}_i = f \left[\langle \phi_i \rangle^i, \frac{\partial \langle \phi_i \rangle^i}{\partial x} \right]$$

En donde la coordenada x , representa cualquier coordenada cartesiana, cilíndrica o esférica.

Es decir, la solución del problema de cerradura nos permite expresar a las desviaciones espaciales, $\tilde{\phi}_i$, en función del valor promedio del flujo $\langle \phi_i \rangle^i$ y de su primera derivada. Sustituyendo esta función en la ecuación de difusión promedio volumétrica sin cerrar, obtenemos la forma cerrada de esta ecuación, la cual puede ser resuelta analítica o numéricamente.

6.2 Solución del problema de cerradura

Es conveniente remarcar la siguiente convención en la derivación que sigue en esta sección: usaremos el subíndice o superíndice “i” y “j” para denotar ya sea la región del combustible o del moderador, i.e., $i = \gamma, \sigma$ y $j = \gamma, \sigma$; además en la misma ecuación cuando $i = \gamma$, $j = \sigma$ e $ij = \gamma\sigma$, mientras que cuando $i = \sigma$, $j = \gamma$ e $ij = \sigma\gamma$. Asimismo, la

ecuación de difusión promedio volumétrica contendrá un término de fuente genérico denotado por “S”, el cuál podrá ser igual o diferente de cero dependiendo de si la región es multiplicativa o no.

Aplicamos una metodología para obtener una forma cerrada de las ecuaciones de difusión de neutrones promedio volumétricas dadas por las Ecs. (5-28), desarrollando apropiadas relaciones de cerradura para el término $\tilde{\phi}$.

El método usado para obtener las ecuaciones diferenciales que gobiernan las desviaciones espaciales $\tilde{\phi}$ consta de los siguientes pasos (Crapiste et al., 1986):

1. Expresar la Ec. (4-1) (incluyendo a la Ec. 4-2) como:

$$\mathfrak{I}(\phi_i) = 0 \quad (6-1)$$

En la cual \mathfrak{I} representa un operador diferencial.

2. Sustituyendo la descomposición dada por la Ec. (5-16) en la Ec. (5-28), nos da :

$$\mathfrak{I}(\phi_i) = -\tilde{\mathfrak{I}}(\langle\phi_i\rangle^i, \tilde{\phi}_i) \quad (6-2)$$

3. El promedio intrínseco de fase de la Ec. (6-1) puede expresarse como:

$$\langle\mathfrak{I}(\phi_i)\rangle^i = -\langle\tilde{\mathfrak{I}}(\langle\phi_i\rangle^i, \tilde{\phi}_i)\rangle^i \quad (6-3)$$

4. Si las restricciones de escalas de longitud dadas por la Ec. (5-20) se satisfacen, podemos escribir:

$$\langle\mathfrak{I}(\langle\phi_i\rangle^i)\rangle^i = \mathfrak{I}(\langle\phi_i\rangle^i) = -\tilde{\mathfrak{I}}(\langle\phi_i\rangle^i) \quad (6-4)$$

i.e., el promedio de una cantidad promedio es igual a la cantidad promedio.

5. Haciendo la diferencia de las Ecs. (6-2 38)-(6-4 40), obtenemos:

$$\tilde{\mathfrak{S}}(\tilde{\phi}_i) = \tilde{\mathfrak{S}}(\langle \phi_i \rangle^i, \tilde{\phi}_i) - \langle \tilde{\mathfrak{S}}(\langle \phi_i \rangle^i, \tilde{\phi}_i) \rangle^i \quad (6-5)$$

El anterior resultado representa una ecuación diferencial general para las desviaciones espaciales y por lo tanto es un elemento clave en el esquema de cerradura. Esta ecuación se resuelve en una región representativa, tal como una celda unitaria.

Para desarrollar la ecuación diferencial para $\tilde{\phi}_i$, es conveniente expresar la ecuación de difusión clásica como:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D_i \nabla \phi_i) + \Sigma_{ai} \phi_i - S_i = 0 \quad (6-6)$$

El procedimiento de Capriste et al. (1986), es equivalente a restar la Ec. (5-28) de la Ec. (6-6), para obtener la ecuación para las desviaciones espaciales:

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{1}{\nu} \frac{\partial \tilde{\phi}_i}{\partial t}}_{\text{desv. acumulacion}} = & - \underbrace{\Sigma_{ai} \tilde{\phi}_i}_{\text{desv. absorcion}} + \underbrace{\nabla \cdot (D_i \nabla \tilde{\phi}_i)}_{\text{desv. difusion}} - \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \tilde{\phi}_i dA}_{\text{desv. escape total desde vol. prom.}} \\ & - \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{D_i}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \tilde{\phi}_i dA \right)}_{\text{desv. corriente local por unidad longitud}} \end{aligned} \quad (6-7)$$

Aquí consideramos que $\langle S_i \rangle^i - S_i = 0$, lo cual implica que la fuente de neutrones es igual a la intensidad de la fuente promedio intrínseca de fase, en otras palabras la fuente de neutrones es constante dentro del volumen promediante.

De acuerdo a Whitaker (1999) el término de desviación de la corriente local es despreciable cuando las restricciones dadas por la Ec. (5-20) se satisfacen, entonces la ecuación de desviaciones queda igual a:

$$\underbrace{\frac{1}{v} \frac{\partial \tilde{\phi}_i}{\partial t}}_{\text{desv. acumulacion}} = - \underbrace{\Sigma_{ai} \tilde{\phi}_i}_{\text{desv. absorcion}} + \underbrace{\nabla \cdot (D_i \nabla \tilde{\phi}_i)}_{\text{desv. difusion}} - \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \tilde{\phi}_i dA}_{\text{desv. escape total desde vol. prom.}} \quad (6-8)$$

Resolvemos el problema de cerradura en alguna región representativa tal como la ilustrada en la Figura 1c. Para resolver el problema de cerradura en esta region, hacemos la suposición de que el arreglo de combustible y moderador corresponde a un modelo geométrico espacialmente periódico, es decir, tenemos la:

Condición de periodicidad:

$$\tilde{\phi}_i(\mathbf{r} + \ell_k) = \tilde{\phi}_i(\mathbf{r}) \quad , \quad k = 1, 2, 3 \quad (6-9)$$

Aquí ℓ_k representa tres vectores unitarios de red que son requeridos para describir un arreglo del combustible espacialmente periódico. Es una aproximación aceptable el que

las cantidades promedio puedan linealizarse en una celda unitaria. Esto ocurre cuando las restricciones en las longitudes características indicadas por la Ec. (5-20) son válidas, y bajo esas circunstancias Carbonell y Whitaker (1984) han mostrado que el promedio de las desviaciones espaciales puede igualarse a cero, i.e., $\langle \tilde{\phi}_i \rangle = 0$. Usando las condiciones de frontera dadas por las Ecs. (4-4) y (4-5) y la descomposición dada por la Ec. (5-16) obtenemos la condición de frontera: $\tilde{\phi}_i = -\langle \phi_i \rangle^i + \phi_j$. Ahora, suponiendo que la condición inicial para $\tilde{\phi}_i$ pueden ignorarse, dado que las ecuaciones para las desviaciones espaciales pueden considerarse cuasi-estacionarias. Esto significa que el problema de cerradura toma también la forma cuasi-estacionaria dada por:

$$\underbrace{\Sigma_{ai} \tilde{\phi}_i}_{\text{desv. absorcion}} = \underbrace{\nabla \cdot (D_i \nabla \tilde{\phi}_i)}_{\text{desv. difusion}} - \underbrace{\frac{1}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \tilde{\phi}_i dA}_{\text{desv. escape total desde vol. prom.}} \quad (6-10a)$$

En la *interfase- $\gamma\sigma$*

$$\tilde{\phi}_i = -\langle \phi_i \rangle^i + \phi_j \quad (6-10b)$$

Periodicidad:

$$\tilde{\phi}_i(\mathbf{r} + \ell_k) = \tilde{\phi}_i(\mathbf{r}) \quad , \quad k = 1, 2, 3. \quad (6-10c)$$

Promedio:

$$\langle \tilde{\phi}_i \rangle^i = 0 \quad (6-10d)$$

La estructura de este problema de valores a la frontera sugiere una representación para $\tilde{\phi}_i$ dada por:

$$\tilde{\phi}_i = \mathbf{d}_i \cdot \nabla \langle \phi_i \rangle^i - \zeta_i \langle \phi_i \rangle^i \quad (6-11)$$

donde el vector \mathbf{d}_i y el escalar ζ son las funciones de cerradura, las cuales son determinadas por dos problemas de valores a la frontera análogos al problema dado por la Ec. (6-10) (Whitaker, 1999). Note que el vector \mathbf{d}_i tiene unidades de longitud (cm), mientras que ζ es adimensional.

El problema para determinar el vector \mathbf{d} , está dado por:

$$\Sigma_{ai} \mathbf{d}_i = \nabla \cdot (D_i \nabla \mathbf{d}_i) + \frac{1}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \mathbf{d}_i dA \quad (6-12a)$$

Necesitamos considerar condiciones de frontera de simetría así como las siguientes ecuaciones

$$\nabla \mathbf{d}_i = \xi_{ij} \nabla \mathbf{d}_j, \quad \text{en} \quad \textit{interfase -ij} \quad (6-12b)$$

$$\mathbf{d}_i(\mathbf{r} + \ell_k) = \mathbf{d}_i(\mathbf{r}) \quad , \quad k = 1, 2, 3. \quad (6-12c)$$

$$\langle \mathbf{d}_i \rangle^i = 0 \quad (6-12d)$$

donde ξ_{ij} es una constante de orden 1.

El problema para determinar el escalar ζ , está dado por:

$$\Sigma_{ai} \zeta_i = \nabla \cdot (D_i \nabla \zeta_i) + \frac{1}{V_i} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \zeta_i dA \quad (6-12e)$$

$$\zeta_i = 1 \quad , \quad \text{en} \quad \textit{interfase -ij} \quad (6-12f)$$

$$\zeta_i(\mathbf{r} + \ell_k) = \zeta_i(\mathbf{r}) \quad , \quad k = 1, 2, 3. \quad (6-12g)$$

$$\langle \zeta_i \rangle^i = 0 \quad (6-12h)$$

Las ecuaciones (Ecs. 6-12) se obtuvieron sustituyendo la Ec. (6-11) en la Ec. (6-10a) y fueron agrupadas en dos problemas de valores a la frontera: uno para el vector de cerradura \mathbf{d} y otro para la función de cerradura ζ . Este problema puede resolverse usando métodos analíticos o numéricos, dependiendo de si el problema es unidimensional o en más coordenadas espaciales y de suposiciones adicionales impuestas a las Ec. (6-12a) y Ec. (6-12e).

6.2.1 La ecuación de difusión promedio volumétrica en forma cerrada

Sustituyendo la Ec. (6-11), con $i=\gamma$, en la ecuación de difusión promediada en el volumen dada por la Ec. (5-28a) nos conduce a la forma cerrada:

$$\varepsilon_\gamma \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\varepsilon_\gamma \mathbf{D}_{eff\gamma} \cdot \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \right) + \varepsilon_\gamma \langle S_\gamma \rangle^\gamma - (\Sigma_{a\gamma} \varepsilon_\gamma + \kappa_\gamma) \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma + \mathbf{w}_\gamma \cdot \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma \quad (6-13)$$

donde

$$\mathbf{D}_{eff\gamma} = D_\gamma \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \mathbf{d}_\gamma dA \right) \quad (6-14)$$

$$\kappa_\gamma = \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \zeta dA \quad (6-15)$$

$$\mathbf{w}_\gamma = \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \mathbf{d}_\gamma dA - D_\gamma \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \zeta_\gamma dA \quad (6-16)$$

Procediendo en forma similar, se puede obtener un conjunto de ecuaciones con la misma estructura para el combustible (fase- σ). La Ec. (6-13) es la forma cerrada de la ecuación de difusión promedio volumétrica y contiene un coeficiente de difusión efectivo \mathbf{D}_{eff} , el cual es un tensor. Asimismo, esta ecuación tiene dos términos adicionales respecto a la ecuación de difusión clásica (Ec. 6-6). Estos términos se denominan la primera y segunda corrección. En la ecuación (6-13) el primer término de corrección está relacionado con el parámetro κ (un escalar), y el segundo término de corrección está relacionado con el vector \mathbf{w} . Esta ecuación indica que κ es un factor de corrección al proceso de absorción de neutrones, y \mathbf{w} nos da una contribución de la corriente de neutrones a través de la interfase combustible-moderador.

6.3 El flujo promedio en gran escala

El flujo promedio en una celda unitaria se puede deducir aplicando las Ecs. (5-15) con $\bar{\mathbf{w}} = 0$, $\tau_\gamma = 0$ y $\tau_\sigma = 0$. Comenzamos este análisis con la definición del flujo promedio en una celda unitaria:

$$\{\phi\} = \frac{1}{V} \int_V \phi dV \quad (6-17)$$

donde V es el volumen de la celda, explícitamente dado por:

$$V = V_F + V_M \quad (6-18)$$

donde V_F y V_M son el volumen de combustible y moderador, respectivamente.

Entonces, el flujo promedio en la celda puede escribirse como:

$$\{\phi\} = \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M \quad (6-19)$$

donde ε_F y ε_M son la fracción volumen del combustible y el moderador, respectivamente:

$$\varepsilon_F = \frac{V_F}{V} \quad (6-20)$$

$$\varepsilon_M = \frac{V_M}{V} \quad (6-21)$$

Las ecuaciones de difusión en cada fase de una celda unitaria son:

Combustible:

$$\begin{aligned} \varepsilon_F \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \phi_F \rangle^F}{\partial t} = \varepsilon_F \langle S_F \rangle^F - \Sigma_{aF} \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \cdot D_F \nabla \phi_F dA \\ + \nabla \cdot \left\{ D_F \left[\nabla \left(\varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \phi_F dA \right] \right\} \end{aligned} \quad (6-22)$$

Moderador:

$$\begin{aligned} \varepsilon_M \frac{1}{V} \frac{\partial \langle \phi_M \rangle^M}{\partial t} = \varepsilon_M \langle S_M \rangle^M - \Sigma_{aM} \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{MF} \cdot D_M \nabla \phi_M dA \\ + \nabla \cdot \left\{ D_M \left[\nabla \left(\varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{MF} \phi_M dA \right] \right\} \end{aligned} \quad (6-23)$$

Sumando estas ecuaciones obtenemos el siguiente modelo para una celda unitaria:

$$\varepsilon_F \frac{\partial \langle \phi_F \rangle^F}{\partial t} + \varepsilon_M \frac{\partial \langle \phi_M \rangle^M}{\partial t} = \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} \quad (6-24)$$

Tanto ε_F y ε_M son independientes del tiempo.

También:

$$\varepsilon_F \langle S_F \rangle^F + \varepsilon_M \langle S_M \rangle^M = \langle S_F \rangle \quad (6-25)$$

Si suponemos que el moderador no tiene fuentes de neutrones, entonces

$$\langle S_F \rangle = \varepsilon_F \langle S_F \rangle^F .$$

Las secciones eficaces, pueden expresarse como:

$$\Sigma_{aF} \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \Sigma_{aM} \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M = \{\Sigma_a\} \{\phi\} \quad (6-26)$$

Entonces,

$$\{\Sigma_a\} = \frac{\Sigma_{aF} \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \Sigma_{aM} \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M}{\{\phi\}} = \frac{\Sigma_{aF} \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \Sigma_{aM} \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M}{\varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M} \quad (6-27)$$

El anterior resultado puede expresarse como

$$\{\Sigma_a\} = \frac{\Sigma_{aF} + \Sigma_{aM} (\varepsilon_M / \varepsilon_F) \zeta}{1 + (\varepsilon_M / \varepsilon_F) \zeta} = \frac{\Sigma_{aF} + \Sigma_{aM} (V_M / V_F) \zeta}{1 + (V_M / V_F) \zeta} \quad (6-28)$$

donde

$$\zeta = \frac{\langle \phi_M \rangle^M}{\langle \phi_F \rangle^F} \quad (6-29)$$

es el factor de desventaja en el flujo (Duderstadt y Hamilton, 1976), y en donde $\langle \phi_F \rangle^F$

y $\langle \phi_M \rangle^M$ son los flujos neutrónicos promedio en el combustible y el moderador,

respectivamente.

Ahora, continuamos nuestra deducción sumando el tercer término del lado derecho de las ecuaciones (6-22) y (6-23):

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \cdot D_F \nabla \phi_F dA + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{MF} \cdot D_M \nabla \phi_M dA \\ = \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \cdot (D_F \nabla \phi_F - D_M \nabla \phi_M) dA = 0 \end{aligned} \quad (6-30)$$

debido a la condición de frontera en la interfase combustible-moderador:

$$-\mathbf{n}_{FM} \cdot D_F \nabla \phi_F = -\mathbf{n}_{MF} \cdot D_M \nabla \phi_M \quad (6-31)$$

donde $\mathbf{n}_{FM} = -\mathbf{n}_{MF}$.

Ahora, sumamos el cuarto término del lado derecho de las ecuaciones (6-22) y (6-23):

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left\{ D_F \left[\nabla (\varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F) + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \phi_F dA \right] \right\} \\ + \nabla \cdot \left\{ D_M \left[\nabla (\varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M) + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{MF} \phi_M dA \right] \right\} \\ = \nabla \cdot \left\{ D_F \nabla (\varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F) + D_M \nabla (\varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M) \right\} = \nabla \cdot (\{D\} \nabla \cdot \{\phi\}) \end{aligned} \quad (6-32)$$

donde

$$\frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} \phi_F dA + \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{MF} \phi_M dA = \frac{1}{V} \int_{A_{FM}} \mathbf{n}_{FM} (\phi_F - \phi_M) dA = 0 \quad (6-33)$$

El coeficiente de difusión promedio $\{D\}$ se supone constante en la celda y está dado por:

$$\{D\}\{\phi\} = D_F \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + D_M \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M \quad (6-34)$$

En la Ec. (6-32) se aplicó la condición de frontera en la interfase $\phi_F = \phi_M$. La Ec. (6-34) puede reescribirse como:

$$\{D\} = \frac{D_F + D_M (V_M / V_F) \zeta}{1 + (V_M / V_F) \zeta} \quad (6-35)$$

Finalmente, el modelo para el flujo promedio en gran escala está dado por:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \{\phi\}}{\partial t} = \langle S_F \rangle - \{\Sigma_a\} \{\phi\} + \nabla \cdot (\{D\} \nabla \cdot \{\phi\}) \quad (6-36)$$

Capítulo 7

FACTORES DE CORRECCIÓN DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN PROMEDIO VOLUMÉTRICA

7.1 Introducción

En este capítulo se deducen expresiones analíticas para las funciones de cerradura de las que dependen las desviaciones espaciales, para el caso unidimensional en coordenadas cartesianas. Asimismo, se obtienen expresiones analíticas para los factores de corrección en la ecuación de difusión de neutrones promedio volumétrica, las cuales no dependen de parámetros ajustables.

Se proponen además expresiones para factores de corrección constantes que sólo dependen de constantes nucleares y de la geometría del medio dispersor.

7.2 Factores de corrección para el caso unidimensional.

De nuevo, aplicamos la convención en la notación de los subíndices de que cuando $i = \gamma$, $j = \sigma$, entonces $ij = \gamma\sigma$, mientras que cuando $i = \sigma$, $j = \gamma$ se cumple que $ij = \sigma\gamma$.

Para el transporte de neutrones con un movimiento preferencial en dirección x , cruzando un área interfacial plana perpendicular a la dirección del movimiento, una suposición aceptable es que las funciones de cerradura dependen únicamente de la coordenada cartesiana x . Es decir

$$d_i = d_i(x) \quad (7-1)$$

$$\zeta_i = \zeta_i(x) \quad (7-2)$$

Bajo estas condiciones, el problema de valores a la frontera que define a las funciones de cerradura $d_i(x)$ y $\zeta_i(x)$ se puede reescribir como:

$$\Sigma_{ai} d_i = D_i \frac{d^2 d_i}{dx^2} + \frac{D_i}{V_i} \frac{dd_i}{dx} A_{ij} \quad (7-3)$$

$$\Sigma_{ai} \zeta_i = D_i \frac{d^2 \zeta_i}{dx^2} + \frac{D_i}{V_i} \frac{d\zeta_i}{dx} A_{ij} \quad (7-4)$$

Para este caso los factores de corrección de la ecuación de difusión promedio volumétrica están dados por el conjunto de ecuaciones:

$$\mathbf{D}_{eff,i} = D_i \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V} \mathbf{d}_i A_{ij} \mathbf{n}_{ij} \right) \quad (7-5a)$$

O bien

$$\mathbf{D}_{eff,i} = D_i \left(\mathbf{I} - \frac{1}{V} \mathbf{d}_i A_{ij} \vec{l} \right) \quad (7-5b)$$

$$\kappa_i = -\frac{D_i}{V} \frac{d\zeta_i}{dx} A_{ij} \quad (7-6)$$

$$\mathbf{w}_i = -\frac{D_i}{V} \frac{dd_i}{dx} A_{ij} \vec{l} - \frac{D_i}{V} \zeta_i A_{ij} \mathbf{n}_{ij} \quad (7-7a)$$

O bien

$$\mathbf{w}_i = -\frac{D_i}{V} \frac{dd_i}{dx} A_{ij} \vec{l} + \frac{D_i}{V} \zeta_i A_{ij} \vec{l} \quad (7-7b)$$

Caso 1. Medio finito con el flujo dependiente de la coordenada cartesiana x

(placas):

En este caso las soluciones generales para el problema de valores a la frontera dado por las ecuaciones (7-3) y (7-4), están dadas por las expresiones:

$$d_i = e \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{A_{\text{int}}}{V_i} \right) x \right] \left[a_{i1} \exp \left[\frac{1}{2} \lambda x \right] + a_{i2} \exp \left[-\frac{1}{2} \lambda x \right] \right] \quad (7-8)$$

$$\varsigma_i = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{A_{\text{int}}}{V_i} \right) x \right] \left[b_{i1} \exp \left[\frac{1}{2} \lambda x \right] + b_{i2} \exp \left[-\frac{1}{2} \lambda x \right] \right] \quad (7-9)$$

En estas expresiones

$$\lambda = \sqrt{\left(\frac{A_{ij}}{V_i} \right)^2 + \frac{4}{L_i^2}}$$

donde $a_{i1}, a_{i2}, b_{i1}, b_{i2}$, son constantes de integración.

Caso 2. Medio semi-infinito, γ , con el flujo dependiente de la coordenada

cartesiana x:

En este caso la solución general es similar al caso anterior, variando las condiciones de frontera para encontrar las constantes $a_{i1}, a_{i2}, b_{i1}, b_{i2}$:

Aplicando las condiciones de frontera en el infinito:

$$\tilde{\phi}_\gamma \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow \infty, \text{ i.e. } d_i \rightarrow 0, \varsigma_i \rightarrow 0, \text{ cuando } x \rightarrow \infty \quad (7-10)$$

Se obtiene que $a_{i1} = 0; b_{i1} = 0$.

Entonces

$$d_i = a_{i2} e \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{A_{\text{int}}}{V_i} \right) x \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \lambda x \right] \quad (7-11)$$

$$\varsigma_i = b_{i2} e \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{A_{\text{int}}}{V_i} \right) x \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \lambda x \right] \quad (7-12)$$

En el origen se puede usar una condición de frontera análoga a la condición de fuente:

$$\frac{1}{2} \frac{S_o}{A_{ij}} = -D_\gamma \left[-\langle \phi_i \rangle_M^i \left(\frac{d\zeta_i}{dx} \right)_{x=0} \right] = D_\gamma \langle \phi_i \rangle_M^i \left(\frac{d\zeta_i}{dx} \right)_{x=0} \quad (7-13)$$

donde S es la intensidad de la fuente plana en neutrones/segundo.

Obteniéndose el valor de la constante b_{i2} :

$$b_{i2} = -\frac{S_o}{A_{ij} D_i \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i \left[\left(\frac{A_{ij}}{V_i} \right) + \lambda \right]} \quad (7-14)$$

O bien

$$b_{i2} \cong -\frac{S_o L_i}{2 A_{ij} D_i \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \quad (7-15)$$

Por lo tanto

$$\zeta_i = -\frac{S_o L_i}{2 A_{ij} D_i \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \exp \left[-\frac{x}{L_i} \right] \quad (7-16)$$

Aplicando las soluciones obtenidas para, d_i y ζ_i , los factores de corrección de la ecuación de la ecuación promedio volumétrica, para desviaciones espaciales dependientes de la coordenada cartesiana, x, están dados por:

$$\mathbf{D}_{eff,i} = D_i \mathbf{I} \quad (7-17)$$

$$\kappa_i = -\frac{1}{V} \frac{S_o}{2 \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \exp \left[-\frac{x}{L_i} \right] \quad (7-18)$$

$$\mathbf{w}_i = -\frac{1}{V} \frac{S_o L_i}{2 \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \exp \left[-\frac{x}{L_i} \right] \vec{i} \quad (7-19)$$

Note que κ_i tiene unidades de inverso de longitud (cm^{-1}), mientras que el vector \mathbf{w}_i es adimensional.

7.3 Factores de corrección constantes.

Un análisis de órdenes de magnitud nos indica que estos factores de corrección son de orden cero, i.e., valores pequeños en la vecindad del cero, aunque el flujo neutrónico es muy sensible a estos valores. Esto se mostrará en los resultados numéricos de los dos últimos capítulos.

El valor máximo de estos valores ocurre cuando $x \rightarrow 0$:

$$\kappa_{i,MAX} = -\frac{1}{V} \frac{S_o}{2 \langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \quad (7-20a)$$

$$w_{i,MAX} = L_i \kappa_{i,MAX} \quad (7-20b)$$

También podemos deducir un valor promedio, que se podría usar como un factor de corrección constante. Este valor promedio estaría definido por:

$$\bar{\kappa}_i = \frac{1}{3\lambda_{tr}} \int_0^{3\lambda_{tr}} \kappa_i(x) dx \quad (7-21a)$$

$$\bar{w}_i = \frac{1}{3\lambda_{tr}} \int_0^{3\lambda_{tr}} w_i(x) dx \quad (7-21b)$$

Evaluando la expresión anterior resulta:

$$\bar{\kappa}_i = \frac{L_i}{6V\lambda_{tr}} \frac{S_o}{\langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \left[\exp\left(-\frac{3\lambda_{tr}}{L_i}\right) - 1 \right] \quad (7-22a)$$

$$\bar{w}_i = \frac{L_i^2}{6V\lambda_{tr}} \frac{S_o}{\langle \phi_i \rangle_{MAX}^i} \left[\exp\left(-\frac{3\lambda_{tr}}{L_i}\right) - 1 \right] \quad (7-22b)$$

Por lo tanto, en base al análisis de las ecuaciones (7-18), (7-19), (7-20) y (7-22) se obtiene la siguiente conclusión:

Para un medio semi-infinito, los valores del factor de corrección o coeficiente del término de primera derivada en la ecuación de difusión promedio volumétrica que representa el flujo interfacial, w_i , y el coeficiente del término de corrección en la tasa de absorción, κ_i , deben ser negativos y de orden cero.

Capítulo 8

COMPARACIÓN DE LA TEORÍA DE DIFUSIÓN LINEAL EXTENDIDA RESPECTO A LA TEORÍA DE DIFUSIÓN CLÁSICA, MÉTODO DE MONTE CARLO Y TEORÍA DE TRANSPORTE

8.1 Introducción

En la siguiente sección se hace un análisis de sensibilidad paramétrica de los factores de corrección de la ecuación de difusión promedio volumétrica. El estudio de sensibilidad se hace en el intervalo de valores de los parámetros matemáticamente aceptable que nos dé soluciones reales para el flujo neutrónico. Se estudia la difusión de neutrones térmicos con efectos interfaciales en un arreglo combustible-moderador que consiste de una serie infinita de placas planas de combustible y de moderador dispuestas de tal forma que cada placa de material multiplicativo tiene en cada extremo una placa de moderador. El modelo desarrollado es un modelo unidimensional para el grupo térmico obtenido de la aplicación de la ecuación de difusión promedio volumétrica. Los resultados obtenidos se comparan contra la teoría de difusión clásica, y el Método de Monte Carlo.

En la sección final, con el fin de probar o validar la teoría de difusión de neutrones lineal extendida desarrollada en capítulos previos, se estudia el caso límite de la difusión de neutrones monoenergéticos en un medio homogéneo semi-infinito con una fuente de neutrones, localizada en el origen de coordenadas en la frontera del material dispersor. La elección de esta situación física para contrastar la teoría propuesta en este trabajo de investigación, se basa en la disponibilidad de “benchmarks analíticos” de la teoría de transporte de neutrones probados y aceptados como problemas de referencia por parte de la comunidad internacional de la ingeniería nuclear. Los valores

de los parámetros en la solución de la ecuación de difusión promedio volumétrica, se escogieron de manera que sean matemáticamente aceptables, i.e., que nos den soluciones reales para el flujo neutrónico y respetando el orden de magnitud y el signo de los factores de corrección encontrado en el capítulo anterior, para la misma situación física.

En suma, en la segunda sección de este capítulo, se estudia la difusión de neutrones monoenergéticos tomando en cuenta las desviaciones espaciales en el flujo de neutrones debidas a la corriente interfacial causada por la fuente de neutrones, así como la influencia de las desviaciones espaciales en la tasa de absorción. El modelo que aquí se desarrolla es un modelo unidimensional para un grupo de energía obtenido de la aplicación de la ecuación de difusión promedio volumétrica en el moderador.

Los resultados obtenidos se comparan contra la teoría de difusión clásica, y contra la Teoría de Transporte de Neutrones.

8.2 Aplicación de la teoría de difusión lineal extendida en el modelamiento del flujo de neutrones térmicos en un arreglo infinito y periódico de placas planas combustible-moderador

Actualmente, el concepto del proceso de difusión de neutrones es una herramienta comúnmente usada para entender el comportamiento complejo del movimiento de los neutrones en un reactor nuclear. La mayoría de los estudios en reactores tratan el movimiento de los neutrones como un proceso difusivo en una escala macroscópica, i.e., pequeña y gran escala. A diferencia de los procesos difusivos de transferencia de masa de especies químicas, ya sean moléculas o átomos, que se llevan a cabo en la micro o nanoescala.

En esta teoría el flujo local de neutrones se descompone en la suma de un flujo promedio más una desviación espacial.

Por lo tanto la metodología que se aplica en esta sección es la siguiente:

- 1) Determinación del flujo promedio en el combustible y en el moderador. El flujo promedio se obtiene como la solución de un problema de valores a la frontera, PVF, a escala de la sección transversal de un ensamble de combustible o gran escala.
- 2) Determinación de las desviaciones espaciales. Éstas se obtienen como resultado de la solución de un PVF en el dominio o escala de una celda unitaria, i.e., pequeña escala.
- 3) Determinación del flujo de neutrones local, como la suma del flujo promedio en la celda unitaria más la desviación espacial. Esto se hace para el combustible y el moderador.
- 4) Comparación de los flujos locales deducidos de la teoría de difusión de neutrones clásica y la teoría de difusión lineal extendida.

En esta sección nos enfocamos en la comparación del flujo de neutrones térmico local en un arreglo de placas planas de combustible-moderador, para el caso estacionario.

Este caso corresponde al sistema heterogéneo más simple: placas paralelas de espesor finito de combustible y moderador que se van alterando hasta el infinito.

8.2.1 Problema de valores a la frontera para el flujo promedio en gran escala

De acuerdo a la deducción realizada en el capítulo 6, la ecuación de difusión promedio volumétrica en gran escala, Ec. (6-36), está dada por:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \{\phi\}}{\partial t} = \langle S_F \rangle - \{\Sigma_a\} \{\phi\} + \nabla \cdot (\{D\} \nabla \cdot \{\phi\}) \quad (8-1)$$

donde $\langle S_F \rangle = \varepsilon_F \langle S_F \rangle^F + \varepsilon_M \langle S_M \rangle^M$, por lo que para el caso de neutrones térmicos difundiéndose del moderador hacia el combustible se simplifica a:

$$\langle S_F \rangle = \varepsilon_M \langle S_M \rangle^M = \varepsilon_M S_M \quad (8-2)$$

En un sistema periódico, infinito y simétrico, no hay variaciones espaciales, por lo tanto:

$$\frac{d^2 \{\phi\}}{dx^2} = 0 \quad (8-3)$$

Entonces, de la ecuación (8-1), obtenemos:

$$\{\phi\} = \frac{\varepsilon_M S_M}{\{\Sigma_a\}} \quad (8-4)$$

Pero

$$\{\phi\} = \varepsilon_F \langle \phi_F \rangle^F + \varepsilon_M \langle \phi_M \rangle^M \quad (8-5)$$

y además

$$\zeta = \frac{\langle \phi_M \rangle^M}{\langle \phi_F \rangle^F} \quad (8-6)$$

Ahora, combinando las ecuaciones (8-5) y (8-6) se obtiene:

$$\{\phi\} = (\varepsilon_F + \zeta \varepsilon_M) \langle \phi_F \rangle^F \quad (8-7)$$

Igualando las ecuaciones (8-4) y (8-7), y usando la definición del factor de desventaja, obtenemos el flujo promedio en gran escala para el combustible y el moderador en el reactor:

$$\langle \phi_F \rangle^F = \frac{\varepsilon_M S_M}{\{\Sigma_a\}(\varepsilon_F + \varepsilon_M \xi)} \quad (8-8)$$

$$\langle \phi_M \rangle^M = \frac{\varepsilon_M \xi S_M}{\{\Sigma_a\}(\varepsilon_F + \varepsilon_M \xi)} \quad (8-9)$$

8.2.2 Problema de valores a la frontera en pequeña escala, para las desviaciones espaciales en el combustible y en el moderador

De acuerdo a la teoría desarrollada en esta tesis, las desviaciones espaciales en el combustible o en el moderador se obtienen de la relación:

$$\underbrace{\Sigma_{ai} \tilde{\phi}_i}_{\text{absorcion}} = \underbrace{\nabla \cdot (D_i \nabla \tilde{\phi}_i)}_{\text{difusion}} + \underbrace{\frac{\varepsilon_i^{-1}}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} \cdot D_i \nabla \tilde{\phi}_i dA}_{\text{corriente}} \quad (8-10)$$

Estas ecuaciones se pueden modificar fácilmente para dos o más grupos de energía, introduciendo las secciones eficaces de transferencia para cada grupo.

Desviaciones espaciales en el combustible:

La ecuación para las desviaciones espaciales en el combustible para una placa plana, es el caso más sencillo de la ecuación general para las desviaciones espaciales. En el caso estacionario y unidimensional la Ecuación (8-10) se simplifica a:

$$\frac{d^2 \tilde{\phi}_F}{dx^2} - \frac{\sum_{aF} \tilde{\phi}_F}{D_F} = \frac{1}{\varepsilon_F} (K_F - W_F + V_F)$$

Sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

$$CF.I \quad x = 0, \quad \frac{d\tilde{\phi}_F}{dx} = 0$$

$$CF.II \quad x = a, \quad \langle \phi_F \rangle^F \Big|_{x=a} + \tilde{\phi}_F(a) = \langle \phi_M \rangle^M \Big|_{x=a} + \tilde{\phi}_M(a)$$

Las desviaciones espaciales en el moderador se obtienen resolviendo:

$$\frac{d^2 \tilde{\phi}_M}{dx^2} - \frac{\sum_{aM} \tilde{\phi}_M}{D_M} = \frac{1}{\varepsilon_M} (K_M - W_M + V_M)$$

Sujeta a las siguientes condiciones de frontera:

C.F.I' en:

$$x = a, \quad D_F \frac{d\tilde{\phi}_F}{dx} = D_M \frac{d\tilde{\phi}_M}{dx}$$

C.F.II' en:

$$x = b \quad \frac{d\tilde{\phi}_M}{dx} = 0$$

La solución general para las desviaciones espaciales del flujo neutrónico en el combustible, dada por la suma de la solución del problema homogéneo y de una solución particular está dada por:

$$\tilde{\phi}_F = A \cosh \left(\sqrt{\frac{\sum_{aF}}{D_F}} x \right) + C \operatorname{Senh} \left(\sqrt{\frac{\sum_{aF}}{D_F}} x \right) - \frac{D_F}{\varepsilon_F \sum_{aF}} (K_F - W_F + V_F)$$

$$\tilde{\phi}_M = A' \cosh \left(\sqrt{\frac{\sum_{aM}}{D_M}} x \right) + C' \operatorname{Senh} \left(\sqrt{\frac{\sum_{aM}}{D_M}} x \right) - \frac{D_M}{\varepsilon_M \sum_{aM}} (K_M - W_M + V_M)$$

Aplicando las condiciones de frontera anteriores se obtienen las expresiones para las desviaciones espaciales en el moderador el combustible:

$$\tilde{\phi}_M = A' \left[\text{Cosh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} x \right) - \text{Tanh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} b \right) \text{Senh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} x \right) \right] - \frac{D_M (K_M - W_M + V_M)}{\epsilon_M \Sigma_{aM}} \quad (8-11)$$

$$\tilde{\phi}_F = A \text{Cosh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} x \right) - \frac{D_F (K_F - W_F + V_F)}{\epsilon_F \Sigma_{aF}}$$

donde

$$A' = \frac{D_F \sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} \text{Tanh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} a \right) \left[(\xi - 1) \langle \phi_F \rangle^F + \frac{D_F (K_F - W_F + V_F)}{\epsilon_F \Sigma_{aF}} - \frac{D_M (K_M - W_M + V_M)}{\epsilon_M \Sigma_{aM}} \right]}{D_M \sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} R' - D_F \sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} \text{Tanh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} a \right) R} \quad (8-12)$$

mientras que

$$A = \frac{(\xi - 1) \langle \phi_F \rangle^F + A' R + \frac{D_F (K_F - W_F + V_F)}{\epsilon_F \Sigma_{aF}} - \frac{D_M (K_M - W_M + V_M)}{\epsilon_M \Sigma_{aM}}}{\text{Cosh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aF}}{D_F}} a \right)}$$

$$R = \text{Cosh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} a \right) - \text{Tanh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} b \right) \text{Senh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} a \right)$$

$$R' = \text{Senh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} a \right) - \text{Tanh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} b \right) \text{Cosh} \left(\sqrt{\frac{\Sigma_{aM}}{D_M}} a \right)$$

8.2.3 Comparación de resultados para un arreglo infinito y periódico, de placas planas combustible-moderador de espesor finito

Como resultado del proceso de moderación, la fuente de neutrones térmicos está dada como el producto de la sección eficaz de transferencia para el grupo rápido, Σ_1 , multiplicada por el flujo rápido, ϕ_1 , de manera que, $S_M = \Sigma_1 \phi_1$. Este es el término de fuente que aparece en la ecuación de difusión clásica en el moderador para el grupo térmico. Mientras que en la ecuación del combustible, no se incluye una fuente de neutrones térmicos (Stacey, 2004). Es decir, se parte de la suposición de que en promedio existe una mayor concentración de neutrones térmicos en el moderador que en la interfase combustible-moderador, por lo que existe una corriente de neutrones térmicos hacia el combustible, los cuales difunden y son absorbidos en el seno del material multiplicativo.

Antes de proceder a comparar los resultados de la teoría de difusión lineal extendida, contra la teoría de difusión clásica y el Método de Monte Carlo, vamos a presentar un análisis de sensibilidad paramétrica de los cálculos en base al método estadístico, dados por el código MCNPX (MCNPX User's Manual, Version 2.4.0, 2002).

En la Figura 8.2.3.1 se muestra el efecto del espesor de moderador en el cálculo del flujo de neutrones térmico.

Como se puede observar el flujo de neutrones térmicos muestra un comportamiento similar al que ocurre en un reactor con reflector, a medida que se incrementa el espesor del moderador. Esta serie de gráficas demuestra que para un espesor dado de material multiplicativo, existe un espesor óptimo de moderador a partir del cuál la condición de

simetría en el seno de éste corresponde a un máximo y por lo tanto la corriente neutrónica desde el moderador es uniforme hacia todas las barras de combustible.

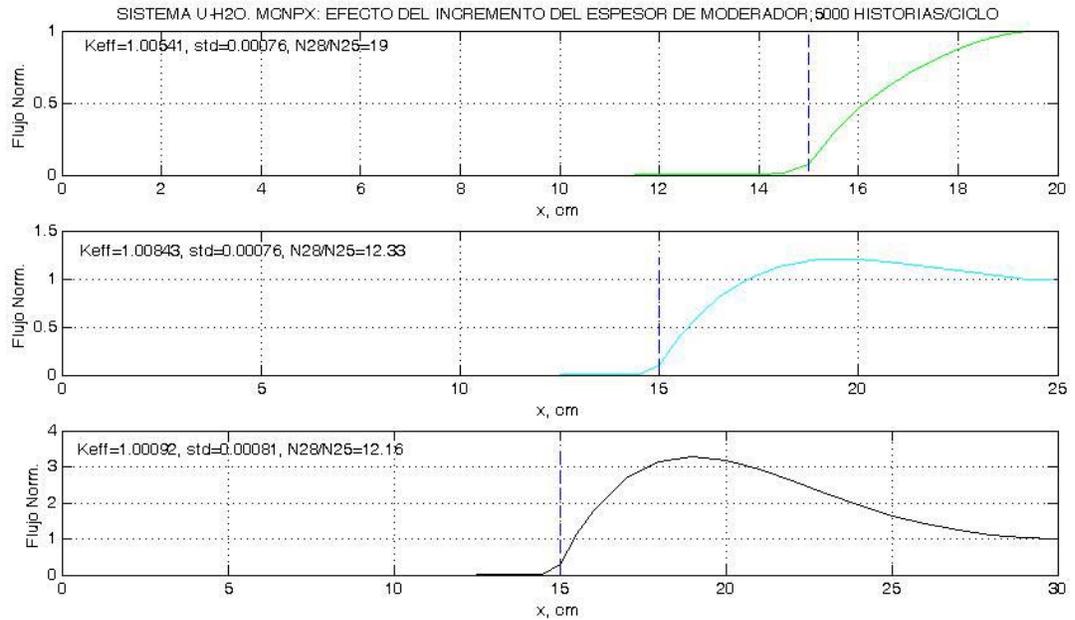


Fig. 8.2.3.1. Variación del espesor de moderador y su influencia en el flujo térmico en el sistema. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

En la Figura 8.2.3.2 y 8.2.3.3 se muestra el efecto del número de historias/ciclo en la simulación de la distribución de neutrones térmicos. En este caso se demuestra que el número de historias seleccionadas en la simulación no afectan el cálculo de la distribución de neutrones térmicos en la zona del moderador. Por otro lado, con el fin de ver el efecto del número de historias en la región del combustible, se escogió a propósito un espesor grande de material multiplicativo, observándose una mayor penetración de los neutrones cuando se incrementa el número de historias. Por lo tanto, es recomendable simular con MCNPX a partir de 5,000 historias. Como se muestra en estas dos gráficas, el estado crítico o subcrítico del sistema no influye en los cálculos obtenidos con el método de Monte Carlo.

En las Figuras 8.2.3.4 y 8.2.3.5 se muestran los resultados obtenidos para el flujo térmico con el método de Monte Carlo para un arreglo de placas paralelas, con un espesor total de combustible igual a 2.54 cm y espesor total de moderador igual a 7.62 cm, variando el número de historias por ciclo. Un sistema con estas dimensiones se utilizará para comparar la teoría desarrollada en esta tesis respecto a la teoría de difusión clásica y los resultados del código MCNPX.

Los peores resultados de la simulación de Monte Carlo se obtuvieron para 50 y 500 historias por ciclo, mientras que la simulación no presenta diferencias notables a partir de 5,000 historias por ciclo. Sin embargo, con el fin hacer un cálculo conservador, para la validación y comparación de los resultados que se muestran en las Figuras 8.2.3.6 y 8.2.3.7, se utilizaron 50,000 historias por ciclo.

En las Figuras 8.2.3.6 y 8.2.3.7, se muestra la solución proporcionada por la teoría de difusión clásica (Stacey, 2004), dada por la curva inferior en color azul, comparada contra la teoría de difusión lineal extendida y los resultados del código MCNPX.

En general, las gráficas en las Figuras 8.2.3.6 y 8.2.3.7, muestran el excelente acuerdo y más que nada la tendencia entre las curvas de la teoría de difusión lineal extendida y el Método de Monte Carlo en el seno del combustible y el moderador, lo que implica que los términos de corrección son físicamente aceptables, en el seno del combustible y del moderador.

Existe discrepancia entre las tres teorías alrededor de la zona interfacial. Observándose las mayores diferencias para el caso del agua pesada y obteniéndose los mejores resultados para la difusión de neutrones térmicos en agua ligera.

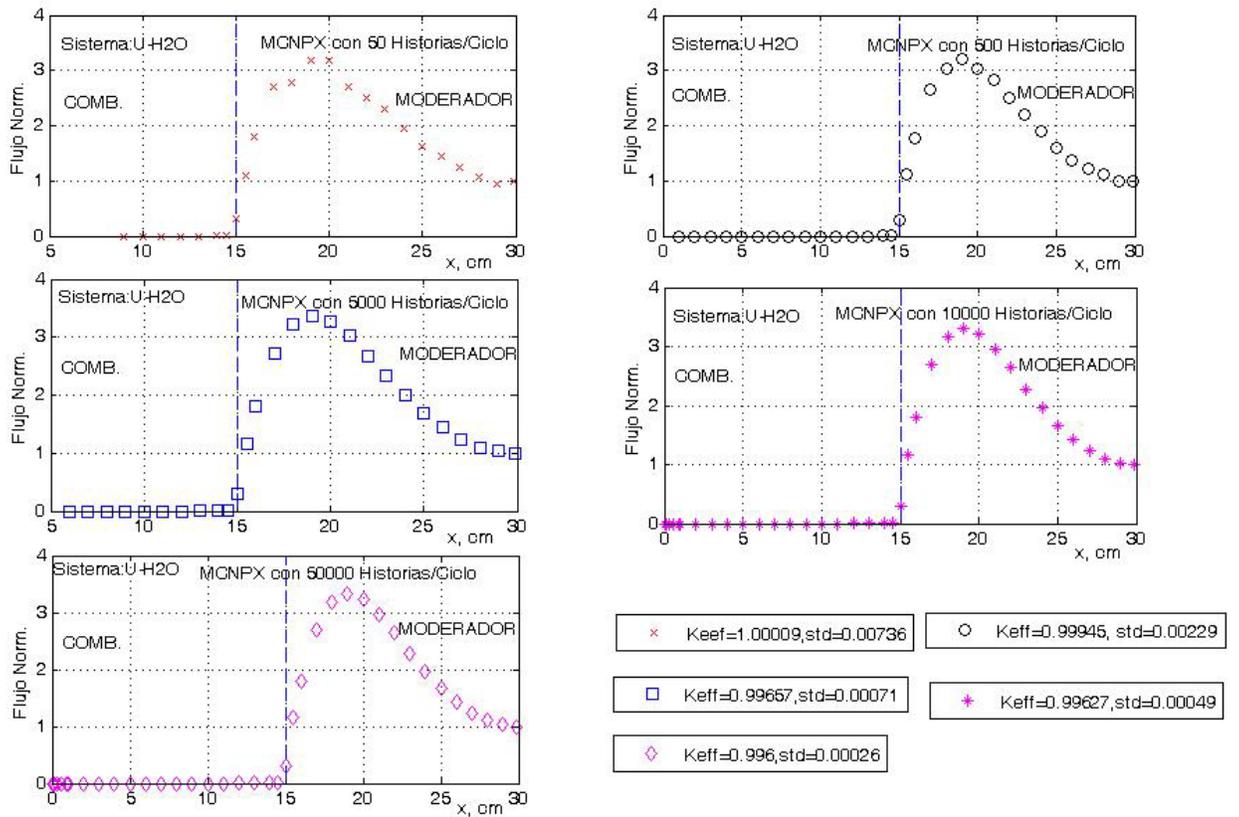


Fig. 8.2.3.2. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

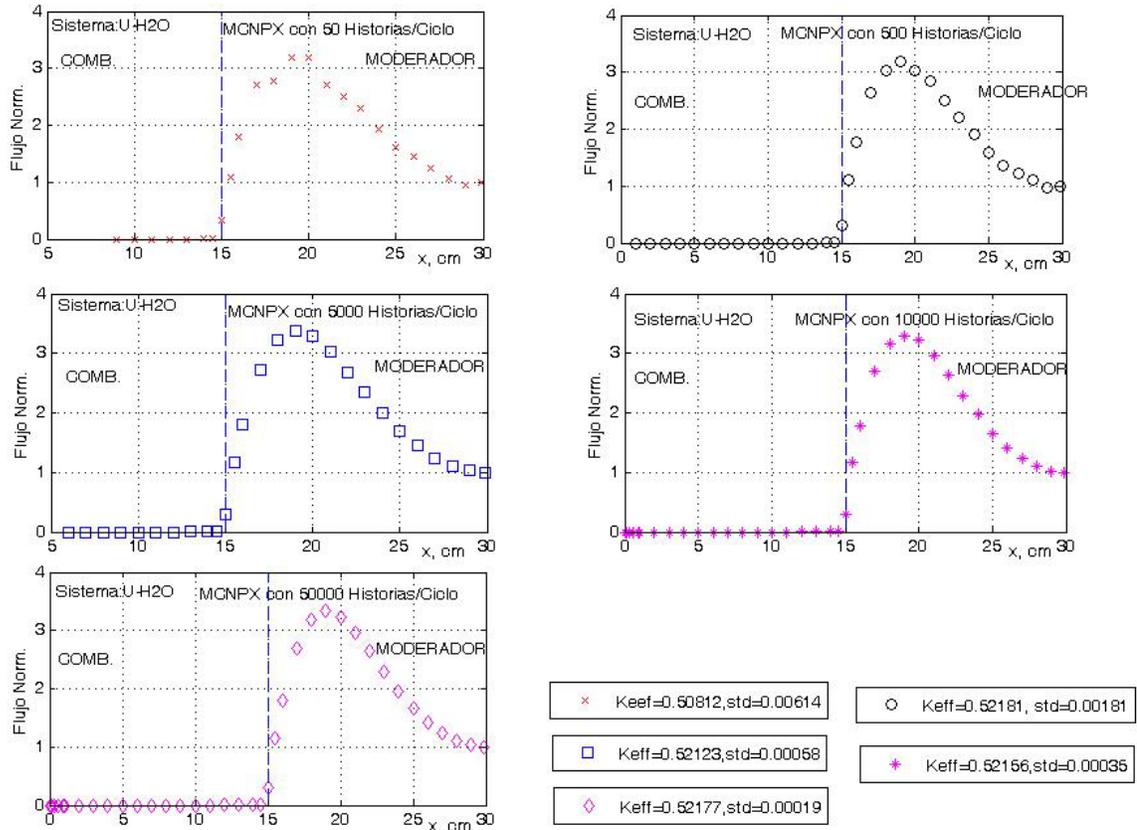


Fig. 8.2.3.3. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema subcrítico. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

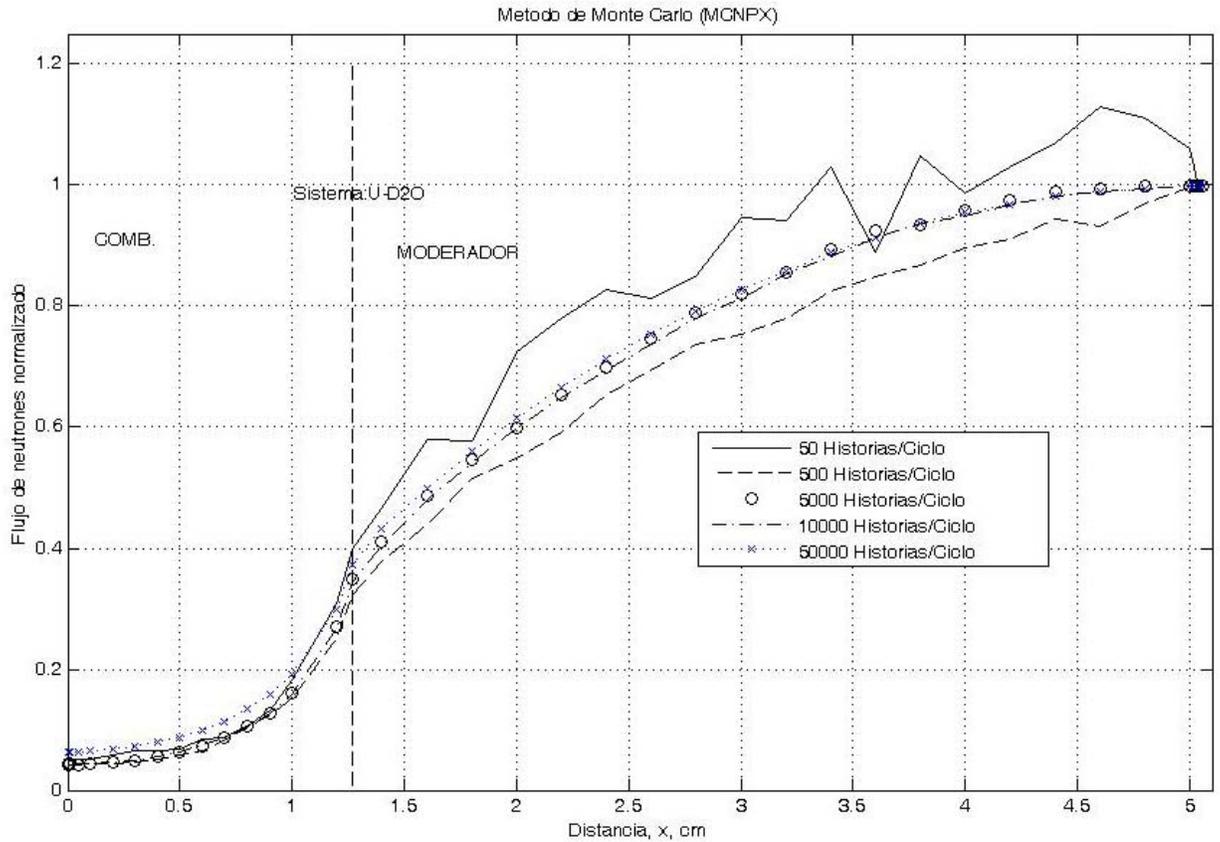


Fig. 8.2.3.4. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico de dos placas de U-D2O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

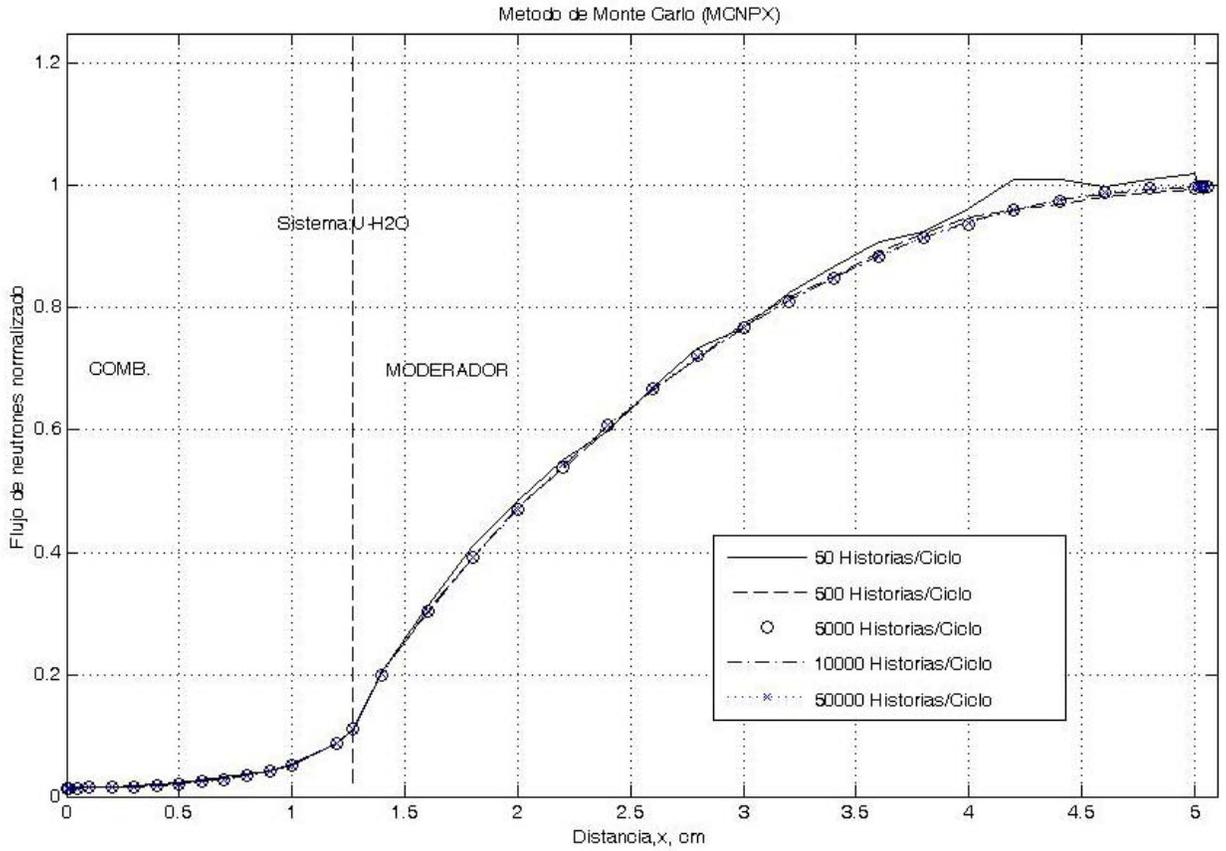


Fig. 8.2.3.5. Efecto del número de historias en los resultados de MCNPX, sistema crítico de dos placas de U-H₂O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

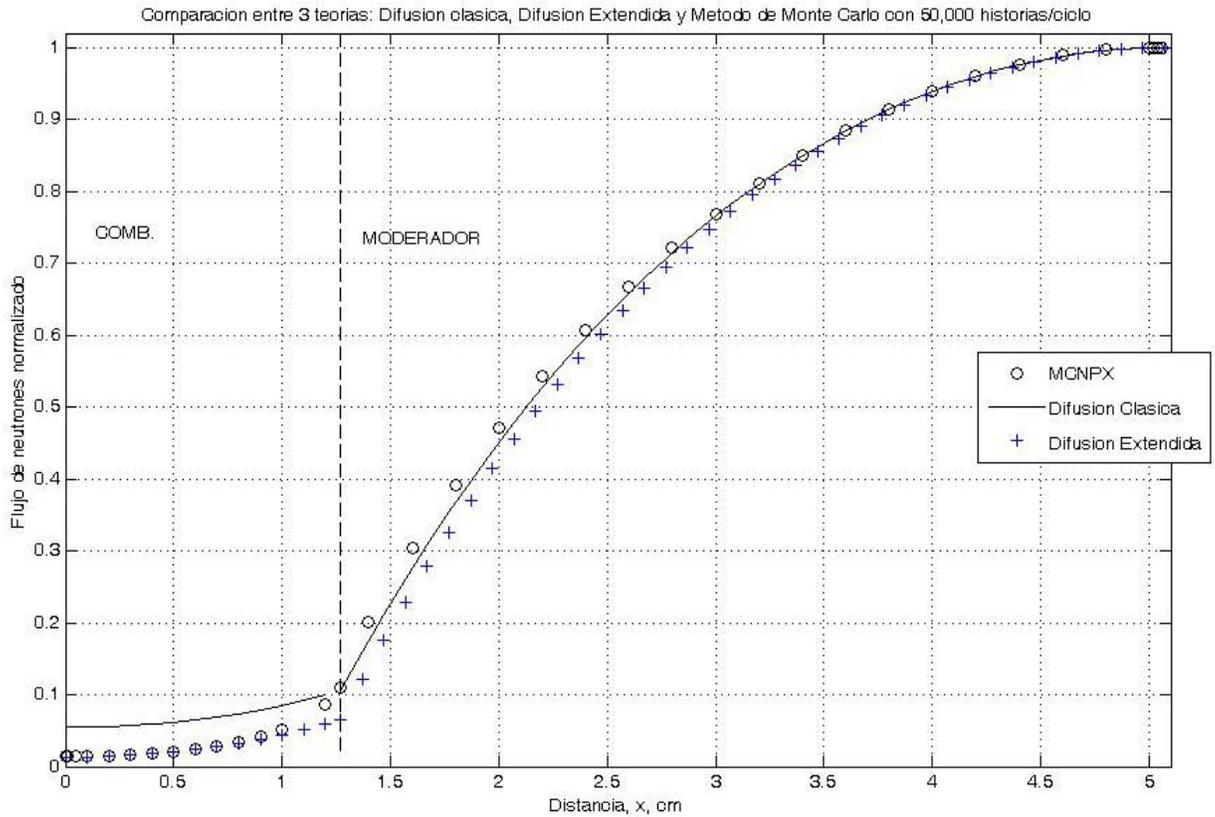


Fig. 8.2.3.7. Comparación entre la teoría de difusión lineal extendida contra la teoría de difusión clásica y el método estadístico (MCNPX). Sistema crítico de dos placas paralelas de U-H₂O. Espesor total de combustible $2a = 2.54$ cm y espesor total de moderador, $2b = 7.62$ cm. Resultados de MCNPX para 150 ciclos.

Abundando un poco más en los resultados mostrados en las Figuras (8.2.3.6) y (8.2.3.7), en base a las concavidades de la distribución del flujo neutrónico se pueden sacar las siguientes conclusiones:

Las curvaturas opuestas del flujo neutrónico en el combustible y el moderador indican los procesos físicos dominantes. Se confirma que en la zona del moderador con un flujo cóncavo hacia abajo, el fenómeno físico dominante corresponde al proceso difusivo o colisiones, donde la sección eficaz de dispersión es prácticamente igual a la sección eficaz total en el medio, i.e., el moderador posee una sección eficaz de absorción pequeña.

En la zona del combustible, con un flujo cóncavo hacia arriba, se confirma que el fenómeno físico dominante corresponde al proceso de absorciones. Existen colisiones o difusión de neutrones térmicos pero en mucha menor proporción a la tasa de absorción de éstos. Este comportamiento es análogo al de procesos disipativos o de decaimiento en otras áreas de los fenómenos de transporte.

El uso de secciones eficaces constantes por región en las teorías de difusión es la causa de la discrepancia en la vecindad de la interfase combustible-moderador. El Método de Monte Carlo nos indica un comportamiento no lineal principalmente en la tasa de absorción en el combustible, el cual no es tomado en cuenta por una sección eficaz de absorción constante en el medio multiplicativo.

Finalmente, en el caso de la teoría de difusión lineal extendida, la respuesta del flujo neutrónico se debe a que los factores de corrección introducidos en la ecuación de difusión promedio volumétrica son constantes en cada región. Sin embargo, conviene hacer notar que esta teoría tiene la posibilidad de usar coeficientes de corrección variables. Estas funciones dependen de la posición, x , en el caso de geometría plana, o de la distancia radial, r , en el caso de geometría cilíndrica. El uso de coeficientes de corrección variables se propone como trabajo de investigación futuro en el capítulo de conclusiones y recomendaciones.

8.3 Teoría de difusión de neutrones lineal extendida para medios homogéneos semi-infinitos

La teoría de difusión de neutrones lineal extendida es lo suficiente general para permitir el análisis de la difusión en medios homogéneos dispersores y absorbedores infinitos o semi-infinitos, con una fuente distribuida en su interior o localizada en una frontera.

Dado que la teoría de difusión de neutrones lineal extendida se desarrolló originalmente para el estudio de la difusión de neutrones en medios heterogéneos, un caso límite interesante se obtiene en el caso de dos regiones, por ejemplo combustible rodeado de moderador, al hacer tender a cero la fracción volumen de combustible y al mismo tiempo hacer tender a uno la fracción volumen de moderador. Este sería el caso de un medio semi-infinito, el moderador, con una fuente de neutrones localizada en el origen, con una intensidad S_0 . Análogamente al caso de difusión de neutrones clásica, sólo una ecuación modela la distribución del flujo neutrónico en el moderador, pero con la información adicional de la corrección o adición del efecto de la corriente interfacial que se da en la vecindad o alrededores de la fuente, y la corrección a la tasa de absorción en el seno del moderador.

En un medio homogéneo el coeficiente de difusión efectivo en una región es igual al coeficiente de difusión del material que constituye a esta región. Por otra parte, en un sistema heterogéneo se debe hacer una corrección en la constante de difusión que acompaña al término de segunda derivada espacial del flujo neutrónico, en la ecuación de balance. Debido a la simetría, otro caso donde no es necesaria la corrección en el coeficiente de difusión se presenta en el caso de procesos difusivos en medios infinitos

o semi-infinitos, con una fuente localizada típicamente en el origen de coordenadas, ni tampoco es el caso en celdas unitarias.

Por lo tanto, la ecuación de difusión de neutrones lineal extendida nos da más información, aún en el caso límite de medios homogéneos. Ya que contiene dos correcciones debidas a desviaciones espaciales en el flujo neutrónico en la vecindad de interfaces o de fuentes localizadas de neutrones, y desviaciones espaciales en el seno del medio dispersor-absorbedor.

Es conveniente hacer notar que se prefiere el término desviaciones espaciales más que fluctuaciones en el flujo neutrónico, ya que en ciencias e ingeniería esta última denominación se reserva a cantidades escalares o vectoriales que están variando en el tiempo respecto a un valor promedio. En el caso de las desviaciones espaciales, aún en el caso de estado estacionario, se tiene que una cantidad escalar o vectorial está variando en el espacio respecto a un valor promedio. En nuestro caso las variaciones espaciales se deben a:

- 1) Efecto de una corriente interfacial de neutrones en interfaces o en los alrededores de fuentes de neutrones.
- 2) Efectos espaciales en la tasa de absorción.

En esta sección se comparan tres teorías para describir el flujo de neutrones en un medio dispersor.

Para el caso de neutrones mono-energéticos las interacciones en medios infinitos y semi-infinitos se han estudiado extensamente en base a la teoría de difusión clásica y

con Teoría de Transporte aplicando una variedad de técnicas numéricas. Por esta razón, la validación de una de las aplicaciones de la teoría de difusión de neutrones lineal extendida, presentada en esta sección, se hizo al comparar los resultados contra los resultados de la Teoría de Transporte. Una introducción a la Teoría de Transporte se encuentra en el Apéndice 3. En este apéndice se da una deducción de la ecuación de transporte de neutrones, la cuál para el caso estacionario y unidimensional es resuelta para el caso de la dispersión y absorción de neutrones en medios infinitos y semi-infinitos. Estas soluciones constituyen los “Benchmarks” analíticos de la Teoría de Transporte de neutrones (Ganapol, B.D., 2008), contra las que se compararon los resultados de la teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis.

8.3.1 Problema de valores a la frontera para el flujo local

Para el combustible y considerando un grupo de energía, tenemos que:

$$\varepsilon_{\sigma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \langle \phi_{\sigma} \rangle^{\sigma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eff, \sigma} \cdot \nabla \langle \phi_{\sigma} \rangle^{\sigma}) - (\Sigma_{a\sigma} \varepsilon_{\sigma} - \nu \Sigma_{f\sigma} \varepsilon_{\sigma} + \kappa_{\sigma}) \langle \phi_{\sigma} \rangle^{\sigma} + \mathbf{w}_{\sigma} \cdot \nabla \langle \phi_{\sigma} \rangle^{\sigma} \quad (8-13)$$

Mientras que en el moderador, en el caso de neutrones monoenergéticos, se cumple que:

$$\varepsilon_{\gamma} \frac{1}{\nu} \frac{\partial \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{D}_{eff, \gamma} \cdot \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}) - (\Sigma_{a\gamma} \varepsilon_{\gamma} + \kappa_{\gamma}) \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \mathbf{w}_{\gamma} \cdot \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} \quad (8-14)$$

En el caso límite cuando $\varepsilon_{\sigma} \rightarrow 0$ y $\varepsilon_{\gamma} \rightarrow 1$, el sistema anterior de ecuaciones se reduce a:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \langle \phi_{\gamma} \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{\gamma} \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle) - (\Sigma_{a\gamma} + \kappa_{\gamma}) \langle \phi_{\gamma} \rangle + \mathbf{w}_{\gamma} \cdot \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle \quad (8-15)$$

En base a la discusión anterior, el sistema de ecuaciones para el flujo neutrónico promedio para el combustible y el moderador, se reduce a una sola ecuación para el flujo neutrónico local en el moderador dada por:

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial t} = D_\gamma \frac{\partial^2 \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial x^2} - (\Sigma_{a\gamma} + \kappa_\gamma) \langle \phi_\gamma \rangle + w_\gamma \frac{\partial \langle \phi_\gamma \rangle}{\partial x} \quad (8-16)$$

O bien

$$\frac{1}{\nu} \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial t} - D_\gamma \frac{\partial^2 \phi_\gamma}{\partial x^2} + (\Sigma_{a\gamma} + \kappa_\gamma) \phi_\gamma - w_\gamma \frac{\partial \phi_\gamma}{\partial x} = 0 \quad (8-17)$$

En donde la simplificación al caso local se realizó haciendo un intercambio de los operadores diferenciales e integrales, válido para parámetros y límites de integración constantes.

Para el caso estacionario, uni-dimensional que nos ocupa, para un medio semi-infinito con una fuente localizada en el origen, resulta el siguiente problema de valores a la frontera (PVF):

$$\frac{d^2 \phi_\gamma}{dx^2} + \frac{w_\gamma}{D_\gamma} \frac{d\phi_\gamma}{dx} - \left(\frac{1}{L_\gamma^2} + \frac{\kappa_\gamma}{D_\gamma} \right) \phi_\gamma = 0 \quad (8-18)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} -D_\gamma \frac{d\phi_\gamma}{dx} = \frac{S_0}{2}$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \phi_\gamma(x) < \infty$$

La solución analítica del PVF anterior está dada por:

$$\phi_\gamma = \frac{S_0}{D_\gamma \left[\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 4(L^2 + \beta)} \right]} \times \exp \left(-\frac{\alpha L + \sqrt{\alpha^2 L^2 + 4(1 + \beta L^2)}}{2L} x \right)$$

$$x > 0; \beta > -\frac{1}{L^2}$$

donde

$$\alpha = \frac{w_\gamma}{D_\gamma} ; \beta = \frac{\kappa_\gamma}{D_\gamma}$$

Cuando α y β son iguales a cero, recuperamos la solución analítica proporcionada por la teoría de difusión clásica (Duderstadt y Hamilton 1976):

$$\phi_\gamma = \phi_{\max} \exp \left(-\frac{x}{L} \right), \quad x > 0$$

donde

$$\phi_{\max} = \frac{S_0 L}{2D_\gamma}$$

8.3.2 Resultados para el transporte de neutrones térmicos en un medio homogéneo semi-infinito

Como se muestra en la secuencia de gráficas que siguen, básicamente se obtiene la misma tendencia de la solución proporcionada por la teoría de difusión clásica. En estas gráficas se estudia el efecto de las desviaciones espaciales en el flujo neutrónico causado por la geometría de la fuente. En este caso una fuente plana. En el eje de las ordenadas se encuentra la escala para el flujo neutrónico normalizado, mientras en el eje de las abscisas se encuentra la escala de la distancia normalizada.

Para el análisis del transporte de neutrones térmicos en un medio dispersor, se emplearon las constantes nucleares de moderadores a 2200 m/s, y con valores de $c = \Sigma_S / \Sigma_{total}$ muy cercanos a 0.99. Este es el caso del H₂O, D₂O, Be, y C (Stacey, 2004; Lamarsh y Baratta, 2001).

El análisis de sensibilidad paramétrica se limitó a valores de alfa y beta que no hagan que la solución se vuelva imaginaria. La idea fue variar los parámetros para obtener la solución para difusión extendida alrededor de la solución para difusión clásica, tomando en cuenta el orden de magnitud y el signo de los factores de corrección encontrados en el capítulo anterior y comparando los resultados contra la solución de Teoría de Transporte.

En la Figura 8.3.2.1 se muestra la solución proporcionada por la teoría de difusión clásica, para el caso de alfa=0 y beta=0, dada por la curva inferior en color azul, comparada contra la teoría de difusión lineal extendida. En esta figura se muestra también el efecto de la contribución de la corriente interfacial a las desviaciones espaciales (parámetro alfa).

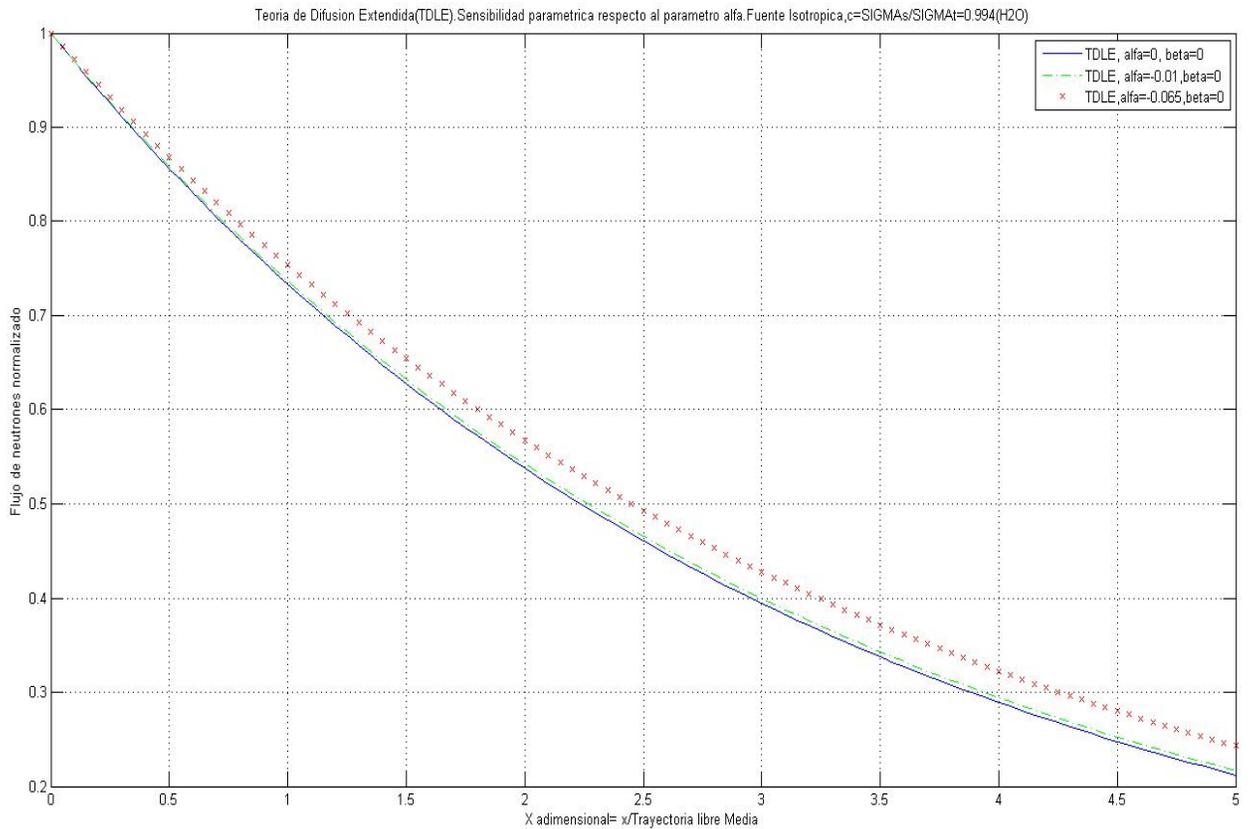


Fig. 8.3.2.1. Efecto del término de corriente interfacial en la ecuación de balance.

En la Figura 8.3.2.2 y 8.3.2.3, se muestra de nuevo el efecto del término de corrección debido a la corriente interfacial. En estos dos casos se comparan tres teorías: la teoría de difusión clásica, la teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis y la teoría de transporte de neutrones para medios dispersores con $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_{total}} = 0.994$. En la figura 8.3.2.2 los resultados se grafican hasta 5 trayectorias libres medias de transporte, mientras que en la figura 8.3.2.3 los resultados se grafican hasta 10 trayectorias libres medias. Se observa, como era de esperarse, que el efecto de la corriente interfacial influye en el comportamiento del flujo neutrónico en distancias más cercanas a la fuente de neutrones.

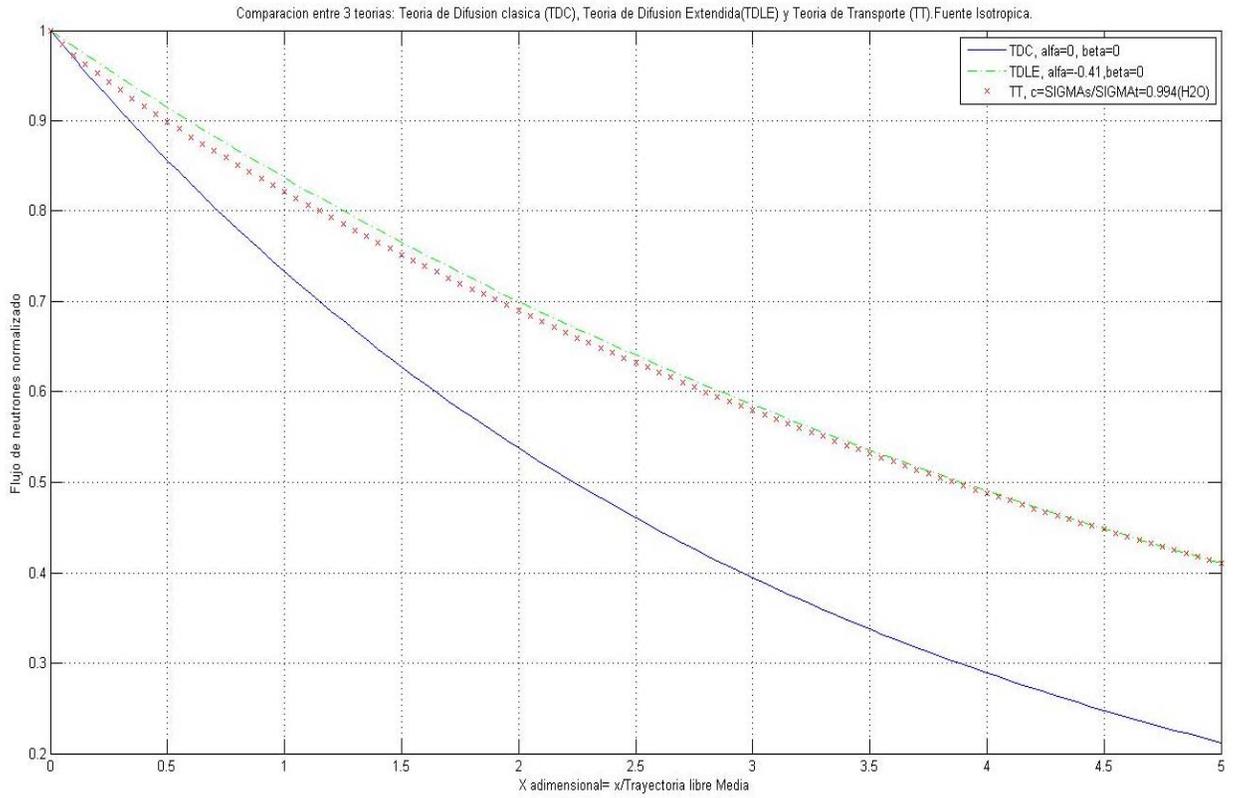


Fig. 8.3.2.2. Efecto del término de corriente interfacial hasta 5 trayectorias libres medias.

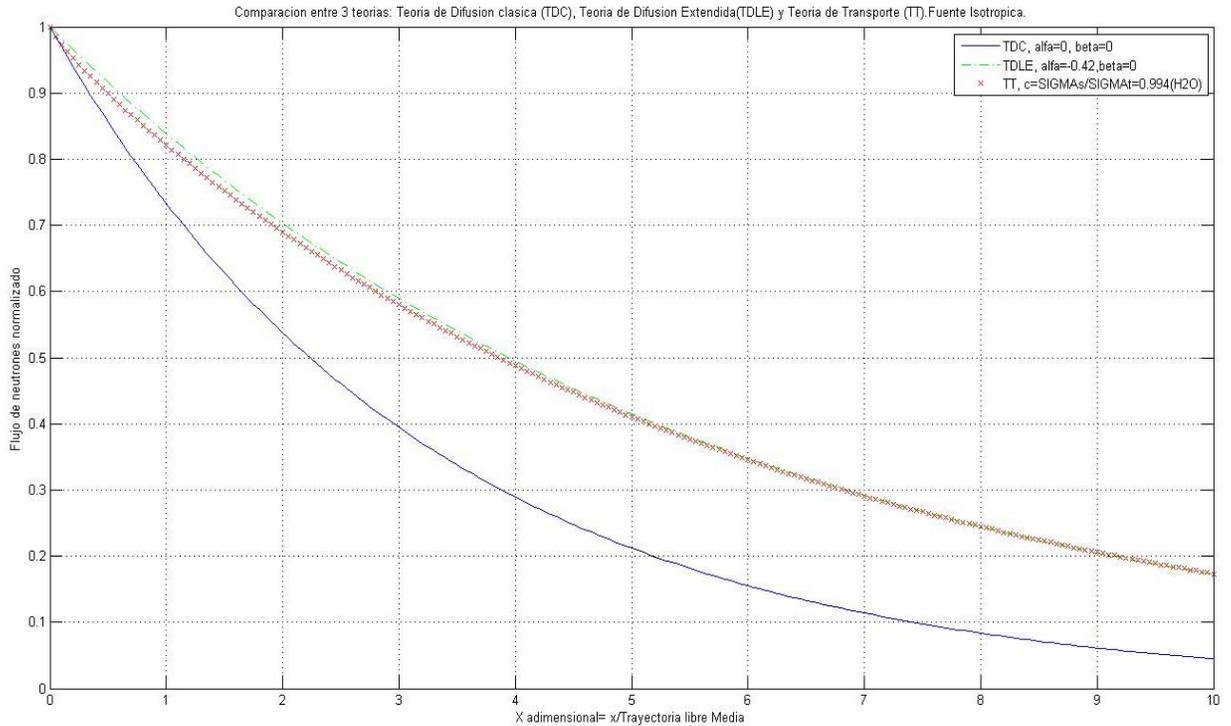


Fig. 8.3.2.3. Efecto del término de corriente interfacial hasta 10 trayectorias libres medias.

El comportamiento asintótico de las dos soluciones es similar a medida que nos alejamos de la fuente de neutrones, hacia el seno del medio dispersor.

Se espera que el comportamiento de las teorías de difusión clásica y extendida sea muy cercano a las predicciones de Teoría de Transporte en el interior del medio dispersor, alejados un número suficiente de trayectorias libres medias de la fuente localizada en el origen. En la Figura 8.3.2.4 y 8.3.2.5, se estudia el efecto de la corrección en la tasa de absorción (parámetro beta). La solución de difusión clásica está representada por la curva continua más inferior, línea azul.

Al ser menor la sección eficaz de absorción, debido al parámetro de corrección beta, el flujo de neutrones crece. También, en estos dos casos se comparan tres teorías: la teoría de difusión clásica, la teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis y la

teoría de transporte de neutrones para medios dispersores con $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_{total}} = 0.994$. En la figura 8.3.2.4 los resultados se grafican hasta 5 trayectorias libres medias de transporte, mientras que en la figura 8.3.2.5 los resultados se grafican hasta 10 trayectorias libres medias. Se observa, que la corrección en la tasa de absorción también influye en el comportamiento del flujo neutrónico en distancias más cercanas a la fuente de neutrones.

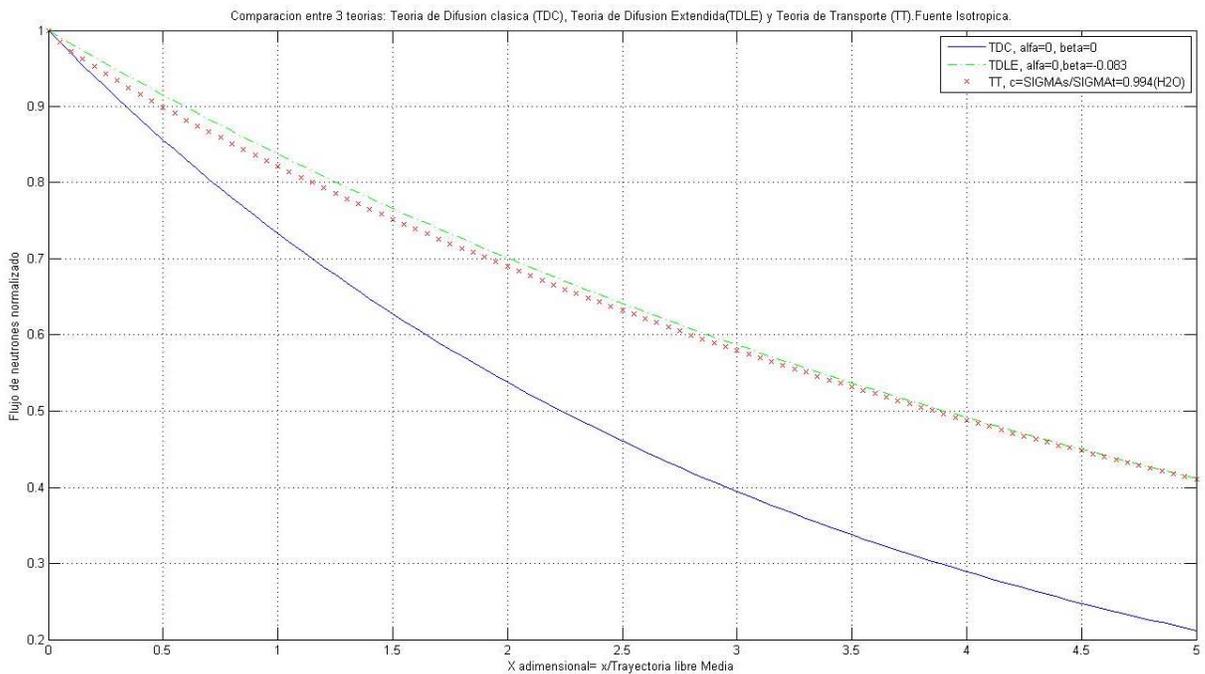


Fig. 8.3.2.4 Efecto del término de corrección en la tasa de absorción hasta 5 trayectorias libres medias.

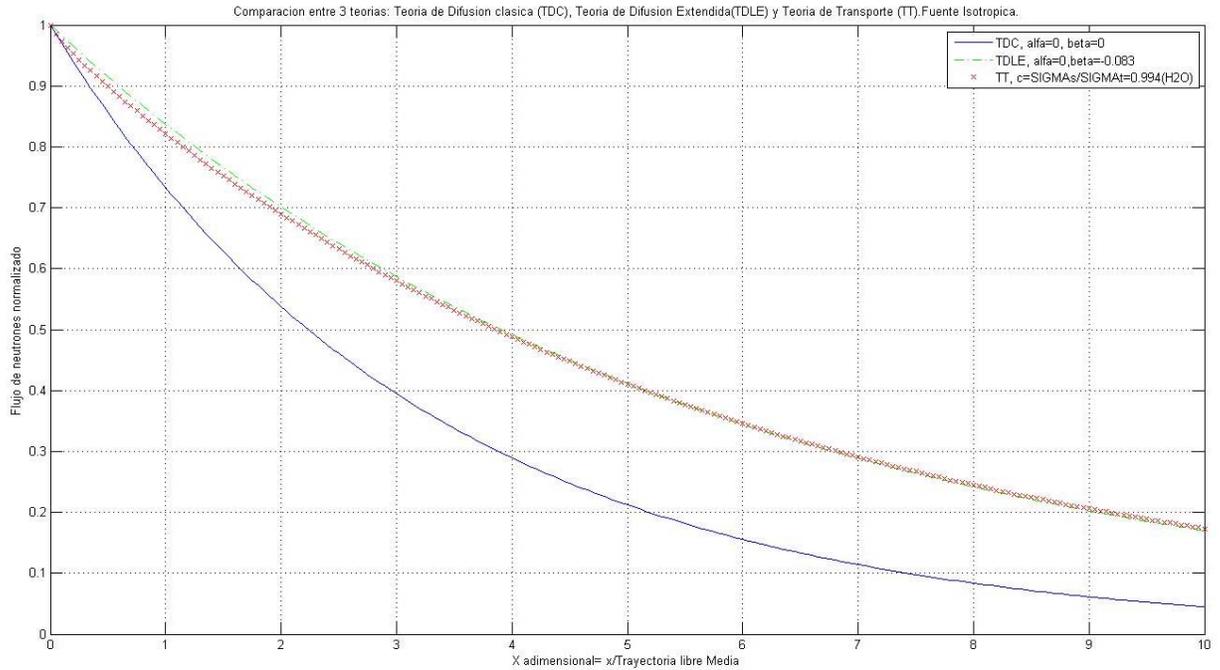


Fig. 8.3.2.5. Efecto del término de corrección en la tasa de absorción hasta 10 trayectorias libres medias.

En suma, la teoría de difusión lineal extendida propuesta en esta tesis, toma en cuenta los efectos interfaciales, ya sean interfaces combustible-moderador o barra de control-ensamble, o como en el presente estudio, el efecto de la geometría de una fuente localizada. Por lo que se estima que en otros casos las soluciones se acercarán más a las proporcionadas por Teoría de Transporte. Las gráficas muestran el excelente acuerdo y más que nada la tendencia entre las curvas de la teoría de difusión lineal extendida y Teoría de Transporte, lo que implica que los términos de corrección son físicamente aceptables.

Capítulo 9

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

Metodología:

Se ha presentado un estudio teórico del problema de difusión de neutrones en un medio heterogéneo con efectos interfaciales. Se aplicaron y se simplificaron las ecuaciones de difusión de neutrones promedio volumétrica para el combustible y el moderador, las cuales contienen un coeficiente de transporte efectivo $D_{\text{eff},i}$. Adicionalmente, estas ecuaciones para el flujo promedio incluyen dos nuevos términos denominados en este trabajo como los términos de primera y segunda corrección a la ecuación de difusión. El término de primera corrección K_i es una corrección al término de absorción de neutrones que aparece en la ecuación de difusión clásica, la segunda corrección w_i representa otra contribución a la difusión de neutrones debida a la corriente interfacial o en la frontera fuente-moderador. La difusividad efectiva y los parámetros de corrección son determinados por la solución a un problema de cerradura que debe resolverse usando un modelo geométrico dado por un arreglo espacialmente periódico de las celdas de un reactor nuclear. Es decir, en general los parámetros de corrección son funciones de la posición y en el caso unidimensional cartesiano la dependencia es respecto a “ x ”, en el caso de geometría plana, como se mostró en el Capítulo 7, o bien funciones radiales en el caso de geometría cilíndrica. Finalmente, se dedujeron expresiones teóricas para los factores de corrección y se demostró, el orden de magnitud y signo de los factores de corrección presentes en la teoría propuesta en este trabajo de investigación.

Validación y aplicaciones:

Por una parte, en esta tesis se hizo una comparación de las teorías de difusión clásica, teoría de difusión extendida, y el Método de Monte Carlo, para el caso de la difusión de neutrones térmicos en un arreglo de placas planas de combustible-moderador, para el caso estacionario.

Este caso corresponde al sistema heterogéneo más simple que representa a las regiones de combustible y moderador en un reactor nuclear: placas paralelas de espesor finito de combustible y moderador que se van alterando hasta el infinito.

Los resultados obtenidos muestran el excelente acuerdo y más que nada la tendencia entre las curvas de la teoría de difusión lineal extendida y el Método de Monte Carlo en el seno del combustible y el moderador, lo que implica que los términos de corrección son físicamente aceptables. Este resultado tiene la implicación interesante de que la teoría de difusión lineal extendida es apropiada para predecir el flujo en el interior del combustible, i.e., la distribución de potencia y por lo tanto es una herramienta alterna en el estudio de límites térmicos, la integridad del combustible y la seguridad de un reactor nuclear.

Por otra parte, se estudio la difusión de neutrones térmicos en un medio dispersor semi-infinito, con neutrones provenientes desde una fuente plana e isotrópica.

Este sistema se escogió debido a la disponibilidad de “Benchmarks Analíticos” de la Teoría de Transporte, para validar la teoría propuesta en esta tesis.

En este caso, la teoría de difusión extendida se reduce al caso de difusión clásica cuando los parámetros de corrección en la corriente interfacial, W_F , y en la tasa de absorción, K_F , son iguales a cero, coincidiendo ambas predicciones. Asimismo, se realizó un análisis de sensibilidad paramétrica para observar la influencia de los factores de

corrección en la tasa de absorción y en la corriente interfacial en el flujo de neutrones térmicos. Se encontró que el flujo neutrónico es más sensible al efecto de las correcciones en la tasa de absorción que a la corriente interfacial. De nuevo, los resultados obtenidos muestran el excelente acuerdo y más que nada la tendencia entre las curvas de la teoría de difusión lineal extendida y la teoría de transporte de neutrones en el seno del moderador, lo que implica que los términos de corrección son físicamente aceptables.

Recomendaciones:

Como tarea futura se recomienda la aplicación de métodos numéricos en la solución de problemas más complejos en la solución de la ecuación promedio volumétrica. Por ejemplo, el uso de factores de corrección variables, dependientes de la posición, para predecir el comportamiento fuertemente no lineal en la vecindad de la interfase combustible-moderador.

La propuesta de esta tesis abre una línea de investigación en la Física de Reactores Computacional. En particular en el área de análisis de transitorios nucleares aplicando la ecuación de onda promedio volumétrica. Un caso particular de esta ecuación sería la exploración de la solución de una nueva ecuación de cinética puntual para dos grupos de energía, en particular para reactores pulsados.

Otra veta de investigación la constituye la aplicación de la ecuación deducida en el Capítulo 8, Sección 8.3, en el estudio de fenómenos de dispersión desde fuentes caloríficas, de masa o de momentum, en donde típicamente se han aplicado las clásicas ecuaciones de difusión.

El área de fenómenos de transporte en el medio ambiente en donde el medio dispersor es el suelo, aire u océano, nos ofrece la oportunidad de aplicación de esta nueva ecuación para el análisis de la dispersión de cantidades escalares u vectoriales.

APÉNDICE 1

EL MÉTODO DEL PROMEDIO VOLUMÉTRICO

El método del promedio volumétrico se ha aplicado en sistemas de interés para la ingeniería química, e ingeniería civil, tales como sistemas bifásicos gas-líquido, líquido-sólido, gas-líquido-sólido, y en el estudio de problemas de interés para la ingeniería nuclear, tal como la propagación de ondas cinemáticas en reactores nucleares de agua hirviente.

Este método se aplicó para describir el comportamiento dinámico de una columna de burbujeo (Espinosa-Paredes y Soria, 1998), y predecir el comportamiento de las ondas de propagación en flujo en dos fases con aplicaciones en reactores nucleares del tipo BWR. Con este método fue posible en combinación con la teoría de flujo potencial obtener las relaciones de cerradura (conocidas también como relaciones constitutivas) en forma teórica con un modelo de celda concéntrica. Posteriormente se cambió de modelo y se propuso un modelo de celda unitaria excéntrica (donde la burbuja esférica se encuentra desplazada del centroide) para obtener expresiones teóricas de las relaciones de cerraduras; los resultados se reportan en el trabajo de Espinosa-Paredes (2001). Siguiendo esta técnica se propusieron cerraduras que incluyeron efectos como la expansión de la burbuja debido principalmente a variaciones de la presión del sistema con el de estudiar fenómenos de propagación de vacíos (Espinosa-Paredes et al., 2002 y 2004). El último trabajo en esta línea consiste en la derivación teórica de las relaciones de cerradura que consideran expansión de burbujas con un modelo de celda excéntrica (Espinosa-Paredes et al., 2005).

Nuestra motivación consiste en extender las ideas originales Sha y Chao (1981) en base a los conceptos ampliamente desarrollados por Whitaker (1999) para resolver el problema de cerradura aplicando el método del promedio volumétrico. Es importante

remarcar que Sha atacó el problema en una fase y nosotros ampliaremos estas ideas en dos y tres fases.

El trabajo de Zanotti y Carbonell (1984) será usado como una guía para la deducción del modelo matemático.

El método del promedio volumétrico está basado en las siguientes hipótesis:

H1. El modelo geométrico más simple: Las fases sólida y fluida están distribuidas de acuerdo a un modelo geométrico anular (celda unitaria).

H2. En el caso termohidráulico: la fase líquida se mueve en flujo laminar en la dirección axial o en flujo turbulento siendo el campo de velocidades un promedio de tiempo ajustado.

H3. Las propiedades físicas de ambas fases son tratadas como constantes.

H4. No hay disipación viscosa en el caso de flujos laminares.

H5. No hay reacciones químicas en el caso de sistemas de interés para la ingeniería de procesos. En el caso de sistemas de interés para la ingeniería nuclear, como lo son los reactores nucleares, si se presentan reacciones nucleares de fisión que son incluidas como un término de fuente en la ecuación de difusión de neutrones.

H6. Cada fase será un medio isotrópico homogéneo.

H7. Los campos de desviaciones espaciales son mucho más pequeños que las concentraciones (de neutrones) y las temperaturas promedio.

H8. Los campos de desviaciones de la concentración son cuasi-estacionarios.

H9. Los gradientes en la dirección axial serán mucho menores que los que ocurren en la dirección radial.

La metodología para obtener las ecuaciones de variación para la concentración de neutrones (flujo neutrónico) promediada en el área, o la temperatura promediada en un área transversal, consiste de los siguientes pasos:

1. Escribir la ecuación de continuidad para los neutrones en el caso de la neutrónica o las ecuaciones de conservación para el momento y la temperatura de las fases fluidas en el caso de un análisis termohidráulico. Estas ecuaciones deben ir acompañadas de las apropiadas condiciones de frontera.
2. Simplificación de las ecuaciones locales usando las hipótesis H1 a H6.
3. Promedio de las ecuaciones locales (Problema de cerradura).
4. Las ecuaciones diferenciales que gobiernan a las desviaciones espaciales se obtienen restando las ecuaciones promediadas de las ecuaciones locales.
5. Las condiciones de frontera para las desviaciones espaciales se obtienen sustituyendo las definiciones para estas desviaciones.
6. Simplificación de las ecuaciones diferenciales para las desviaciones espaciales con las hipótesis H7 a H9.
7. Se escriben los campos de desviaciones espaciales como una combinación lineal del promedio del campo y de sus derivadas. Los coeficientes de esta combinación lineal serán las funciones incógnita f_i , g_i , y h_i . Donde “i” denota una fase donde se está haciendo el análisis, i = líquido, sólido, gas, o una fase constituida por una mezcla homogénea.

8. Se substituye la combinación lineal en la ecuación simplificada para las desviaciones espaciales y en sus condiciones de frontera.
 9. En este paso, obtenemos las ecuaciones diferenciales para las funciones f_i , g_i , y h_i , así como las condiciones de frontera para estas ecuaciones.
 10. Se resuelven las ecuaciones diferenciales para f_i , g_i , y h_i .
 11. El procedimiento anterior eliminará el problema de cerradura que introducen las desviaciones espaciales y nos dará una ecuación unidimensional cerrada para el campo promedio.
 12. La solución de la ecuación promedio para el campo escalar o vectorial nos dará la distribución promedio de neutrones (flujo) respecto a la coordenada axial o la distribución promedio axial de velocidades y temperaturas en un reactor.
- Finalmente es opcional aplicar el método de los momentos (Zanotti y Carbonell, 1984) para obtener una expresión teórica para el coeficiente de difusión axial de neutrones, o los coeficientes de transporte axiales en el sistema.

APENDICE 2

APLICACIÓN DEL ANÁLISIS DE ORDENES DE MAGNITUD

En este apéndice deducimos la Ec. (5-25), partiendo de un análisis de orden de magnitud de la ecuación:

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \phi_{\gamma} dA = -(\nabla \varepsilon_{\gamma}) \cdot D_{\gamma} \nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} + \frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_{\gamma} \nabla \tilde{\phi}_{\gamma} dA \quad (\text{A2-1})$$

en donde para obtener el lado derecho de esta ecuación, simplemente se aplicó la descomposición de Gray, Ec. (5-16), al lado izquierdo de la misma.

Una estimación del orden de magnitud de la primera derivada del flujo promedio de neutrones es:

$$\nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} = \mathbf{O} \left(\frac{\Delta \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{\Delta L} \right) \quad (\text{A2-2})$$

donde $\Delta \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}$ representa el cambio del flujo de neutrones que ocurre sobre una distancia ΔL .

La anterior estimación del gradiente dado por la Ec. (A2-2) también se puede expresar como:

$$\nabla \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma} = \mathbf{O} \left(\frac{\Delta \langle \phi_{\gamma} \rangle^{\gamma}}{L_{\phi}} \right) \quad (\text{A2-3})$$

en la cuál L_{ϕ} es la longitud característica asociada con el flujo de neutrones promedio.

Una estimación del gradiente de la fracción volumen de la fase- γ está dada por:

$$\nabla \varepsilon_{\gamma} = \mathbf{O} \left(\frac{\Delta \varepsilon_{\gamma}}{L_{\varepsilon}} \right) \quad (\text{A2-4})$$

en la cuál L_{ε} es la longitud característica asociada con la fracción volumen de la fase γ . El orden de magnitud de la integral de superficie del vector normal es

$$\frac{1}{V} \int_{A_{ij}} \mathbf{n}_{ij} dA = \mathbf{O} \left(\frac{A_{ij}}{V} \right) = \mathbf{O}(a_{ij}) \quad (\text{A2-5})$$

Mientras que una estimación del orden de magnitud del gradiente de la desviación espacial del flujo neutrónico se puede escribir como

$$\nabla \tilde{\phi}_\gamma = \mathbf{O} \left(\frac{\Delta \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\ell_\gamma} \right) \quad (\text{A2-6})$$

En las dos últimas ecuaciones $a_{\gamma\sigma}$ representa el area interfacial y $\tilde{\phi}_\gamma = \mathbf{O}(\langle \phi_\gamma \rangle^\gamma)$, la cual fue obtenida en base a la condición de frontera dada por la Ec. (4-5) y la descomposición de Gray dada por la Ec. (5-16). En base a los resultados anteriores, podemos estimar el orden de magnitud de los terminos del lado derecho de la Ec. (A2-1), entonces

$$(\nabla \varepsilon_\gamma) \cdot D_\gamma \nabla \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma = \mathbf{O} \left[D_\gamma \left(\frac{\Delta \varepsilon_\gamma}{L_\varepsilon} \right) \left(\frac{\Delta \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{L_\phi} \right) \right] \quad (\text{A2-7})$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{\gamma\sigma}} \mathbf{n}_{\gamma\sigma} \cdot D_\gamma \nabla \tilde{\phi}_\gamma dA = \mathbf{O} \left[D_\gamma (a_{\gamma\sigma}) \left(\frac{\Delta \langle \phi_\gamma \rangle^\gamma}{\ell_\gamma} \right) \right] \quad (\text{A2-8})$$

Si dividimos la Ec. (A2-7) por la Ec. (A2-8), resulta

$$\frac{\Delta \varepsilon_\gamma \ell_\gamma}{L_\phi L_\varepsilon a_{\gamma\sigma}} \ll 1 \quad (\text{A2-9})$$

Esto se obtiene dado que $\ell_\gamma \ll L_\phi, L_\varepsilon$ y $a_{\gamma\sigma} = \mathbf{O}(r_0)$ (r_0 es la longitud característica del volumen promediante ilustrado en la Fig. 4.1.1.b'). La Ec. (A2-9) es una forma en que podemos escribir la Ec. (5-25); lo que queríamos demostrar.

APENDICE 3

CONCEPTOS TEORÍA DE TRANSPORTE

El problema principal de la teoría del reactor nuclear es conocer la distribución de neutrones en un arreglo combustible-moderador-estructura-absorbedores, ya que con ésta, es posible saber la frecuencia de interacción neutrón-núcleos e inferir la estabilidad de la reacción de fisión en cadena.

Debido a la anisotropía del flujo de neutrones en los alrededores de fuentes de neutrones, absorbedores y fronteras, el modelo que mejor estima la densidad o flujo de neutrones, es un modelo que toma en cuenta la variable angular.

El modelo matemático que describe adecuadamente estos flujos angulares es la ecuación de transporte de neutrones y su solución nos permitirá conocer la distribución de neutrones en el núcleo de un reactor. Por lo tanto, el propósito de esta sección de este reporte será el de presentar el desarrollo de este modelo en geometría general y los conceptos teóricos relacionados.

Conceptos teóricos

Como primer paso se definirán las cantidades en función de las cuales la distribución de neutrones será descrita. Para esto se supondrá que no hay interacciones entre los neutrones; ésta suposición es buena debido a la baja densidad de los neutrones en cualquier caso práctico, (10^{10} cm^{-3}), comparada con las densidades atómicas, (10^{23} cm^{-3}). Entonces los neutrones se supone que se comportan como un gas ideal. Y su distribución está completamente especificada por la función de distribución $n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ a la cuál nos referiremos como la densidad angular.

A continuación se enlistan las definiciones necesarias previas al planteamiento de la ecuación de transporte de neutrones:

Definición A3.1. $\hat{\Omega} = \frac{\vec{v}}{v}$, donde v es la velocidad del neutrón.

Definición A3.2. $n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dv dE d\hat{\Omega}$ = Número esperado de neutrones en el elemento de volumen dv alrededor del punto \vec{r} , con energías en el intervalo dE alrededor de E , y con ángulos en $d\hat{\Omega}$ alrededor de $\hat{\Omega}$ al tiempo t .

Definición A3.3. $\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = vn(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ es el flujo angular de neutrones o flujo en el espacio fase.

Definición A3.4. $\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \cdot \hat{n} dS dE d\hat{\Omega}$ es la corriente angular de neutrones.

Definición A3.5. $\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \cdot \hat{n} dS dE d\hat{\Omega}$ = Número esperado de neutrones por unidad de tiempo que atraviesan un área dS con vector unitario normal \hat{n} con energía E en el intervalo dE , y dirección $d\hat{\Omega}$ alrededor de $\hat{\Omega}$ al tiempo t .

También relacionadas a la densidad angular están las siguientes densidades neutrónicas:

Definición A3.6.

a) $n(\vec{r}, E, t) = \int n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}$

b) $n(\vec{r}, t) = \int n(\vec{r}, E, t) dE$

En forma análoga, las corrientes $\hat{J}(\vec{r}, E, t)$ y $\hat{J}(\vec{r}, t)$ pueden definirse integrando $\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ sobre $d\hat{\Omega}$ y $dE d\hat{\Omega}$ respectivamente. Entonces el número neto de neutrones atravesando dS en el tiempo dt está dado por $\hat{J}(\vec{r}, t) \bullet \hat{n} dS dt$.

Los neutrones insertados en el medio en consideración debidos a fuentes en general, pueden ser descritos por una densidad angular de la fuente $s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$.

Definición A3.7. $s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\hat{\Omega} dt =$ Número de neutrones producidos dentro de nuestro elemento de volumen dV en \vec{r} , energías en el intervalo comprendido por E y $E+dE$, y entre t y $t+dt$.

Las cantidades $s(\vec{r}, E, t)$ y $s(\vec{r}, t)$ pueden también definirse por la integración de $s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ sobre $d\hat{\Omega}$ y $dE d\hat{\Omega}$ respectivamente.

Si se encuentran núcleos atómicos en la región del espacio fase que estamos observando, entonces los neutrones sufrirán colisiones. Supondremos que la trayectoria libre media entre colisiones para un neutrón de energía E es $l(E)$; la suposición de que este parámetro es solamente función de la energía del neutrón, y no de la energía del núcleo blanco es válida cuando la velocidad del neutrón es mucho mayor que la del núcleo, pudiendo despreciar la velocidad de éste.

Hay que aclarar que la anterior suposición no es justificada para neutrones de muy baja energía (i.e. térmicos), ni tampoco si la trayectoria libre media es una función que depende fuertemente de la energía, como en el caso de las resonancias. Esta suposición

se puede suprimir definiendo adecuadamente la trayectoria libre media como un promedio de los movimientos térmicos del núcleo.

Puesto que un neutrón con velocidad, v , sufrirá en promedio v/l colisiones por segundo, entonces la tasa de colisión para neutrones de velocidad v en la posición \vec{r} será:

$$\frac{v}{l(\vec{r}, E)} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\hat{\Omega}$$

Nótese que $l(\vec{r}, E)$ se está tomando constante como constante en el tiempo e independiente de $\hat{\Omega}$.

El inverso de la trayectoria libre media es llamado la sección eficaz macroscópica y será denotada por el símbolo $\Sigma(\vec{r}, E)$:

$$\Sigma(\vec{r}, E) \equiv l^{-1}(\vec{r}, E)$$

Esta cantidad es la suma ponderada de las secciones eficaces de todos los núcleos presentes, esto es

$$\Sigma(\vec{r}, E) = \sum_i N^i(\vec{r}) \sigma^i(E)$$

donde el factor de ponderación, $N^i(\vec{r})$, es la densidad de los núcleos del tipo i en \vec{r} , y $\sigma^i(E)$ es la sección eficaz microscópica total para los núcleos del tipo i en presencia de neutrones de energía E . Esta sección eficaz microscópica es realmente la suma de muchas componentes, cada una designando una reacción diferente inducida en el sistema neutrón-núcleo ante una colisión.

Así en una situación típica, podemos tener

$$\sigma^i = \sigma_s^i + \sigma_a^i + \sigma_{in}^i + \sigma_f^i$$

donde las secciones eficaces parciales son respectivamente las de dispersión elástica, captura radiativa, dispersión inelástica, y fisión. También las secciones eficaces macroscópicas parciales se pueden definir como

$$\Sigma_s = \sum_i N^i \sigma_s^i$$

definiéndose en forma análoga las secciones eficaces macroscópicas restantes.

Por lo tanto, la tasa a la que la reacción de dispersión se lleva a cabo para neutrones de energía E en \vec{r} es $\nu n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \Sigma_s(\vec{r}, E) dV dE d\hat{\Omega}$, mientras que la tasa a la que la reacción de fisión ocurre está dada por una expresión similar con Σ_s reemplazada por Σ_f .

En nuestra discusión anterior acerca de la sección eficaz, le atribuimos una dependencia en la variable espacial, \vec{r} , y la energía E, sin embargo, un tipo de sección eficaz que es de gran utilidad en la teoría del reactor nuclear, es la sección eficaz de transferencia. Estas secciones eficaces son una generalización de las discutidas anteriormente, ya que en ellas se incluye también la dependencia angular y son conocidas también con el nombre de Kernel de dispersión.

Definición A3.8. $v'\Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) =$ Tasa a la cuál los neutrones se dispersan desde $E', \hat{\Omega}'$ hacia $E, \hat{\Omega}$ y en donde $\Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$ es el Kernel de dispersión.

La ecuación de transporte de neutrones

La ecuación de transporte de neutrones es la expresión matemática del balance de neutrones que se lleva a cabo en el espacio fase de seis dimensiones compuesto por \vec{r} y \vec{v} .

Esta ecuación es lineal en el flujo $\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ y de primer orden en las variables t , \vec{r} , y $\hat{\Omega}$. Este balance establece que la derivada total, $D\varphi$, en la dirección $\hat{\Omega}$ del flujo de neutrones φ en la posición \vec{r} por unidad de tiempo por unidad de área es igual a la tasa a la cual los neutrones son introducidos, s_T , en esa dirección menos la tasa a la cual son removidos, $\Sigma_t\varphi$, durante las colisiones. En esta igualdad se incluyen suposiciones tales como: a) el neutrón es una partícula puntual caracterizada por su posición y velocidad; b) no se toman en cuenta fluctuaciones en el valor esperado o probable de la densidad de neutrones.

La ecuación que gobierna el transporte de neutrones en un reactor nuclear es entonces (Lee, 1962):

$$D\varphi + \Sigma_t\varphi = s_T; \varphi = \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \quad (\text{A3-1})$$

en donde s_T es el término de fuente de neutrones en nuestro espacio fase debido a dispersiones, fisiones, fuentes externas, etc. Mientras que Σ_t es la sección eficaz macroscópica total o probabilidad de colisión por unidad de longitud.

La derivada total de la ecuación (A3-1) está dada por

$$D\varphi = \frac{1}{v} D_t \varphi + \nabla \cdot \widehat{\Omega} \varphi \quad (A3-2)$$

en donde $D_t \varphi$ es la derivada parcial de φ con respecto al tiempo, t , y el operador divergencia se aplica a las variables \vec{r} y $\widehat{\Omega}$, y v es la velocidad del neutrón que se supone constante. Suponiendo una geometría estacionaria, la ecuación (A3-2) se convierte en

$$D\varphi = \frac{1}{v} D_t \varphi + \widehat{\Omega} \cdot \nabla \varphi \quad (A3-3)$$

El término de fuente s_T en la ecuación (A3-1) es en realidad la suma de la expresión que incluye a la dispersión de neutrones en $E, \widehat{\Omega}$ desde $E', \widehat{\Omega}'$ más el aporte a causa de las fuentes de neutrones. El término de dispersión hacia adentro, el cuál caracteriza la transferencia de neutrones desde otras energías y direcciones dentro de $dE d\widehat{\Omega}$ está dado por (Duderstad y Hamilton, 1976):

Dispersión hacia adentro del espacio fase

$$= \int_{4\pi} d\widehat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s \left(E' \rightarrow E, \widehat{\Omega}' \rightarrow \widehat{\Omega} \right) n \left(\vec{r}, E', \widehat{\Omega}', t \right)$$

En tanto que los neutrones debidos a fuentes tales como la fisión y fuentes externas se incluyen en una expresión de la forma (Duderstad y Hamilton, 1976):

Fuentes de neutrones tanto externas como debidas a la fisión = $s(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$

Por lo tanto, s_T , está dado por

$$s_T = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s \left(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega} \right) n \left(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t \right) + s \left(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t \right) \quad (\text{A3-4})$$

Ahora, sustituyendo las ecuaciones (A3-3) y (A3-4) en la ecuación (A3-1), se obtiene la siguiente forma de la ecuación de transporte:

$$\frac{1}{v} D_t \varphi + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \Sigma_t \varphi = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s \left(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega} \right) n \left(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t \right) + s \left(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t \right) \quad (\text{A3-5})$$

Las condiciones de frontera ordinariamente impuestas al flujo son de la forma:

Reflejada :

$$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \varphi(\vec{r}, E, -\hat{\Omega}, t)$$

Periódica:

$$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \varphi(\vec{r} + \delta, E, -\hat{\Omega}, t)$$

donde δ es una traslación.

El flujo que entra es cero:

$$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = 0, \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0.$$

Esta condición es válida para toda \vec{r} sobre superficie del reactor y en donde \hat{n} es el vector unitario normal a la superficie del reactor.

Y además, en problemas dependientes del tiempo, es necesaria una condición inicial:

$$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, 0) = \varphi_0(\vec{r}, E, \hat{\Omega}), \text{ para toda } \vec{r}, E, \hat{\Omega}.$$

Resumen de suposiciones y alcance la Teoría de Transporte de Neutrones.

Hablamos que la teoría de transporte de neutrones es la mejor estimación para modelar matemáticamente la distribución de neutrones en un reactor nuclear, dado que toma en cuenta además de la dependencia espacial, la dependencia en la energía, la dependencia angular, y el tiempo. Sin embargo, el planteamiento de la ecuación de transporte de neutrones no está exento de hipótesis y además se tienen restricciones computacionales dadas por le número de variables involucradas.

Las hipótesis relevantes en el planteamiento de la ecuación de transporte de neutrones son:

H1. No hay interacciones entre los neutrones. Es decir, se supone que los neutrones se comportan como un gas ideal.

H2. Los cálculos de la trayectoria libre media de los neutrones, deben tomar en cuenta los movimientos debido a la agitación térmica de los núcleos. Si un código de transporte no toma en cuenta, la agitación térmica de los núcleos atómicos, se estará generando un error en el cálculo de la distribución de neutrones, especialmente, en el caso de reactores térmicos y durante la moderación de los neutrones, en la vecindad de las resonancias.

H3. La aplicación de la ecuación de transporte de neutrones supone una evaluación apropiada de los parámetros nucleares, tales como secciones eficaces totales y de transferencia.

Aun con estas hipótesis se tiene un reto tecnológico formidable en la solución numérica de la ecuación de transporte de neutrones.

La aplicación de la ecuación de transporte en tres dimensiones y para el estudio de transitorios en reactores nucleares está limitada por recursos computacionales. Este problema se puede explicar de la siguiente manera:

De acuerdo a la ecuación (A3-5), las tres coordenadas espaciales, la variable temporal, las dos variables angulares que definen $\hat{\Omega}$, y la variable energía nos darán un total de 7 variables continuas de las que depende la distribución de neutrones.

En el caso discreto, el número mínimo de incógnitas, I_{\min} , por resolver para un reactor tipo BWR-5 en un intervalo de tiempo $n(\Delta t)$ durante un evento transitorio estará dado por (adaptado de Francois J.L., 2007):

$$I_{\min} = N^{\text{ensambles}} \times N^{\text{PlanosAxiales}} \times N^{\text{BarrasCombustible/Ensamble}} \times N^{\text{Regiones/Barra}} \times N^{\text{RegionesCanalRefrigerante/Ensamble}} \times N^{\text{Variablesangulares}} \times N^{\text{GruposEnergia}} \times n \quad (\text{A3-6})$$

Esto nos dará un valor mínimo para $I_{\min} = 444 \times 25 \times 92 \times 14 \times 150 \times 8 \times 35 \times n = 6.005 \times 10^{11} n$ incógnitas por resolver, lo cual es impráctico y costoso.

La aproximación de difusión

Debido a la complejidad de la forma general de la ecuación de transporte de neutrones presentada en este apéndice, es obvio que una *solución analítica* para un problema real no es posible de obtener. Asimismo, como se vio en la sección anterior, por el número de variables involucradas una solución numérica usando una computadora no es económica (ver la sección final del capítulo de métodos de homogeneización). Es por esto, que la mayor tarea del análisis del reactor nuclear, será el introducir aproximaciones apropiadas a esta ecuación, las cuales permitirán resolverla analíticamente o en una computadora dependiendo de la naturaleza del problema. La aproximación de difusión tomando en cuenta o no a las variaciones temporales del vector de densidad de corriente neutrónica, constituye la base de la teoría de difusión lineal extendida. Esta teoría se aplicó para el desarrollo de los modelos matemáticos discutidos en esta tesis: la ecuación de difusión de onda promedio volumétrica y la ecuación de difusión promedio volumétrica para el flujo neutrónico en forma cerrada. Estos modelos matemáticos incluyen el efecto de las heterogeneidades representados por una corrección en la tasa de absorción y la contribución de la corriente interfacial combustible-moderador. Las nuevas ecuaciones de difusión resultantes son más económicas de resolver que las ecuaciones obtenidas en base a la Teoría de Transporte de neutrones y los métodos estadísticos (MCNPX).

REFERENCIAS

Anderson, T.B., y Jackson, R., (1967), A fluid mechanical description of fluidized beds. *Ind. Engng. Chem. Fundam.* 6, 527.

Barletta, A., y Zanchini, E., 1994. Hyperbolic heat conduction and local equilibrium: a second law analysis. *Int. J. Heat Mass Transfer.* 40, 1007-1016.

Bookout J.F.(1985).Two Centuries of Fossil Fuel Energy. International Geological Congress, Washington D.C.; July 10.

Bubnov, V.A., 1976. Wave concepts in theory of heat. *Int. J. Heat Mass Transfer* 19, 175-195.

Calabrese, C.R., y Grant, C.R., (1993), Use of heterogeneous finite elements generated by collision probability solutions for reactor core. *Annals of Nuclear Energy*, **20**, 117.

Cattaneo, C., 1958. A form of heat conduction equation which eliminates the paradox of instantaneous propagation. *Compte Rendus.* 247, 431-433.

Chen W-B., Wang, J., Qiu W-Y., y Ren, F-Y., 2008. Solutions for time-fractional diffusion equation with absorption: influence of different diffusion coefficients and external forces. *J. Phys. A: Math. Theor.* 41, 045003 (10pp).

Capriste, G.H., Rotstein, E., y Whitaker, S., 1986. A general closure scheme for the method of volume averaging. *Chem. Engng. Sci.* 41, 227-235.

Dall'Osso, A., (2006), A spatial rehomogenization method in nodal calculations. *Annals of Nuclear Energy* 33, 869.

Duderstad, J.J., y Hamilton, L.J. (1976). *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley and Sons, Inc.

Episodes (1989) Vol. 12, pp. 257-262.

Espinosa-Paredes G., Morales-Sandoval, J.B., Vázquez-Rodríguez, R., y Espinosa-Martínez, E.G. (2008). Constitutive laws for the neutron density current. *Annals of Nuclear Energy*, **35**, 1963-1967.

Espinosa-Paredes, G., Alvarez-Ramírez, J., y Vázquez, A.(2006a). Detecting long-range correlation with detrended fluctuation analysis: Application to BWR stability. *Annals of Nuclear Energy* 33 (16), 1308-1313.

Espinosa-Paredes G., Nuñez-Carrera A., y Vazquez-Rodriguez A. (2006b). Simplified distributed parameters BWR dynamic model for transient and stability analysis. *Annals of Nuclear Energy* **33** (14-15), 1245-1259.

Espinosa-Paredes, G., Nuñez-Carrera, A., y Martínez-Mendez, E. J. (2005). Interaction forces model on a bubble growing for nuclear best estimate computer codes. *Annals of Nuclear Energy* **32**, 1546-1566.

Espinosa-Paredes, G., Cazarez-Candia, O., y Vazquez, A. (2004). Theoretical derivation of the interaction effects with expansion effects to bubbly two-phase flows. *Annals of Nuclear Energy* **31**(2), 117-133.

Espinosa-Paredes, G., Cazarez, O., García, A., y Martínez-Méndez, J. E. (2002). Void fraction propagation in a bubbly two-phase flow with expansion effects. *Annals of Nuclear Energy* **29** (11), 1261-1298.

Espinosa-Paredes, G. (2001). Theoretical derivation of the interaction effects with an eccentric cell model and void fraction propagation in two-phase flow. *Annals of Nuclear Energy* **28** (2), 659-688.

Espinosa-Paredes, G., y Soria, A.(1998). Method of finite difference solutions to the transient bubbly air/water flows. *I. J. for Numerical Methods in Fluids* **26**, 1155-1180.

Francois, J.L., 2007. Esquema de Cálculo para el Análisis de Reactores de Agua Ligera. Comunicación Privada. Facultad de Ingeniería-UNAM, México, D.F.

Ganapol, B.D. (2008). *Analytical Benchmarks for Nuclear Engineering Applications, Case Studies in Neutron Transport Theory*, NEA/OECD, Paris, France.

García Barrón F. B., Arreola Villaseñor, G., Vázquez-Rodríguez, R., y Espinosa-Paredes, G. (2009). Aplicación de la teoría de difusión lineal extendida en el modelamiento del flujo de neutrones térmicos en una placa plana. *Memorias en extenso XX Congreso Anual Sociedad Nuclear Mexicana*, Puerto Vallarta, Jalisco, México.

Gray, W.G. (1975). A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chem. Engng. Sci.*, Vol. 30, 229-233.

Gray, W.G. y Lee, P.C.Y.(1977). On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *Int. J. Multiphase Flow*, Vol. 3, 333-340.

Hilfer, R., 2000. *Applications of fractional calculus in physics*. World Scientific, Sigapore.

Howes, F. A., y Whitaker, S., (1985), The spatial averaging theorem revisited, *Chem. Engng. Sci.* 40, 1387.

Joo, H.K., Kim,Y.J., y Kim, M.H.(2000). Potential of Thorium-Based Oxide Fuel in PWRs to Reduce Plutonium. ANS Transactions, Winter Meeting Washington D. C., November 12-16.

Kadafar, Ch., B., 1976. On propagation speed of heat in materials without memory. *Int. J. Eng. Sci.* 14, 1161-1164.

Kaminski, W., 1990. Hyperbolic heat conduction for materials with a nonhomogeneous inner structure. *ASME Journal of Heat Transfer* 112, 555-560.

Kilbas, A.A., Srivastava, H.M., y Trujillo, J.J., 2006. Theory and applications of fractional differential equations. Begell House, Connecticut.

Lahey, R.T., y Drew, D.A., (1989). The three-dimensional time and volume averaged conservation equations of two-phase flow. *Adv. Nucl. Sci. Technology*, Vol. 20, 1-69.

Lamarsh, J.R., y Baratta, A.J.(2001). *Introduction to Nuclear Engineering*, Prentice Hall, USA.

Lawrence, R.D., (1986), Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. *Prog. Nucl. Energy* 17 (2), 217.

Lee, C.H., Kim, Y.J., Song, J.W., y Park, C.O., (1996), Incorporation of a new spectral history correction method into local power reconstruction for nodal methods. *Nuc. Sci. Eng.* 124.

Lee, C.E. (1962). "The Discrete SN Approximation to Transport Theory", LA-2595.

Lenzy, E.K., Mendes, R.S., Andrade J.S., da Silva L.R., y Lucena, L.(2005). \mathcal{N} -dimensional fractional diffusion equation and Green function approach: Spatially dependent diffusion coefficient and external force. *Phys. Rev. E.* 71, 052101 (4 pp).

Lillington, J.(2004). *The Future of Nuclear Energy*, Elsevier Ltd., UK.

Luikov, A.V.(1966). Application of irreversible thermodynamics methods to investigation of heat and mass transfer. *Int. J. Heat Mass transfer* 9, 138-152.

Magin, R.L.; 2006. *Fractional calculus in bioengineering*. Begell House, Connecticut.

Mainardi, F., y Pagnini, G., 2003. The Wright functions as solutions of the time-fractional diffusion equation. *Applied Mathematics and Computation*, 141, 51-62.

Marle, C.M. (1967). Écoulements monophasique en milieu poreux. *Rev. Inst. Francais du Pétrole* 22, 1471.

McKinley, M.S., y Rahnema, F., (2000). Higher-order boundary condition perturbation theory for the diffusion approximation. *Nucl. Sci. Eng.* 135, 15.

MCNPX User's Manual, Version 2.4.0 (September, 2002). Monte Carlo N-Particle Transport Code System for Multiparticle and High Energy Applications. LA-CP-02-408.

McReady, J.M.(2004).Global Climate Change Course Notes, University of Notre Dame, Spring Semester.

Metzler, R., y Klafter, J., 2000. Boundary value problems for fractional diffusion equations. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 278, 107-125.

Miller, K.S., y Ross, B., 1993. *An introduction to the fractional integrals and derivatives: Theory and applications*. Wiley, New York.

Mori, M., y Kawamura, M.(1995). CASMO-4/SIMULATE-3 benchmarking against high plutonium content pressurized water reactor mixed-oxide fuel critical experiment. *Nucl. Sci. Eng.* 121, 41.

Nordling, L. (2010). *Nature*, Pebble-bed nuclear reactor gets pulled. Volume 463, 1008-1009.

Nec, Y., y Nepomnyashchy, A.A. (2007). Turing instability in sub-diffusive reaction-diffusion system. *J. Phys. A: Math. Theor.* 40, 14687-14702.

Núñez-Carrera, A., Francois J.L. y Espinosa-Paredes, G.(2004). Comparison between HELIOS critical-depletion calculations and a PWR thorium cell burnup benchmark, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 31, 713-722.

Núñez-Carrera, A.(2004). Diseño de un sistema energético de bajo impacto ambiental, alto rendimiento de combustible y alta seguridad basado en el ciclo del torio. Tesis de Doctorado, Facultad de Ingeniería, UNAM, México, D.F.

Núñez-Carrera, A., Francois, J.L., Martín-del-Campo, C. y Espinosa-Paredes, G.(2005). Design of boiling water reactor core based on an integrated blanket-seed thorium-uranium concept, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 32, 558-571.

Oldham, K.B., y Spanier, J. (1974). *The fractional calculus*. Academic Press.

Ozisik, M.N., y Tzou, D.Y.(1994). On the wave theory in heat conduction. *ASME Journal of Heat Transfer* 116, 526-535.

Palacios Guevara N., Gómez Arrieta, R., Vázquez-Rodríguez, R., y Espinosa-Paredes, G. (2009). Evaluación económica de la aplicación de la potencia nuclear, fósil y biomasa para desalar agua de mar en el caso de México. *Memorias in extenso XX Congreso Anual Sociedad Nuclear Mexicana*, Puerto Vallarta, Jalisco, México.

Peng C.-K., Buldyrev S.V., Havlin S., Simons M., Stanley H.E., y Goldberger A.L.(1994). Mosaic organization of DNA nucleotides. *Phys. Rev. E* 49, 1685-1689.

Podlubny, I.(1999). *Fractional differential equations*. Academic, New York.

Procopio López, A. y Morales Sandoval, J.B.(2005). A methodology for the coupling of RAMONA-3B neutron kinetics and TRAC-BF1 thermal-hydraulics, *Annals of Nuclear Energy*, 32, 621-634.

Quintard, M., y Whitaker, S., (1990), Two-phase flow in heterogeneous porous media I: the influence of large spatial and temporal gradients. *Transport in Porous Media* 5, 341.

Quintar, M., y Whitaker, S.(1988). Two-phase flow in Heterogeneous Porous Media: The method of large-scale averaging. *Transport in Porous Media*, Vol. 3, 357-413.

Rahnema, F., y McKinley, M.S., (2002), Higher-order cross-section homogenization method. *Annals of Nuclear Energy* 29, 875.

Rahnema, F., y Nichita, E.M., (1997), Leakage corrected spatial (assembly) homogenization technique. *Annals of Nuclear Energy* 24, 477.

Rahnema, F., (1989), Boundary condition perturbation theory for use in spatial homogenization methods. *Nucl. Sci. Eng.* 102, 183.

Sadler, S.I., y Dhaler, J.S.(1964). Nonstationary diffusion. *Phys. Fluids* 2, 1743-1746.

Samko, S.G., Kilbas, A.A., y Marichev, O.I.(1993). *Fractional integrals and derivatives: Theory and applications*. Gordon and Breach, Linghorne, PA.

Sanchez, R. (2009). Review. Assembly homogenization techniques for core calculations. *Progress in Nuclear Energy*. **51**, p.14-31.

Schneider, W.R., y Wyss, W.(1989). Fractional diffusion and wave equations. *Journal of Mathematical Physics*. **30**, 134- 144.

Sha, W.T. y Chao, B.T.(1981). Local volume-averaged transport equations for single-phase flow in regions containing fixed, dispersed heat generation (or absorbing) solids. NUREG/CR-1969, ANL-80-124.

Sieniutycz, S.(1979). The wave equation for simultaneous heat and mass transfer in moving media-structure testing, time-space transformations and variational approach. *Int. J. Heat Mass Transfer* 22, 585-599.

Slattery, J. C.(1972). *Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua*, McGraw-Hill, New York.

Slattery, J.C., (1967), Flow of viscoelastic fluids through porous media. *A.I.Ch.E. J.*, 13, 1066.

Smith, K.S., (1994), Practical and efficient iterative method for LWR fuel assembly homogenization. *Trans. Am. Nucl. Soc.* 71, 238.

Smith, K.S., (1986), Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis. *Prog. Nucl. Energy* 17 (3), 303.

Stacey, W.M.(2004). *Nuclear Reactor Physics*, Wiley-VCH.

Stephen, J. y MacDonald, P.E (INEEL/LMIT). (2000). Advanced Lower-Cost, Proliferation-Resistant, Uranium-Thorium Dioxide Fuels for LWR's. ANS Transactions, Winter Meeting Washington D. C., November 12-16.

Todreas, N. E., y Kazimi, M. S., 1990a. Nuclear System II: Elements of Thermal Hydraulic Design. Hemisphere Publishing Corporation, USA.

Todreas, N. E., y Kazimi, M. S., 1990b. Nuclear System I: Thermal Fundamentals. Hemisphere Publishing Corporation, USA.

Valencia-López, J., Espinosa-Paredes, G. y Ochoa-Tapia, J. A.(2003). Mass transfer jump condition at the boundary between a porous medium and homogeneous fluid. *Journal of Porous Media*, Vol. 6, p.33-49.

Vázquez-Rodríguez, R., Espinosa-Paredes, G., Morales-Sandoval, J.B., Vázquez-Rodríguez, A., y Espinosa-Martínez, E.-G. (2009a). Averaging the Neutron Diffusion Equation, *Progress in Nuclear Energy*, **51 (3)**, p. 474-484.

Vázquez-Rodríguez, R., Vázquez-Rodríguez, A., y G. Espinosa-Paredes. (2009b). Teoría de difusión de neutrones lineal extendida para medios homogéneos semi-infinitos. *Memorias in extenso XX Congreso Anual Sociedad Nuclear Mexicana*, Puerto Vallarta, Jalisco, México.

Vázquez-Rodríguez, R., Espinosa-Paredes, G., y Morales-Sandoval, J.B. (2008). Averaging the Neutron Diffusion Equation, *Memorias in extenso XIX Congreso Anual Sociedad Nuclear Mexicana*, Mérida, Yucatán, México.

Vernotte, P., 1958. Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur. *Compte Rendus*. 246, 3154-3155.

Wallace, P.R., y LeCaine J., 1946. Elementary Approximations in the Theory on Neutron Diffusion. National Research Council of Canada, NRC No. 1480-MT-12; AECL-336.

Whitaker, S. (1999). *The method of volume averaging*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands.

Whitaker, S., (1967). Diffusion and dispersion in porous media. *A.I.Ch.E. J.*, 13, 420.

Zanotti, F., y Carbonell, R.G.(1984). Development of transport equations for multiphase systems-III. *Chemical Engineering Science*, 39, No. 2.