

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA ENERGIA – SISTEMAS ENERGETICOS

ANALISIS ASISTIDO POR CODIGOS DE MALLA FINA DE POSIBLES VIBRACIONES INDUCIDAS POR FLUJO EN COMPONENTES PRINCIPALES DE UN HPLWR

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA: Emilio Martínez Camacho

TUTOR PRINCIPAL Jaime B. Morales Sandoval, Facultad de Ingeniería COMITÉ TUTOR Augusto Hernández Solis, SCK-CEN Carlos Chávez Mercado, Facultad de Ingeniería William Vicente Rodríguez, Instituto de Ingeniería

Ciudad de México, Febrero, 2021



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

Presidente:	Dr. Francois Lacouture Juan Luis
Secretario:	Dr. Vicente y Rodríguez William
1 er. Vocal:	Dr. Morales Sandoval Jaime Baltazar
2 do. Vocal:	Dr. Ceceñas Falcón Miguel
3 er. Vocal:	Dr. Valle Hernández Julio

Facultad de Ingeniería, UNAM.

TUTOR DE TESIS:

NOMBRE Dr. Jaime Baltazar Morales Sandoval

FIRMA

<u>(Segunda hoja)</u>

Agradecimientos

A: Dr. Jaime B. Morales, Dr. Juan Luis Francois, Dr. Augusto Hernández, Dr. José Manuel Gallardo, M.I. Raymundo A. Sánchez Dr. Victor Sánchez y al Dr. Michael Böttcher por su apoyo y asesoría durante este trabajo.

Al Centro Mexicano de Innovación en Energía Oceánica (CEMIE-O) en especial al Dr. Rodolfo Silva y al M.I. Gustavo I. Cadena.

A la Universidad Nacional Autónoma de México.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Lista de símbolos

α	Fracción de vacío.		
Γ	Tasa de transferencia de masa en la		
	interfaz.		
8	Disipación de energía cinética.		
μ	Viscosidad dinámica.		
ρ	Densidad.		
ω	Razón específica de disipación.		
С	Conductividad térmica.		
Ср	Capacidad térmica a presión		
	constante.		
Cv	Capacidad térmica a volumen		
	constante.		
h	Entalpía.		
k	Energía cinética turbulenta.		
Q	Tasa de transferencia de calor.		
S	Entropía.		
u	Velocidad en la dirección X.		
v	Velocidad en la dirección Y.		
w	Velocidad en la dirección Z.		
Y+	Distancia adimensional a la pared.		

Lista de acrónimos

BWR	Reactor de agua en ebullición.		
CANDU	Reactor de agua pesada canadiense.		
CFD	Dinámica de fluidos computacional.		
ESBWR	Reactor de agua en ebullición económico y simplificado.		
HPLWR	Reactor de agua ligera de alto desempeño.		
IAEA	Agencia Internacional de Energía Atómica.		
LOCA	Accidente de pérdida de refrigerante.		
NIST	Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (Estados Unidos).		
NRC	Comisión Reguladora Nuclear (Estados Unidos).		
RANS	Navier Stokes bajo Reynolds promedio.		
SCW	Agua supercrítica.		
SCWR	Reactor de agua supercrítica.		
SRV	Válvula de seguridad (alivio de presión).		
TRAC	Código de análisis de (sistema) transitorios.		

TRACE	Código de análisis de (sistema)		
	transitorios de la Agencia Reguladora		
	Nuclear de los Estados Unidos.		
TRACG	Código de análisis de (sistema)		
	transitorios de General Electric.		

Resumen

Este trabajo busca determinar las capacidades de códigos de malla fina y malla gruesa para predecir vibraciones inducidas por flujo en componentes de un reactor nuclear, concretamente el reactor de alto desempeño de agua ligera. Existen estudios actuales de vibraciones inducidas por flujo que incorporan herramientas de dinámica de fluidos y elemento finito acopladas, sin embargo, estas están hechas tanto para flujos de vapor o líquido, pero no un fluido bifásico o supercrítico. El agua supercrítica presenta cambios radicales en sus propiedades termo físicas al llegar al punto crítico, lo cual puede crear inestabilidades en el flujo cuando se aproxima a la zona de transición. Modelar este cambio es trascendental para poder estimar con precisión si se presentarán vibraciones bajo estas condiciones. Debido a la capacidad de TRAC-BF1 de modelar sistemas bifásicos con un bajo costo computacional, este trabajo concluye con la modificación de este código para el modelado de agua supercrítica; debido a su capacidad de modelar flujos bifásicos con pocos recursos de cómputo. Los resultados obtenidos muestran que TRAC tiene la capacidad de modelar sistemas que usen agua supercrítica como fluido de trabajo, esto es de gran utilidad para el modelado de centrales modernas, sobre todo en un ámbito académico.

Abstract

This work seeks to determine the capabilities of coarse and fine mesh codes to predict flow-induced vibrations in components of a nuclear power reactor, specifically the high-performance light-water reactor. There are current studies of flow-induced vibrations that incorporate coupled finite element and computational fluid dynamics tools; however, these are made for both vapor or liquid flows, but not a two-phase flow or a supercritical fluid flow. Supercritical water shows radical changes in its thermo-physical properties upon reaching the critical point, which can create instabilities in the flow as it approaches the transition zone. Modeling this change is critical to accurately estimate whether vibrations will occur under these conditions. Due to the ability of TRAC-BF1 to model two-phase systems with a low computational cost, this work concludes with the modification of this code for the modeling of supercritical water due to its ability to model two-phase flows with few computing resources. The results obtained show that TRAC has the ability to model systems that use supercritical water as a working fluid, this is very useful for modeling modern power plants, especially in an academic setting.

Indice

1. Introducción	4
1.2 Referencias:	11
2. Descripción del HPLWR	13
2.1 Descripción del flujo dentro del núcleo del HPLWR	13
2.2 Zonas del núcleo más susceptibles a vibraciones	20
2.3 Referencias:	22
3. Propiedades termofísicas del agua supercrítica	23
3.1 Referencias:	30
4. Modelado CFD	31
4.1 Selección de simulación de T's para las válvulas de alivio	32
4.2 Modelos de turbulencia	33
4.3 Modelos realizados	39
4.4 Acoplamiento de frontera (sólido – líquido)	45
4.5 Modelado CFD en estancia de investigación en el KIT (Karlsruher Insitutut für	
Technologie)	46
4.6 Referencias:	62
5. TRAC-BF1 y TRAC-U:	63
5.1 Modelado dinámico de dos fases en TRAC-BF1	64
5.2 Verificación de oscilaciones en TRAC-BF1	68
5.3 Funcionamiento original de TRAC-BF1	69
5.4 Diseño para la modificación de TRAC-BF1 a TRAC-U	70
5.5 Modelado a través de polinomios	71
5.6 Tabulación	76
5.7 Modelos hiperbólicos	77
5.8 Referencias	88
6. Modelos y resultados	89
6.1 Modelo SCW TRAC-BF1	89
6.2 Modelo de núcleo HPLWR	91
6.3 Validación con datos experimentales	97
6.4 Referencias	104
7. Conclusiones	105
Apéndice A	108

1. Introducción

La demanda de electricidad en el mundo hace que la industria energética busque métodos de generación más eficientes, el sistema eléctrico mundial se basa en plantas que utilizan vapor como medio de transferencia de energía térmica a energía mecánica. Más allá de las aplicaciones para generar electricidad, el agua supercrítica permite varias aplicaciones que tienen que ver con la remediación ambiental y el reciclaje de materias primas, tales como: el tratamiento de residuos plásticos (Bin Bai et al., 2019), la producción de hidrógeno (A.B.A. Ibrahimet al., 2019), la sintetización de biocombustibles (Jianxin Lia et al., 2018).

En el campo nuclear, el agua supercrítica se ha propuesto como refrigerante-moderador para uno de los sistemas de la llamada Generación IV, los reactores de agua supercrítica (SCWR) tendrían la capacidad de generar electricidad de forma más eficiente que los reactores actuales, aprovechando el conocimiento y la experiencia que más de sesenta años de operación y desarrollo de los reactores de agua ligera en ebullición han dejando en el ramo nuclear y la operación de varias decenas de centrales termoeléctricas que usan como fluido de trabajo el agua en condiciones supercríticas. Sin embargo, los SCWR plantean desafíos propios, principalmente por su impacto en materiales y en las reacciones nucleares, así como las ondas causadas por cambios en la densidad en la transición a un fluido supercrítico (Y. Li et al., 2014).

El reactor de agua supercrítica europeo, conocido como HPLWR (REF.) está diseñado con tres etapas de calentamiento, por lo cual el agua debe cambiar de dirección tres veces antes de salir del núcleo del reactor. Lo complejo de este sistema de calentamiento hace que un análisis de vibraciones a los componentes del núcleo sea oportuno en su etapa de diseño. Aunado a los cambios de trayectoria, el cambio abrupto de las propiedades del agua, una vez que se ha pasado el punto crítico, puede generar ondas de densidad que se desplacen a lo largo de los canales de enfriamiento de los ensambles de combustible.

Debido a la complejidad y el costo de los experimentos que se requieren para evaluar sistemas de agua supercrítica, es recomendable que cualquier desarrollo incluya simulaciones numéricas (Ortega Gómez et al., 2008). Para lograr esta tarea, los códigos de mejor estimación

son elementales para obtener aproximaciones de cómo se comportan los sistemas durante condiciones nominales, anticipadas y postuladas de accidente. Para lograrlo se han realizado esfuerzos para ampliar el rango de operación de los códigos utilizados en la industria nuclear (W. Jäger et al., 2011). Otras opciones como el CFD son viables, pero a pequeñas escalas de tiempo y/o espaciales ya que la definición de modelos de este tipo requiere una gran cantidad de recursos informáticos (Wank A. et al ., 2010).

El estudio de vibraciones inducidas por flujo, requiere de una buena comprensión de las condiciones de flujo que prevalecen dentro de los componentes en las centrales nucleares. Debido a la naturaleza de cada uno de los procesos seguidos dentro de cada tipo de reactor, las condiciones de flujo pueden ser muy distintas en componentes correspondientes. Como ejemplo de esto se tiene a los reactores de agua ligera a presión (PWR, por sus siglas en inglés), y los reactores de agua pesada a presión, CANDU, en los cuales solamente se tiene flujo monofásico, sin embargo, en los reactores de agua en ebulición (BWR, por sus siglas en inglés) se tienen flujos bifásicos, lo cual complica considerablemente el análisis de vibraciones.

Dentro de los componentes más críticos para la predicción de vibraciones en los reactores BWR, los generadores de vapor son de los más complejos, debido a que dentro de ellos existen distintas condiciones de flujo. Visto desde el lado de la cubierta, los tubos están expuestos a flujo de líquido cruzado en la zona del precalentador y en la entrada del agua de recirculación. Dentro de los límites de la tubería, el flujo del lado de la cubierta es mayormente axial. Si el generador de vapor es visto de forma vertical, el flujo en la base es meramente líquido, no obstante esta condición cambia conforme el flujo va subiendo dentro del equipo, convirtiéndose en un flujo bifásico al llegar la la región del doblez en forma de U en la parte superior del generador, donde la calidad del vapor alcanza 15-25% o incluso más en algunos diseños.

El vapor producido por los generadores de vapor viaja a través de tuberías a gran velocidad y alta presión hasta llegar a la turbina y eventualmente al condensador, el cual trabaja a condiciones de presión subatmosféricas. El condensador es a grandes rasgos un enorme intercambiador de calor, cuyos tubos están expuestos a flujo cruzado de vapor a alta velocidad. Existen otros intercambiadores de calor y partes internas del reactor que están expuestas a flujo cruzado, particularmente en las entradas y las salidas donde la velocidad es muy alta.

Visto desde la perspectiva de las vibraciones inducidas por flujo, los componentes de los reactores nucleares HPLWR son esencialmente estructuras cilíndricas (tuberías o canales de

combustible) así como estructuras con arreglos cilíndricos o mallas tubulares (ensambles de combustible, arreglos de tuberías), ambos tipos de estructuras pueden estar expuestas a flujo axial o cruzado, y éste puede ser interno o externo a los cilindros. Además se presenta dentro de anillos estrechos o en arreglos cilíndricos cerrados.

En conclusión, es muy importante conocer la naturaleza del flujo dentro de cada componente, así como su geometría; con este conocimiento pueden identificarse las causas de la vibración inducida y la capacidad predictiva de las herramientas computacionales. Si las causas de la vibración son conocidas, entonces puede identificarse mecanismos para amortiguar la vibración experimentándolos con herramientas computacionales.

El flujo que circula a través de los componentes de un ractor crea fuerzas que varían en el tiempo, las cuales generan vibración en los componentes. Existen cuatro mecanismos básicos para la generación de vibraciones, estos mecanismos son: inestabilidad en la elasticidad del flujo (*fluid elastic inestability*), desprendimiento periódico de estela (*periodic wake shedding*), excitación de la turbulencia (*tubulence-induced excitation*) y resonancia acústica (*acoustic resonance*) (Pettigrew M.J. et al., 1998). A continuación se dará una breve descripción de cada uno de estos mecanismos.

La inestabilidad en la elasticidad del flujo se crea como resultado del acoplamiento de las fuerzas dinámicas inducidas por el flujo con estructuras rígidas en movimiento. La inestabilidad se da cuando la velocidad del flujo es tan alta que la energía absorbida por las fuerzas del fluido es más alta que la energía disipada por el amortiguamiento, lo que genera vibración de alta amplitud. La velocidad mínima de flujo a la que se presenta este fenómeno se le conoce como velocidad crítica para la inestabilidad en la elasticidad del flujo. Dado que la rigidez de las tuberías es muy alta, este problema no se presenta bajo condiciones de flujo axial, ya que en general las velocidades de flujo suelen ser muy bajas para que este fenómeno se presente. No obstante, este fenómeno es el mecanismo más importante de excitación de la vibración bajo condiciones de flujo cruzado en cualquier arreglo de tuberías o superficies cilíndricas, sin importar si el flujo es monofásico o bifásico.

El desprendimiento periódico de estela (*periodic wake shedding*) suele presentarse inmediatamente aguas abajo de estructuras sujetas a flujo cruzado, lo que genera fuerzas periódicas sobre el fluido. En caso de que la frecuencia del desprendimiento coincida con la frecuencia natural de la estructura puede presentarse resonancia, lo que consecuentemente puede llevar a la ruptura del equipo. Cuando este fenómeno se produce en una superficie cilíndrica aislada bajo flujo cruzado, también se le conoce como desprendimiento de vórtice de Von Karman. Bajo estas condiciones el fenómeno ha sido analizado desde hace varias décadas, sin embargo, cuando se presenta sobre arreglos de tuberías no ha sido tan simple su identificación.

Existe una relación directa entre la turbulencia de un flujo y la vibración que este produce al componente que lo contiene, esta es la razón por la cual la excitación de la turbulencia debe de ser controlada dentro de cualquier diseño. La generación de turbulencia se clasifica en dos tipos, se denomina como excitación de campo cercano a aquella que es generada dentro del equipo de interés, mientras que la excitación de campo lejano es aquella que se produce en equipos aguas arriba, tales como: boquillas de entrada, codos y otros elementos de tubería. La excitación de la turbulencia inducida genera fluctuaciones aleatorias de presión alrededor de los componentes, razón por la cual estos vibran. Los cambios de turbulencia deben de ser tomados en cuenta, tanto en flujos monofónicos (líquido o gas) como en flujos bifásicos. Este mecanismo es el principal generador de vibración en flujo axial. Por otro lado en casos de flujo cruzado, la excitación de la turbulencia puede causar fallas a largo plazo causadas por desgaste a través del rozamiento. En contraparte la inestabilidad en la elasticidad del flujo y el desprendimiento periódico de estela causan fallas a corto plazo.

La resonancia acústica se presenta en arreglos de tubos que son sometidos a flujo cruzado de gas. Ésta se produce cuando la frecuencia del desprendimiento de estela coincide con la frecuencia natural de la cavidad que existe entre los tubos del arreglo. La resonancia en la cavidad produce ruido acústico, lo que puede llevar a graves daños estructurales. Sin embargo la resonancia acústica también puede presentarse bajo flujo axial, tal es el caso de las líneas principales de vapor en las centrales nucleares. La resonancia acústica puede producir también pulsaciones acústicas de presión, las cuales son generadas en las bombas o por el ruido acústico que generan los elementos de tubería (válvulas). Si la frecuencia de resonancia acústica es cercana a la de la estructura, se puede dar un efecto de amplificación que cause daños por vibración (Pettigrew M.J. et al., 1998). Debido a la velocidad de propagación de una onda acústica es de vital importancia que las pulsaciones de presión que las generan sean evitadas al máximo.

Las vibraciones inducidas dependen tanto de condiciones de flujo como del elemento sólido por el cual circula el flujo. Por esta razón los análisis con códigos de malla fina deben de ser implementados en dos etapas.

Para conocer las condiciones del flujo planteado es necesario realizar un análisis de dinámica de fluidos computacional (CFD). Para poder realizar este análisis se deben de conocer las condiciones de flujo que se pretende analizar, esto es: densidad, viscosidad, temperatura, presión, velocidad así como la geometría por la cual se va a hacer circular el flujo. Una vez que esto se ha definido es necesario determinar las condiciones de frontera del sistema así como el régimen al que se encuentra (laminar o turbulento). En las primeras aproximaciones de un modelo se busca siempre la convergencia del mismo, para lo cual se busca que las condiciones sean las más simples posibles, con el fin de ahorrar recursos de cómputo. Al alcanzarse la convergencia es recomendable que éste se vaya ajustando para apegarse lo más posible al fenómeno analizado.

Para asegurar que los resultados del modelo planteado sean confiables es necesario tener siempre un punto de referencia, ya que con el fin de optimizar una simulación es posible que se pierdan elementos de precisión mientras se elabora el modelo. Las mejores referencias de validación siempre serán las que se han tomado de forma experimental, sin embargo no siempre se cuenta con datos experimentales que respalden al modelo. En estos casos es necesario recurrir a métodos analíticos de solución del modelo o a hipótesis basadas en fenómenos similares.

Con el fin de identificar posibles vibraciones en un elemento, es necesario adquirir los datos de velocidad, presión y esfuerzos del modelo de CFD para poder ingresarlos a un análisis de malla fina para cuerpos rígidos. La solución de este análisis determinará las fuerzas que actúan en el cuerpo, así como los esfuerzos a los que este elemento está sometido.

Debido a la complejidad de modelar el núcleo del HPLWR, es necesario contemplar otras herramientas que puedan predecir vibraciones. Los códigos de sistema usados por la industria nuclear tienen la capacidad de predecir el funcionamiento de nuevos sistemas y sus capacidades de respuesta ante posibles accidentes, sin embargo debido a la dimensión en su malla, y a que utilizan cálculos promedio a la entrada y salida de sus celdas, es complicado pensar en que éstos códigos puedan tener la capacidad de observar fenómenos muy locales como las variaciones de presión cerca de un elemento. No obstante, estos códigos son muy

buenos en el cálculo de las propiedades del agua, por lo que es posible que a través de ellos puedan obtenerse fenómenos de oscilaciones en densidad que a su vez se pueden traducir en vibraciones en las estructuras.

TRAC-BF1 es un código de sistema que fue liberado en el 2001 al grupo nuclear de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) para su uso educativo, por este motivo, este proyecto contempla la posibilidad de usarlo como herramienta de simulación. Debido a que TRAC-BF1 fue diseñado para modelar reactores BWR, se contempla dar a éste la capacidad de realizar cálculos con buena precisión fuera de la región para la que se desarrolló originalmente, mejorar las correlaciones existentes en el código con nueva información publicada y así como crear una serie de herramientas que permitan reducir el tiempo de su aprendizaje y uso, por medio de mejoras a la interacción con el usuario, tanto en pre-procesamiento como en post-procesamiento de los modelos. Con esto se busca probar que el código y la nueva interfaz permiten reducir considerablemente la cantidad de recursos humanos y materiales requeridos para analizar la respuesta de centrales de generación eléctrica, que utilicen el agua como fluido de trabajo en condiciones nominales o de accidente. Esto es, una herramienta versátil no solo para aplicaciones nucleares, sino para cualquier aplicación termo-hidráulica.

TRAC-BF1 es la versión previa de códigos como TRACE, la herramienta de licenciamiento oficial de la NRC (Comisión Reguladora del ramo Nuclear de los Estados Unidos), pero también es la base de TRACG, herramienta computacional para el licenciamiento que General Electric usa para el diseño de sus nuevas centrales (B.S. Shiralkar et al., 1993). Nuestro objetivo no es competir con estas herramientas, sino aprovechar la capacidad de TRAC-BF1 para modelado bifásico y de gases no condensables y convertirlo en una herramienta educativa actualizada.

Este trabajo de reporta de forma análoga a como la investigación se realizó. En el siguiente capítulo se describe el funcionamiento del HPLWR y se consideran los sitios donde se piensa que las vibraciones pueden presentarse. Posteriormente se describe el comportamiento de el agua supercrítica y sus propiedades termofísicas. En el cuarto capítulo se incluyen los modelos CFD que se hicieron a lo largo del trabajo y sus resultados, dejando paso al quinto capítulo donde se describe TRAC-BF1 y sus modificaciones para llevarlo a la región supercrítica y crear

15

la nueva versión llamada TRAC-U. El sexto capítulo recoge los resultados de las pruebas hechas a TRAC-U y por último en el séptimo capítulo se presentan las conclusiones finales del trabajo.

1.2 Referencias:

A.B.A. Ibrahim, H. Akilli. (2019). Supercritical water gasification of wastewater sludge for hydrogen production. international journal of hydrogen energy, 44 (2019), 10328-10349.

B.S. Shiralkar, Md. Alamgir and J.G.M. Andersen. (1993). Thermal hydraulic aspects of the SBWR design. Nuclear Engineering and Design, 144 (1993), 213-222.

Bin Bai, Hui Jin, Chao Fan, Changqing Cao, Wenwen Wei, Wen Cao. (2019). Experimental investigation on liquefaction of plastic waste to oil in supercritical water. Waste Management, 89 (2019), 247–253.

Jianxin Lia, Jinbo Chena, Shan Chena. (2018). Supercritical water treatment of heavy metal and arsenic metalloid- bioaccumulating-biomass. Ecotoxicology and Environmental Safety, 157 (2018), 102–110.

Ortega Gómez, T., Class, A., Lahey, R.T., Jr., Schulenberg, T., 2006, "Stability analysis of a uniformly heated channel with supercritical water", Nuclear Engineering and Design 238 (2008) 1930–1939.

Pettigrew M.J, Taylor C.E, Fisher N.J, Yetisir M, Smith B.A.W. Flow induced vibrations: recent findings and open questions. Nuclear Energy and Design Journal. 185 (1998) 249–276.

W. Jäger, V.H. Sánchez Espinoza, A. Hurtado Review and proposal for heat transfer predictions at supercritical water conditions using existing correlations and experiments. Nuclear Engineering and Design, 241 (2011), pp. 2184–2203.

Wank A, Starflinger J, Schulenberg T, Laurien E, "Mixing of cooling water in the mixing chambers of the HPLWR – High Performance Light Water Reactor", Nuclear Engineering and Design, vol. 240, pp. 3248–3258, 2010.

Y. Li, D. Lu, Y. Liu and X. Zeng, Numerical analysis on supercritical flow instabilities using APROS, *Nuclear Engineering and Design*, 277 (2014) 154–162.

2. Descripción del HPLWR

Debido a que este trabajo se basa en hacer un análisis de flujo y vibraciones inducidas por este a componentes internos del HPLWR, a continiación se describe su funcionamiento así como los componentes principales del núcleo.

2.1 Descripción del flujo dentro del núcleo del HPLWR

El HPLWR es un reactor que trabaja con agua ligera como moderador neutrónico y refrigerante del núcleo. Las condiciones nominales de diseño consideran una entrada del agua a la vasija a 280°C y después de recorrer las secciones a enfriar del núcleo sale a 500°C. Para poder lograr esto, el diseño de este reactor contempla la separación en dos circuitos dentro de la vasija, en el primero el agua asciende para enfriar a las barras de control y dirigirse como moderador por la parte central de los ensambles combustibles y otra que desciende por el *downcomer* y que se juntarán en el *lower plenum* o fondo de la vasija para ahí iniciar las tres etapas de calentamiento del agua y enfriamiento de las varillas de combustible nuclear, de esta forma se evitan regiones de muy alta temperatura en el combustible. Esto es, las tres etapas se realizan después de una inicial en la que el agua actúa como moderador.



Fig. 2.1. Modelo 3D de la vasija del reactor, las flechas azules indican la trayectoria del agua como moderador, las naranjas los pasos de agua como refrigerante (Schulenberg T et al., 2011).

Debido a que el agua circula varias veces dentro del núcleo ésta debe de cambiar de dirección en repetidas ocasiones. El agua de alimentación entra por cuatro tuberías en la parte superior de la vasija, donde se encuentran las barras de control con sus respectivas guías; este flujo se divide en dos, una tercera parte del flujo pasa a los arreglos de ensambles de combustible a moderar la reacción neutrónica, mientras que el agua restante (dos terceras partes) baja por el downcomer hacia el pleno inferior de mezclado, ahí el agua de moderación se mezcla con el resto del agua de alimentación, estabilizándose a una temperatura de 310 °C al iniciar el enfriamiento de las varillas de combustible.



Fig. 2.2. Diagrama de los tres pasos de calentamiento del refrigerante (Fischer K et al., 2009).

Una vez que se ha estabilizado la temperatura en el pleno inferior, el agua empieza su trayectoria para enfriar el núcleo, esto lo hace en contacto directo con las varillas de combustible. En una primera etapa el agua asciende por los ensambles de combustible en la región central del núcleo, posteriormente desciende por los ensambles en un anillo intermedio que rodea al centro y por último, vuelve a ascender por los ensambles en un anillo periférico donde refrigera a los ensambles exteriores. Debido a que el flujo de enfriamiento comienza en el downcomer, la primer etapa de refrigeración se hace en forma ascendente, a esta sección se le conoce como evaporador, debido a que es en esta sección donde el agua pasa de ser un líquido *supercomprimido* a líquido supercrítico. Cuando el flujo alcanza el pleno superior, debe dar un giro de 180º para bajar por el primer anillo, conocido como el supercalentador 1 (Fig. 2.3).



Fig. 2.3. Diagrama de la distribución interna del núcleo del reactor (Fischer K et al., 2009).

Debido a que en el pleno inferior se hace el primer mezclado del agua de alimentación con el agua de moderación, éste requiere de un elemento físico que separe la primer mezcla de la segunda que se hace al salir del supercalentador 1. Este elemento es una especie de toroide que recibe el agua de la salida del primer supercalentador antes de ser dirigida al supercalentador 2.

Una vez que el agua se ha mezclado al salir del supercalentador 1, ésta ingresa por los cúmulos de ensambles que forman al supercalentador 2, los cuales se encuentran en la periferia del núcleo. Esta tercera pasada de refrigeración se hace hacia arriba, terminando su paso al llegar al pleno de "vapor". Cada cúmulo de ensambles tiene piezas en la cabeza y en la base las cuales permiten la entrada y salida de agua, tanto de moderador como de refrigerante. Un detalle de la pieza que soporta al cúmulo (base) se puede ver en la figura 2.4. A diferencia de la cabeza, la base debe de tener una salida por donde el agua de moderación caiga hacia el pleno inferior, estas salidas están indicadas con flechas azules en la figura 2.5. La razón por la cual las flechas rojas tengan dos sentidos es porque el refrigerante ingresa por la base cuando los cúmulos forman parte del evaporador o bien del supercalentador 2, en el caso del supercalentador 1 el refrigerante sale por la base.



Fig. 2.4. Detalle de la base del cúmulo de ensambles de combustible (Schulenberg T et al., 2011).

El pleno de vapor es una especie de reja donde se soportan los cúmulos de ensambles de combustible, esta reja está dividida físicamente por una pared que separa a los flujos que pasan a través de ella a distintas temperaturas. Esta pared puede observarse en la figura 2.5 de color azul, su posición obliga al flujo que sale del evaporador a ir hacia los ensambles de la región del supercalentador 1 y no permite mezclado con el que sale del supercalentador 2. El pleno de vapor también tiene cuatro salidas por las cuales sale el flujo supercrítico hacia las turbinas.



Fig. 2.5. Detalle del pleno de vapor (Wank A et al., 2010).

La cabeza de los cúmulos de ensambles de combustible contienen varios elementos, ya que a través de esta sección deben pasar las cajas que sirven de guía para las barras de control; a través de estas cajas circula el agua de moderación, lo cual hace que la pieza esté expuesta a flujos con distintas temperaturas. En el caso de las cabezas de los cúmulos del supercalentador 2 se tiene agua circulando en la parte superior y por dentro de las cajas a una temperatura de 280°C, mientras que la salida del agua de refrigeración se encuentra a 500°C. Es importante recalcar que los elementos que contienen estos flujos están en contacto directo, por lo cual además de la resistencia de los flujos a alta temperatura se debe de tomar en cuenta los gradientes de temperatura a los que están sometidas estas piezas, que en este caso es del orden de 220°C, pero en condiciones transitorios pueden ser mayores.



Fig. 2.6. Detalle de las cabezas de los cúmulos o clusters (Fischer K et al., 2009).

La salida o entrada del agua en la parte superior de los cúmulos de combustible se hace por un corte de sección cuadrada llamada ventana, cada cabeza tiene cuatro ventanas (figura 2.6). En esta zona el agua calentada por el efecto de refrigeración está en contacto con los tubos y cajas de agua de moderación, por las que circula agua a 280°C, la temperatura más baja a la que se encuentra el agua dentro del núcleo.

Condiciones de operación de la central			
Datos generales			
Salida térmica del reactor	2300 M Wth		
Salida neta de la planta	1000 M We		
Eficiencia neta de la planta	43.50%		
Tipo de ciclo	Directo		
Sistema de suministro de vapor			
Flujo de vapor a condiciones nominales	1179 Kg/s		
Presión de vapor	24 MPa		
Temperatura de vapor	500 °C		
Flujo de agua de alimentación	1179 Kg/s		
Temperatura del agua de alimentación	280 °C		
Sistema de enfriamiento del reactor	•		
Flujo del refrigerante primario	1179 Kg/s		
Presión de operación del reactor	25 MPa		
Temperatura del refrigerante al ingreso del núcleo	310 °C		
Temperatura del refrigerante a la salida del núcleo	500 °C		
Incremento de temperatura promedio en el núcleo	190 °C		
Bombas de alimentación			
Número	4		
Flujo a condiciones de operación	0.45 m ³ /s		

Tabla 2.1	Datos de	operación	del HPLWR.	[1]
-----------	----------	-----------	------------	-----

2.2 Zonas del núcleo más susceptibles a vibraciones

Originalmente se planteó que la región idónea para realizar el análisis de vibraciones del HPLWR sería en la región del pleno de vapor. Esta sección contiene un flujo especialmente complejo ya que el agua sale de todos los clusters del evaporador y se mezcla mientras hace un giro de 90° al chocar con el techo del pleno, posteriormente esta agua se absorbe por los clusters del supercalentador 1, los cuales redirigen el agua hacia la segunda etapa de calentamiento con lo cual el agua completa un giro de 180° en esta sección.

La segunda sección óptima para hacer el análisis de vibraciones y la seleccionada para este trabajo son los ensambles de combustible, que en el caso del HPLWR se encuentran agrupados en clusters de 9 ensambles. Es en estos canales donde se presenta la transición de un fluido con características similares a la de un líquido, en un fluido más parecido a un gas; el salto a la región supercrítica. En la figura 2.2 se muestra un diagrama del calentamiento de 3 pasos que caracteriza a este reactor. Como se observa en la figura, mientras el reactor se encuentra en condiciones nominales de operación, la transición hacia flujo supercrítico se hace en la región central del núcleo, el evaporador. Es de esperarse que al arrancar el reactor, el salto hacia la región supercrítica se haga en diferentes zonas del reactor conforme la potencia del núcleo va aumentando. El primer salto se haría cerca de la sección final del supercalentador 1 y continuaría así hasta llegar a la región nominal de operación en el evaporador. Debido a que los clusters de combustible son idénticos estructuralmente, es pertinente desarrollar un análisis donde se modele la transición a supercrítico en un cluster.

El estudio de estos procesos durante la operación nominal o transitoria resultante de maniobras usuales o eventos esperados del HPLWR claramente requieren determinar las capacidades de las herramientas disponibles para su modelado. La representación del comportamiento del agua en condiciones bifásicas subcrítica y supercríticas, por códigos CFD y/o de sistema como los usados en la industria nuclear es indispensable partiendo del hecho que aún no se conocen con certeza las correlaciones que describen la transferencia de calor del agua supercrítica con materiales y superficies consideradas para éstos sistemas. La

magnitud de los gradientes esperados durante la operación normal y al menos los eventos transitorios esperados tampoco están acotados hasta donde se ha estudiado este sistema.

2.3 Referencias:

Schulenberg T, Starflinger J, Marsault P, Bittermann D, Maráczy C, Laurien E, Lycklama à Nijeholt J. A, Anglart H, Andreani M, Ruzickova M, Toivonen A. European supercritical water reactor. Nuclear Energy and Design Journal. 241(2011) 3505-3513.

Fischer K, Schulenberg T, Laurien E, "Design of a supercritical water-cooled reactor with a three-pass core arrangement", Nuclear Engineering and Design, vol. 239, no. 4, pp. 800–812, 2009.

Wank A, Starflinger J, Schulenberg T, Laurien E, "Mixing of cooling water in the mixing chambers of the HPLWR – High Performance Light Water Reactor", Nuclear Engineering and Design, vol. 240, pp. 3248–3258, 2010.

[1] "Página de la Agencia Internacional de Energía Atómica" <u>https://aris.iaea.org/sites/..%5CPDF%5CHP-LWR.pdf</u> (2015).

3. Propiedades termofísicas del agua supercrítica

Para poder hacer un análisis del flujo interno en un HPLWR, primero es necesario entender como se comporta el agua supercrítica. Las propiedades comunes del agua varían abruptamente cuando el punto crítico es alcanzado y sobrepasado, a lo largo de este capítulo se describirán los cambios que las propiedades tienen en esta región, así como algunos conceptos clave.

Se considera un fluido como supercrítico una vez que este se encuentra sobre la presión crítica y la temperatura crítica del mismo, a esta presión y temperatura se les conoce como punto crítico, a partir del cual no existe un cambio de fase de líquido a gas, es decir, es un punto a partir del cual no importa la temperatura a la que se encuentre un líquido, éste no puede pasar por una región donde coexista con una fase gaseosa de la misma sustancia en condiciones de equilibrio térmico. El fluido puede comportarse como líquido y transformarse en gas dada la presión y temperatura a la que se encuentre, pero no ambos comportamientos y en condiciones de equilibrio térmico o mecánico, ésto es a la misma presión. En el caso específico del agua, el punto crítico es: T_{cr} = 647.1 [K] y P_{cr} =22.064 [MPa]. A partir de este punto al aumentar la temperatura del fluido la energía contenida por el fluido se hace mayor, lo cual hace que algunas de sus propiedades y respuesta sean similares a las de un gas.



Fig 3.1. Punto crítico del agua. (Igor Pioro et al., 2011)

Cuando se sobrepasa el punto crítico, se considera que cualquier flujo permanece en una sola fase, aun cuando a partir del mismo existen cambios abruptos en sus propiedades, similar a lo que sucede en el cambio de fase líquido-vapor. Estos cambios pueden ser observados en las gráficas que se presentan a continuación.

En el punto crítico cualquier fluido muestra un pico en el valor de su calor específico, tal como puede verse en la gráfica 3.6. Se conoce como punto pseudocrítico a aquel cuya temperatura corresponda a un valor máximo del calor específico a una presión más alta que la crítica; sin embargo, en esta misma gráfica puede observarse como entre mayor sea la presión, este pico desaparece y la curva se vuelve menos abrupta en su punto máximo. Por esta razón no existen puntos pseudocríticos a partir de 35 [Mpa].



Fig 3.2. Densidad del agua en función de la presión y temperatura.



Fig. 3.3. Densidad Vs. Temperatura. (Igor Pioro et al., 2011)







Fig. 3.4. Viscosidad dinámica Vs. Temperatura. (Igor Pioro et al., 2011)



Fig. 3.6. Viscosidad cinemática Vs. Temperatura. (Igor Pioro et al., 2011)



Fig. 3.7. Calor específico Vs. Temperatura.

(Igor Pioro et al., 2011)



Fig. 3.8. Conductividad Térmica Vs. Temperatura. (Igor Pioro et al., 2011)



En condiciones supercríticas el cambio de fase le ocurre a todo el fluido, sin tener las dos fases simultáneamente y en equilibrio térmico, se tiene una única fase que combina sus propiedades de líquido a gas o viceversa dependiendo de que aumente o disminuya su temperatura. Sin embargo, al no existir el calor latente de vaporización como intercambio energético para realizar la transición entre fases, entonces la C_p y/o C_v adoptan esa función de tomar y/o ceder la energía que permite dicha transición en la respuesta del fluido. Es por ello que muchos investigadores llaman a "línea de pseudosaturación" a lo que en condiciones subcríticas se conoce como campana de saturación de la sustancia.

La densidad es similar a la del vapor, pero la C_p y C_v presentan valores muy altos y después se comportan muy similarmente al líquido conforme disminuye su temperatura, manteniendo la presión. Por otro lado, la conductividad térmica del agua supercrítica es muy baja en comparación con la del líquido en condiciones subcríticas, como puede verse en las Fig. 3.8 y 3.11, es por eso que el diseño de este tipo de centrales debe de tomar en cuenta los efectos de cambio de fase que se presentan en los reactores de agua en ebullición (BWR).



Fig 3.11. Conductividad térmica del agua en función de presión y temperatura.

Cuando el agua cambia de fase de líquido a vapor, existe un fenómeno que hace que este mecanismo sea muy útil para en enfriamiento de reactores BWR. En el cambio de fase, la temperatura del agua permanece constante, dado que el calor aplicado se utiliza como calor latente para el cambio de fase (calor latente de evaporación); la cantidad de energía que el calor latente es capaz de absorber es mucho mayor que la del calor latente por grado centígrado (o calor sencible), esto ayuda a garantizar un enfriamiento eficiente de los elementos combustibles. En el caso del agua supercrítica, esta transición con dos fases simultaneas no existe, puesto que el "cambio de fase" ocurre más abruptamente dando lugar a una línea de pseudosaturación en lugar de una campana bifásica. La temperatura sigue aumentando, pero la cantidad de calor absorbida por el agua es muy alta para pasar del punto crítico, esto es debido al enorme incremento súbito o pico que la C_p (Fig. 3.12) presenta en este punto de presión y temperatura de equilibrio térmico y mecánico. La capacidad térmica puede llegar a crecer cerca de tres órdenes de magnitud en este punto, haciendo que la cantidad de energía necesaria para sobrepasarlo sea enorme.

H2O properties from NIST tables



Fig 3.12. C_p del agua en función de presión y temperatura.

Las propiedades termo-físicas del agua supercrítica pueden dividirse en dos regiones, la región pseudo crítica y la región supercrítica. En la primera, existen todos los cambios abruptos de las propiedades, mientras que en la segunda el comportamiento se vuelve estable y fácilmente modelable.

Con el fin de poder modelar el comportamiento del agua supercrítica en códigos numéricos, es de especial interés lograr que el modelado de las propiedades se suavice dentro de la región pseudo crítica, con el fin de que el código logre converger de mejor manera.
3.1 Referencias:

Igor Pioro and Sarah Mokry. Thermophysical Properties at Critical and Supercritical Pressures, Heat Transfer - Theoretical Analysis, Experimental Investigations and Industrial Systems, Prof. Aziz Belmiloudi (Ed.), ISBN: 978-953-307-226-5, 2011

4. Modelado CFD

Las primeras simulaciones de este trabajo buscaron identificar si algunos de los CFDs considerados, COMSOL, FLUENT y OpenFoam principalmente, podrían simular pulsaciones de presión dentro de tuberías, esto con el fin de identificar frecuencias que pudieran causar vibraciones en los componentes del HPLWR. En este capítulo se detallarán conceptos sobre l dinámica de fluidos computacional y los trabajos hechos en este campo y las conclusiones de ellos.

4.1 Selección de simulación de T's para las válvulas de alivio

Para la selección de la aplicación a simular se tomaron en cuenta varios aspectos, teniendo como el principal la simpleza del modelo final. A lo largo de este trabajo se espera que los modelos adquieran complejidad de requerirse, por lo que es necesario comenzar con modelos sencillos que aporten información importante y que al mismo tiempo puedan ser realizados en computadoras personales comunes. Es por esta razón que la primer aplicación no se considera muy compleja, puesto que la "T" de las válvulas de alivio se simula a una temperatura constante y con condiciones de frontera estacionarias. Además de ser relativamente simple, a lo largo de la investigación que se ha hecho para este trabajo, se han identificado artículos donde se exponen los resultados de experimentos y modelos CFD realizados a modelos de las válvulas de alivio. Morita et al., 2014 hace un análisis mediante experimentación de los fenómenos que suceden en las cavidades de las válvulas, dejando claro que las vibraciones se presentan a efecto de pulsaciones de presión que golpean al vástago de la válvula, el cual se abre y cierra en resonancia con las pulsaciones; al mismo tiempo estas pulsaciones generan ondas de sonido que se propagan a lo largo de la tubería provocando que esta vibre. Es de esta forma que las pulsaciones de presión se vuelven un elemento crucial a ser identificado en las simulaciones CFD. Según Lim et al., 2012 es posible obtener estas oscilaciones si se utiliza un modelo de turbulencia como apoyo al CFD; en este caso en particular se utilizó un modelo DES (Detached Eddy Simulation), el cual utiliza diferentes escalas de malla para resolver la los distintos niveles de turbulencia, sin embargo este modelo es complejo de resolver y requiere de un gran poder de cómputo.



Fig. 4.1. Pulsaciones de presión obtenidas de un modelo CFD del generador de vapor de un reactor APR 1400 (Lim et al., 2012)

Debido a la experiencia previa y a la disposición de una licencia, en este trabajo se plantea que Comsol sea la herramienta primaria para resolver los modelos de dinámica de fluidos, sin embargo Comsol sólo incluye modelos RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), por esta razón se tuvo que hacer una investigación sobre las capacidades de los modelos de turbulencia basados en RANS que se incluyen en Comsol, y en base a eso identificar cuál de ellos tiene la capacidad de resolver modelos con gradientes de presión en el tiempo.

4.2 Modelos de turbulencia

La turbulencia es un fenómeno muy común en los fluidos, sus efectos existen a diferentes escalas, desde un huracán hasta una taza de café. Los flujos turbulentos son caracterizados

principalmente por inestabilidades, vorticidad, efectos espaciales (3D), disipación y tasas de mezcla. La turbulencia permanece como un gran reto tanto para científicos como ingenieros, a causa de su naturaleza irregular lo cual hace imposible una solución determinística; por esta razón persiste como un problema abierto para su mejor solución y existen distintas formas de modelarla numéricamente.



Fig. 4.2. Valor promedio y fluctuaciones de la velocidad en un flujo [1].

En un flujo turbulento, las propiedades del fluido en un punto sufren continuamente cambios de magnitud. La figura 4.2 muestra las trazas de tiempo de una propiedad de flujo típica que generalmente se obtiene en un punto dentro de un flujo turbulento. La mayor difusividad de la turbulencia causa buenas condiciones para efectuar mezclas, en consecuencia, mayores tasas de transferencia de momento, calor y masa. La mezcla turbulenta, debido al movimiento de remolinos es mucho más fuerte que el de los flujos laminares, que se debe únicamente a la acción molecular. Sin embargo, la mezcla debido a los efectos moleculares siempre está presente en un flujo turbulento, no obstante que ésta es insignificante en comparación con la mezcla turbulenta, excepto en ciertas regiones como por ejemplo cerca de una pared, donde la turbulencia es cero debido a la condición de no deslizamiento, por lo tanto, cerca de una pared, los efectos moleculares se vuelven importantes.

Un flujo turbulento es siempre tridimensional y rotacional. La turbulencia se caracteriza por la alta fluctuación de los niveles de vorticidad. Un flujo turbulento contiene una amplia gama de remolinos que interactúan entre sí. La deformación de un vórtice es un mecanismo importante en un flujo turbulento. Se produce un transporte continuo de energía desde el flujo medio hasta los remolinos grandes, desde estos remolinos grandes hasta una serie de remolinos cada vez más pequeños, lo que se denomina proceso en cascada. Los remolinos más pequeños están

influenciados por la velocidad de deformación impuesta por los remolinos grandes y se estiran continuamente. Los remolinos más pequeños disipan la energía cinética en energía térmica debido a los efectos viscosos. El tamaño de remolino más pequeño, denominado escala de Kolmogorov, disminuye al aumentar el número de Reynolds. El tamaño de remolino más grande depende de la configuración del flujo y generalmente es aproximadamente tan grande como el tamaño del dominio.

Incluso las escalas más pequeñas que ocurren en un flujo turbulento son normalmente más grandes que cualquier escala de longitud molecular. La turbulencia no es una característica de los fluidos sino de los flujos. La mayor parte de la dinámica de la turbulencia puede ser similar en todos los fluidos, ya sean gases o líquidos o, en otras palabras, independientemente de las propiedades del fluido.

Una cantidad de interés en un flujo turbulento es la distribución de energía en diferentes números de onda (o tamaños de remolino). Si κ (kappa) denota el número de onda (inversamente proporcional al tamaño del remolino) y $E(\kappa)d\kappa$ la energía cinética turbulenta entre un cambio del número de onda $d\kappa$, entonces la energía cinética de la turbulencia total k (distinga entre kappa y k) se puede dar como:

$$k = \frac{1}{2} \left(\bar{u'^2} + \bar{v'^2} + \bar{w'^2} \right) = \int_0^\infty E(\kappa) d\kappa$$

Ecuación 4.1. Energía cinética turbulenta.

Donde *u*, *v* y *w* son las componentes vectoriales promediadas de la velocidad en las tres direcciones espaciales. $E(\kappa)d\kappa$ depende de: la viscosidad molecular, relación de la disipación de la energía cinética turbulenta (ϵ), escala de longitud integral, número de onda y tasa de deformación media. Kolmogorov propuso que para flujos totalmente turbulentos se puede encontrar un tamaño intermedio de remolinos para los cuales el proceso en cascada es independiente de los detalles de la energía que contiene remolinos y de la viscosidad molecular. Este rango de remolinos se denomina sub-rango inercial.

$$E(k) = C_k \varepsilon^{2/3} \kappa^{-5/3}$$

Ecuación 4.2. Definición del sub-rango inercial.

Donde C_k es la constante de Kolmogorov.

No hay una solución general a las ecuaciones de Navier-Stokes para flujos turbulentos, es por esto que se han desarrollado diferentes formas para atacar el problema con códigos numéricos, uno de los ejemplos más comunes de este tipo de soluciones es RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), el cual calcula substituyendo cada variable, por la suma entre el promedio temporal y los componentes cambiantes promediados dependientes del tiempo (ecuaciones 4.3), en las ecuaciones instantáneas de Navier-Stokes y promediando las ecuaciones resultantes.

$$u(x, y, z, t) = \overline{u}(x, y, z) + u'(x, y, z, t)$$

 $v(x, y, z, t) = \overline{v}(x, y, z) + v'(x, y, z, t)$

 $w(x, y, z, t) = \bar{w}(x, y, z) + w'(x, y, z, t)$

 $p(x, y, z, t) = \bar{p}(x, y, z) + p'(x, y, z, t)$

Ecuaciones 4.3. Componentes espaciales de la velocidad y presión como suma de su promedio temporal y su componente oscilante o aleatoria.

De esta forma, nuevos términos resultan de las ecuaciones RANS para los términos no lineales de transporte en las ecuaciones de momento. Para explicar esto, se desarrollarán las ecuaciones de Navier-Stokes, considerando un flujo incompresible y viscosidad constante.

$$\nabla U = 0$$
$$\frac{\partial u}{\partial t} \nabla (uU) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \nabla (\mu \nabla u)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} \nabla (vU) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho} \nabla (\mu \nabla v)$$
$$\frac{\partial w}{\partial t} \nabla (wU) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \nabla (\mu \nabla w)$$

Ecuaciones 4.4. Ecuaciones de continuidad de Navier-Stokes para flujos incompresibles y de viscosidad constante.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(\phi U) = \nabla \left(\Gamma_{\phi} \nabla \phi \right) + S_{\phi}$$

Ecuación 4.5. Ecuación de transporte para una variable escalar φ .

Si se sustituyen las ecuaciones 4.3 en las ecuaciones 4.4 se obtienen las ecuaciones RANS para cada componente vectorial.

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t}\nabla(\bar{u}\bar{U}) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\nabla(\mu\nabla\bar{u}) + \left[-\frac{\partial u\bar{u}'}{\partial x} - \frac{\partial u\bar{v}'}{\partial y} - \frac{\partial u\bar{w}'}{\partial z}\right]$$

$$\frac{\partial \bar{v}}{\partial t}\nabla(\bar{v}\bar{U}) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\rho}\nabla(\mu\nabla\bar{v}) + \left[-\frac{\partial v\bar{u}}{\partial x} - \frac{\partial v\bar{v}}{\partial y} - \frac{\partial v\bar{w}}{\partial z}\right]$$

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} \nabla (\bar{w}\bar{U}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{\rho} \nabla (\mu \nabla \bar{w}) + \left[-\frac{\partial w^{\bar{i}} u'}{\partial x} - \frac{\partial w^{\bar{i}} v'}{\partial y} - \frac{\partial w^{\bar{i}} w'}{\partial z} \right]$$

Ecuaciones 4.6. Ecuaciones RANS para cada coordenada.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(\phi U) = \nabla \left(\Gamma_{\phi} \nabla \phi \right) + S_{\phi} + \left[-\frac{\partial u' \phi'}{\partial x} - \frac{\partial v' \phi'}{\partial y} - \frac{\partial w' \phi'}{\partial z} \right]$$

Ecuación 4.7. Ecuación de transporte promediada en el tiempo para una variable escalar φ .

Donde Γ_{φ} es la difusión molecular y S_{φ} es el término fuente en la ecuación de transporte.

Una vez que las ecuaciones RANS se han establecido, existe un problema de cierre en las ecuaciones, ya que se tienen más incógnitas que ecuaciones. Para solucionar este problema se han creado distintos modelos de turbulencia Anupam Dewan. (2011).

Las dos variantes más comunes que se utilizan con RANS para resolver turbulencia son los modelos k- ϵ y k- ω . En el caso del modelo k- ϵ , se agregan dos variables al sistema de ecuaciones, las cuales se denotan con k y ϵ ; siendo k la energía cinética turbulenta, mientras que ϵ es la razón de disipación de su energía cinética. Este modelo tiene la capacidad de utilizar funciones de pared, por lo que ahorra recursos de cómputo en la resolución, sin embargo no es muy confiable para resolver modelos donde existen gradientes de presión y separación de flujo. De hecho en algunas pruebas hechas con este modelo sobre la "T" no se presentó convergencia y el programa terminaba por abortar la simulación.

El modelo k- ω también agrega dos variables a la solución del sistema de ecuaciones, k sigue siendo de la misma manera la energía cinética turbulenta, mientras que ω es la razón específica de la disipación de energía cinética turbulenta. Como desventaja en comparación con el modelo k- ε , este modelo tiene problemas para converger y es muy sensible a las condiciones iniciales, por lo que en muchos casos se recomienda que en primera instancia se resuelva el modelo k- ε y se utilicen sus resultados como condiciones iniciales para un modelo k- ω . Además de esto, el modelo requiere de un buen mallado cerca de las paredes, aunque es apto para funciones de pared, es recomendable un mallado fino cerca de las mismas para

así garantizar buenos resultados. Este modelo es generalmente recomendado para resolver casos con gradientes grandes de presión y separación de flujo, el uso de funciones de pared le ayuda a ser eficiente en los recursos de cómputo. Éste es el único modelo que incluye Comsol que es susceptible para hacer análisis de flujos internos (tuberías), por lo que fue seleccionado como el modelo a utilizar para resolver el modelo [2].

4.3 Modelos realizados

Debido a que Comsol sólo cuenta con dos modelos de turbulencia, los cuales se basan en RANS, se hicieron algunas aproximaciones con ellos, sin embargo, con el modelo k- ϵ no se logró una buena convergencia y los resultados fueron desechados. A continuación se muestran los modelos realizados usando k- ω y sus resultados.

El objetivo de estos primeros modelos es el de obtener una gráfica similar a la mostrada en la figura 4.1. La geometría del modelo es en 3D, ya que el fenómeno de las pulsaciones depende de la geometría circular del tubo secundario, sin embargo se hizo un corte a lo largo del tubo para así simplificar el modelo. Para justificar esto se hizo un modelo completo en 3D y se valoró a partir de él si existiría alguna pérdida al hacer el corte. En la figura 4.3 b) se puede observar que existe un plano de simetría que divide en dos el vórtice generado dentro del secundario, lo cual indica que se puede realizar un corte a lo largo de la tubería. Las líneas que se muestran en la imagen, son de corriente y la variación de color es una escala de velocidad, con las cuales se indica que existe un estancamiento de flujo al interior de la sección secundaria de la "T".



Fig. 4.3. Vistas del modelo en 3D, la parte inferior en a) es la línea principal de vapor. En b) se observa una vista donde claramente se puede notar un plano de simetría a lo largo del secundario, el cual divide el vórtice a la mitad.

En la figura 4.4 se muestra el corte realizado, el cual tiene el plano de simetría a lo largo. Para la solución del modelo se estableció que a lo largo de este plano se tendrían condiciones de frontera tipo "symmetry", con el fin de optimizar recursos de cómputo. En la figura 4.4 b) se observa una geometría con medidas reales, las cuales fueron tomadas del artículo de Lim et al., 2012. Este caso de simulación se hizo para verificar si comparativamente se podrían eliminar nodos de la malla y tener un modelo con menor cantidad de elementos de malla, sin embargo esto no demostró nada al momento de obtener resultados debido a lo precario del modelo.



Fig. 4.4. Vistas de la geometría cortada por un plano de simetría a lo largo, en b) se muestra un modelo a escala 1 a 1.

Una vez establecida la geometría a analizar, habiendo simplificado la misma hasta donde fue posible, se comenzó a hacer un análisis sobre la sensibilidad del modelo hacia los cambios de presión. Una primera aproximación fue obligar a que la entrada no tuviera una velocidad constante, lo cual se logró haciendo que ingresara un flujo con un perfil senoidal. Con esta modificación se esperaba ver cambios de presión con la misma frecuencia que la velocidad de entrada. Para verificar esto se hicieron modelos a una sección de tubo recto, colocando puntos de prueba a lo largo del mismo, los cuales tenían separación constante.



Fig. 4.5. Variaciones de presión en un tubo recto con un perfil de velocidad senoidal a la entrada. En azul, un punto cercano a la entrada, en verde un intermedio y en rojo uno a la salida.

En la figura 4.5 se observan los cambios de presión a distintas distancias desde la entrada, la gráfica azul tiene ciclos más amplios debido a que esta se encuentra más cercana a la entrada, la cual tiene una presión definida de 1 [atm]. La línea roja está trunca ya que se encuentra cerca de la salida, y en ella se definió como condición de frontera una presión de 100 [kPa]. Como se puede ver, el modelo k-ω tiene la capacidad de responder ante cambios de presión, sin embargo éstos son a muy baja frecuencia en comparación con el fenómeno que se quiere observar. Es posible aún que los promedios hechos por RANS eliminen las fluctuaciones que se desean observar.

Una vez que se comprobaron las fluctuaciones de presión se comenzó a simular el modelo de la "T", primero haciendo un modelo a escala como el que analiza Lim et. al., 2012 el cual validaron con un modelo experimental con aire como fluido. En este caso se utilizó un tubo principal de 55 [mm] de diámetro, mientras que el secundario tiene 16 [mm] de diámetro, la longitud del secundario es de 52 [mm]; la velocidad del flujo en el tubo principal es de 5 [m/s]

y la presión a la entrada es atmosférica a temperatura ambiente. Es a partir de este modelo experimental que el artículo reporta la obtención de la gráfica de la figura 4.1.

En primeras simulaciones la presión, lejos de fluctuar caía al valor de la presión de salida y se establecía ahí. Por esta razón se decidió aumentar la distancia desde el secundario hacia la salida del modelo, sin embargo esto sólo hizo que la presión quedara en un valor intermedio entre la presión de entrada y la de salida.



Fig. 4.6. Caída de la presión al valor de la presión de salida.

Tratando de resolver este problema se hizo un análisis de los fenómenos presentes, sin tratar de reducir el tamaño de los nodos del mallado (lo cual acarrea tiempos largos de cómputo); se decidió cambiar el fluido a simular. Se eligió agua porque tiene una viscosidad mayor a la del aire, ya que el efecto del vórtice en el secundario se produce por el movimiento entre capas de fluido que se desplazan unas respecto a otras por efecto de la viscosidad. Con esto se logró tener unas pequeñas fluctuaciones en la presión, sin embargo como puede verse en la figura 4.7, las fluctuaciones tienen una magnitud muy pequeña, lo cual se debe a errores creados por el tamaño del nodo en la malla.



Fig. 4.7. Pequeñas fluctuaciones de presión con agua como fluido.

El modelo RANS evita que se presenten oscilaciones numéricas, para corroborar esto se modificó uno de los coeficientes del modelo k- ω . El modelo k- ω de Wilcox tiene coeficientes que ayudan a la convergencia de los modelos, cada coeficiente está relacionado en el modelo con distintas propiedades del flujo. Para mejorar la respuesta a la presión en el modelo estudiado, se modificó α , este coeficiente está relacionado con los esfuerzos normales τ , por lo que debe tener una respuesta directa a los cálculos de presión, ya que la presión está directamente relacionada con los esfuerzos normales. Con estas modificaciones se obtuvieron pequeñas oscilaciones, como se puede ver en la figura 4.8, las fluctuaciones aún son pequeñas en magnitud y con un periodo de 0.4 [s] aproximadamente. Sin embargo esto demuestra que el modelo k- ω tiene la capacidad de resolver modelos con fluctuaciones de presión a periodos menores a un segundo.

No se tiene una justificación física para el cambio del coeficiente α, por lo cual estos resultados no pueden ser considerados como válidos, este ejercicio simplemente buscó la capacidad de simular fluctuaciones con un modelo RANS.



Fig. 4.8. Fluctuaciones de presión con α modificada.

4.4 Acoplamiento de frontera (sólido – líquido)

Comsol, al ser una herramienta de simulación multifísica tiene la capacidad de resolver modelos donde se presentan varios fenómenos. Uno de los modelos integrados que incluye Comsol está destinado al cálculo de vibraciones inducidas por flujo. Este módulo se conoce como interacción sólido-líquido y modela un sólido de forma elástica según las propiedades del material que lo constituye y su interacción con un flujo que lo rodea. Debido a lo complejo del modelado de la interacción, el módulo usa de forma predeterminada un flujo laminar para el modelado, con lo cual se elimina cualquier complejidad de cálculo relacionada a la solución de las ecuaciones de los modelos de turbulencia. La forma en que se obtiene la vibración es en función de las fluctuaciones de sustentación y arrastre aguas abajo en el sólido. Estas fluctuaciones generan diferencias de presión que mueven al sólido en función de la elasticidad del mismo, lo cual tiende a inducir vibración en el mismo.

4.5 Modelado CFD en estancia de investigación en el KIT (Karlsruher Instiut für Technologie).

Durante la estancia de investigación se exploró la posibilidad de acoplar un código de malla fina, ANSYS-CFX con un código de sistema, TRACE. El objetivo del trabajo fue desarrollar un modelo en CFD del pleno inferior del ESBWR (Economic Simplified Boiling Water Reactor).

El ESBWR es un reactor de agua en ebullición con sistemas de control pasivo. Está diseñado como una simplificación de los reactores de agua en ebullición previos, transmitiendo su principal control de seguridad a la circulación natural. Como resultado de eso, este reactor no tiene bombas de recirculación dentro de la vasija. Para lograr eso, el ESBWR utiliza una vasija más alta que incluye una chimenea y un núcleo más corto para mejorar la recirculación natural debido a las diferencias de presión y las condiciones termofísicas del refrigerante a diferentes alturas de la vasija.

Entre sus sistemas de seguridad pasiva se encuentran los Sistemas de Enfriamiento de Contención Pasiva (PCCS) que se activan justo después de que la presión en el recipiente aumenta después de un accidente de pérdida de refrigerante (LOCA), enviando vapor a intercambiadores de calor que están sumergidos en piscinas que condensan el vapor y envían de vuelta el refrigerante al núcleo. Este sistema ayuda a que el reactor funcione durante 72 horas sin ninguna intervención del exterior.

El pleno inferior es similar a otras versiones de reactores de agua en ebullición, el agua entra por el downcomer y choca con los tubos guía de las barras de control que entran por la parte inferior de la vasija. Luego, el agua tiene que cambiar de dirección en 180 ° para entrar en estos tubos y continuar su trayectoria hacia el núcleo del reactor. El modelo desarrollado busca simular la trayectoria del flujo y las interacciones del mismo con estructuras sólidas que se encuentran dentro del pleno inferior. Debido al tamaño de la geometría, y la cantidad de estructuras involucradas, hubo que tener en cuenta algunas simplificaciones para los primeros modelos. Luego, se desarrolló un modelo de tubería única con todas las estructuras internas para obtener la pérdida de presión en su interior, esta diferencia de presión se incluyó como un límite de medio poroso en el modelo completo con el objetivo de mejorar los resultados generales.

El modelo creado para este análisis de flujo es un corte horizontal de la vasija de presión del reactor, a dos alturas diferentes. El primer modelo utilizado como aproximación es una cuarta parte de la geometría total y el corte horizontal se realiza en la placa de núcleo, por otro lado, el segundo modelo de corte horizontal se realiza justo debajo de las entradas de agua de alimentación al recipiente. La entrada de fluido en ambos modelos es parte del downcomer, una región que forma un anillo de agua entre el recipiente y alrededor de la cubierta del núcleo. La última se puede ver en la Figura 4.9 coloreada en rojo, su propósito principal es cargar el núcleo dentro de la vasija, a través de los soportes de la cubierta, una serie de estructuras planas que se sueldan a la parte inferior de las paredes de la vasija. La cubierta central no es una estructura ciega; tiene cortes que permiten que el agua fluya en dirección al centro de la vasija. Estos cortes se hacen justo debajo de la placa del núcleo como grandes ventanas que exponen los tubos de las barras de control que se encuentran debajo de la placa del núcleo en todo el interior de la vasija. Estas ventanas de la cubierta dirigen el flujo hacia la región interior, donde 256 tubos guía de las barras de control dificultan el flujo, creando diferentes trayectorias que conducen a la parte inferior de la placa del núcleo. Cada tubo guía tiene 4 orificios en la parte superior (debajo de la placa del núcleo), separados 90 ° cada uno, estos orificios permiten que el flujo ingrese a las tuberías para llevar el refrigerante al núcleo. Los tubos están montados en la parte inferior de la vasija y tienen dos funciones principales: guiar las barras de control hacia los ensambles de combustible y dejar que el agua ingrese a los canales de combustible.

Cada tubo guía de las barras de control está relacionado con cuatro ensambles de combustible, los ESBWR tienen 1132 en total, pero solo 1076 toman agua de los tubos guía de la barra de control mientras que los 56 restantes toman agua directamente del pleno inferior y no tienen ninguna barra de control relacionada a ellos.





Fig. 4.9. Modelo CAD del pleno inferior. Vasija (amarillo), cubierta del núcleo (rojo), placa del núcleo y tubos de la barra de control (azul).

El flujo en el pleno inferior del ESBWR es muy similar al de cualquier otro reactor de agua en ebullición (BWR) solo que no hay bombas internas para mejorar el impulso del flujo, en este tipo de reactor el flujo se induce solo por las diferencias termofísicas en el agua, en diferentes etapas del flujo dentro de la vasija. Como cualquier otro BWR, las barras de control se insertan desde la parte inferior de la vasija, esto crea una serie de estructuras con las que el flujo tiene que lidiar en el proceso de cambio de dirección desde el downcomer hasta el núcleo del reactor.

Para la simulación de flujo, como primer enfoque se considera que el agua ingresa con una velocidad normal desde la superficie del downcomer a 1.2 [m/s], este número se calculó a partir del flujo volumétrico y la temperatura reportada por General Electric (General Electric Electric-Hitachi, 2014). La salida del modelo se definió como una restricción de presión, 7.17 [MPa], presión de operación del núcleo en condiciones nominales.



Fig. 4.10. Vista más cercana de los orificios de salida.

Dentro de los objetivos de la estancia, se buscó mejorar habilidades en el uso de herramientas dedicadas al mallado; como consecuencia, éste se realizó con especial atención a los detalles y se probaron varios casos para determinar la sensibilidad del modelo a diferentes condiciones de discretización del dominio.

Se crearon tres modelos diferentes para este trabajo, el primero solo considera una cuarta parte de la geometría completa. La idea detrás de este modelo es que las condiciones de flujo en esta región de la vasija pueden considerarse simétricas con respecto a un eje vertical central. Este modelo es importante porque da una idea del requisito del número de celdas para un modelo de geometría completo, y si éste es factible con los recursos computacionales disponibles. Una vez que este modelo mostró que es posible un modelo completo, se construyó el segundo modelo con una escala 1:1 de la geometría completa del pleno inferior y el downcomer. Debido a consideraciones de malla, ambos modelos excluyeron las estructuras internas de los tubos guía de las barras de control, por lo que el flujo dentro de las tuberías está libre de cualquier interacción estructural. Esta consideración no es precisa, por lo que fue necesario un tercer modelo para resolver este problema. El tercer modelo consideró solo una tubería con sus estructuras internas en detalle, el objetivo de este modelo es obtener las pérdidas de presión que la barra de control dentro de la tubería puede producir al flujo. Esta diferencia de presión se calculó y luego se introdujo en el modelo completo como una condición

de medio poroso al flujo. Con esta consideración, el flujo en el modelo completo puede considerarse lo más realista posible.

El primer modelo usa solo celdas no estructuradas tanto en superficies como en volumen. La figura de mérito a seguir fue el número total de celdas, que en un primer caso no podía exceder los diez millones de celdas para el dominio completo. Las principales características de esta malla son: la geometría consta de 1399 dominios de superficie y un solo bloque tridimensional para el dominio del fluido. Para iniciar un proceso de refinamiento, la primera malla generada se ejecutó en CFX para calcular un valor Y+. Este primer valor de Y+ obtenido fue 219.83, que no está muy lejos del valor esperado de 100 (que es un buen valor típico para los modelos de turbulencia k-ɛ), pero cuando la velocidad del flujo se redujo al valor más bajo reportado, 0.376 [m/s], entonces Y+ obtuvo un valor muy bueno de 80.18. Este modelo no tomó todas las condiciones físicas dentro del pleno inferior, el objetivo principal fue obtener una primera aproximación a la malla.





Fig. 4.11. Vista general de la primera malla. Izquierda, incluidos todos los dominios. Correcto, sin planos de simetría.

En la Figura 4.11 se puede ver la geometría mallada, esta malla incluye 4 tipos de condiciones de frontera, entrada, salida, paredes y planos de simetría que se crearon en las superficies de

corte del modelo. Como otra simplificación, los volúmenes internos de la parte inferior de los tubos guía de las barras de control (región con menor diámetro) no se consideran parte del dominio del fluido, esto se debe a que el flujo en esa región puede considerarse estancado debido a la presencia de las barras de control.



Fig. 4.12 Malla volumétrica en la entrada de las tuberías. Los colores muestran el ángulo mínimo de las celdas. Derecha, zoom de la región.

Bajo las características descritas, la malla total consta de 2.078.109 celdas, lo que deja cierto margen de mejora.

La cantidad total de celdas y los valores de Y + del primer modelo mostraron que un modelo completo era factible. Para el modelo completo, se agregó una sección más grande del downcomer, como resultado de esto, también se puede simular la distribución del flujo en el downcomer para poder analizar condiciones de flujo asimétricas en el flujo de agua de alimentación.



Fig. 4.13. Vista en corte del modelo CAD de geometría completa, incluida la sección adicional del downcomer.

Como en el primer caso, este modelo constó de celdas no estructuradas en todos sus dominios, utilizando las mismas dimensiones que se utilizaron en el primer modelo. Con este ejercicio se probó que la cantidad total de celdas permite que el modelo pueda ejecutarse en una PC normal. Las principales características de esta malla fueron: 5700 dominios de superficie que crean un bloque tridimensional con 7.557.985 celdas. Después de una primera ejecución en CFX, el valor de Y + resultó en alrededor de 9000, que es bastante alto para cualquier condición de flujo.

La resolución de las condiciones de frontera para este gran modelo es algo que debe tomarse en una escala diferente en comparación con los modelos más pequeños. Como se ha dicho, el valor común de Y+ para un flujo turbulento completamente desarrollado debe estar entre 100 y 300. Para lograr esto es necesario tener capas de inflación para poder observar la capa límite, sin embargo es imposible tener estas características en un modelo tan grande.



Fig. 4.14 Malla no estructurada completa para toda la geometría.

Conseguir una buena malla para este modelo no fue una tarea fácil, lograr el objetivo de conseguir una buena convergencia y un buen valor de Y+ es un compromiso considerable. Se considera una buena malla a aquella que tiene pocas celdas con ángulos muy pequeños, los cuales crean pérdidas de información de nodo a nodo, además la escala mínima a simular cerca de la pared, definida por Y+ tiene que ser cumplida dentro de ciertos rangos, en este caso se buscó un valor de x10².

Se realizaron varios intentos utilizando diferentes herramientas disponibles en Pointwise para resolver la geometría con el menor número de celdas posibles. Como se probó, el número máximo de celdas que la computadora podría manejar es de alrededor de 20 millones, por lo que el objetivo siempre fue ese número, si una malla de prueba resultaba en un número mayor a éste, era descartada de inmediato. La computadora utilizada consta de 8 núcleos y 16 Gb de memoria RAM.

Se generó una combinación de mallas estructuradas y no estructuradas en las superficies del modelo, la selección se hizo sobre la idea del comportamiento del flujo en ciertas regiones y la complejidad de la geometría. Para la parte interior de las tuberías se utilizó una malla OH con un refinamiento de pared de acuerdo al valor de Y+ que se estableció. Para flujos turbulentos similares a este y teniendo en cuenta que la turbulencia se resolverá con un modelo k- ϵ , el valor Y + debe estar entre 100 y 300, pero esto es imposible con el tamaño de esta geometría, por lo que en su lugar se estableció un valor objetivo de 1000, esto conduce a un valor de Δ S de 0.01 [m], que es manejable en un orden de magnitud.



Fig. 4.15. Vista detallada de la parte superior de los tubos guía de las barras de control.

El software para mallar, Pointwise utiliza una herramienta para generar mallas de volumen que combinan diferentes tipos de celdas, con esta herramienta se pueden seleccionar y modificar varias opciones de configuración para mejorar la calidad de la celda. A veces, cuando se mejora un problema, como el ángulo mínimo de celda, otra característica puede verse afectada y el resultado general no es tan bueno como se desea, por esta razón, obtener una buena malla se convierte en un proceso iterativo.



Fig. 4.16. Malla final para la geometría completa, la parte superior del downcomer consta solo de celdas estructuradas.

Una región que requirió especial atención es la placa inferior, que tiene una forma cóncava y está directamente relacionada con la parte más baja de los tubos guía de las barras de control. El ángulo que crea la placa inferior con cada tubo es distinto, por lo que obtener buenos ángulos de celda para la malla de volumen en esta región requirió cierto control manual sobre cada superficie.



Fig. 4.17. Vista detallada de la parte inferior de la vasija.

Como una forma de reducir el número total de celdas y ayudar a una mejor convergencia del modelo, la parte superior del downcomer se generó con celdas estructuradas. En esta región de la geometría no hay estructuras complicadas interactuando con el flujo, por lo que una malla estructurada no fue complicada de generar.

El tercer modelo creado para este proyecto es un solo tubo con una varilla de control en su interior; la idea detrás de este modelo es simular una geometría detallada con sus estructuras internas para calcular la pérdida de presión en esta sección del flujo. Como en los otros casos, se creó un primer enfoque con dominios no estructurados completos. Luego, se agregaron capas para poder detallar la región de la capa límite con el objetivo de mejorar el valor Y + y obtener mejores resultados. Para esta sección, se utilizaron dominios estructurados, lo que garantiza que los ángulos de las celdas cerca de la pared sean lo suficientemente buenos para transferir información de capa a capa sin ninguna pérdida debido a la discretización geométrica.



Fig. 4.18. a) Vista superior de la tubería. b) Vista lateral de la entrada.

Para este modelo se generaron 3 bloques, el bloque de refinamiento para la capa límite de la barra de control y el tubo (ambos estructurados). El tercer bloque llena el espacio vacío entre los otros dos; el cual se generó como una mezcla entre celdas de volumen tetraédrico y hexaédrico.

Conseguir una buena malla volumétrica está directamente ligado a la calidad de las mallas superficiales que ensamblan el dominio del fluido, por esta razón los dominios para las entradas se crearon como mallas OH (Figura 4.18) con el fin de minimizar el número de celdas con ángulos muy agudos en la periferia. Cada malla de la superficie de la entrada es idéntica y está formada por 9 dominios individuales que se ensamblan para crear la superficie de la entrada.

El primer modelo CFD tiene como objetivo probar la malla y verificar si todos los parámetros seleccionados son compatibles con ANSYS-CFX. Las condiciones de frontera para este modelo se consideraron con los valores más bajos reportados como condiciones operativas por parte de General Electric. En las paredes se utilizó la condición de no deslizamiento, con el fin de asumir un perfil de velocidad y probar la resolución de la malla en la cercanía a la pared. Estas pruebas se realizaron en el cuarto de modelo de geometría, porque también era importante probar la memoria y las capacidades de la CPU.



Fig. 4.19. Optimización de una cuarta parte de la geometría total con una velocidad de entrada de 1.6 [m/s]

Una vez que convergió el primer CFD, se modificó la velocidad de entrada para probar el Y+, tomando el nivel alto reportado por General Electric. La Figura 4.19 muestra un gráfico de líneas de corriente que representa el flujo visto desde la entrada del modelo, como se puede ver en la escala, los valores son más altos que los reportados anteriormente, esto se debe a que este gráfico fue tomado de un modelo de prueba que utilizó el valor más alto posible para la velocidad de entrada, 1.6 [m/s].

Para la geometría completa, se crearon varios modelos CFD debido a las iteraciones de la malla. Como punto de partida para este proceso se utilizó una malla completa no estructurada con dimensiones similares al primer modelo CFD. Después de cada modificación se tuvieron en cuenta dos criterios como mejora de la malla: el valor Y+ y la convergencia del modelo. Al principio, el nivel de convergencia era bajo, por lo que se tomó como el primer objetivo a mejorar. El principal problema relacionado con la convergencia fueron las celdas con ángulos agudos, las cuales se presentan mayormente alrededor de la parte inferior de los tubos guía de las barras de control, en esta región los tubos no están tan cerrados como en la parte superior, pero los tubos verticales están vinculados con el fondo de la vasija, la cual tiene forma elíptica. Al comienzo de las iteraciones, la relación de aspecto entre celdas de las paredes y la tubería fue demasiado grande, por lo que fue necesario refinar todas las mallas de la parte inferior de las tuberías.

Al final del proceso el modelo convergió con todos los residuales menores a 1.0 e-4 en 85 iteraciones, con un valor Y+ de 168. Como se ha dicho, para este tipo de modelo tan grande se esperaba un valor Y+ de 1000 sin embargo, el modelo se ejecuta con las condiciones operativas más bajas, por lo que Y+ deja espacio para flujos más rápidos.

Una vez realizados los modelos de la geometría completa, se pasó al modelo detallado de uno de los tubos guía. Como primera aproximación a los resultados de este modelo, se ejecutó una malla no estructurada completa bajo las condiciones nominales de operación. Una visualización de líneas de corriente de este modelo se muestra en la figura 4.20. Las condiciones de frontera para este modelo se tomaron del modelo CFD anterior, con el fin de tener concordancia entre ambos.



Fig. 4.20. Líneas de corriente dentro de una tubería guía de la barra de control.

Para acoplar los dos modelos es necesario calcular los coeficientes de pérdida de carga de la tubería detallada; esto se puede hacer con la ecuación de Darcy-Weisbach (Böttcher, 2008).

$$\frac{-\delta P_f}{\delta x} = f \frac{\rho}{2} u^2$$

Ecuación 4.8. Ecuación de Darcy-Weisbach

Estos coeficientes deben agregarse al modelo completo como un modelo de pérdida de medios porosos.

En este capítulo se revisaron los trabajos de CFD hechos dentro del proyecto, en los cuales se demostró la capacidad de los códigos para poder predecir vibraciones en componentes estructurales, sin embargo el modelado hecho durante la estancia de investigación dejó patente que aunque la capacidad está, es necesario siempre tener una verificación experimental de los resultados para considerar que un modelo es realmente representativo de la realidad. Los resultados obtenidos bajo los criterios de convergencia establecidos, demuestran que numérciamente el modelo es bueno, las figuras de mérito como velocidades y presiones impuestas crean un modelo físico con una solución adecuada.

4.6 Referencias:

Anupam Dewan. (2011). Tackling Turbulent Flows in Engineering. Berlin-Heidelberg Alemania: Springer.

Böttcher. (2008). Detailed CFX-5 study of the coolant mixing within the reactor pressure vessel of a VVER-100 reactor during a non-symmetrical heat-up test. Nuclear Engineering and Design, 445-452

General Electric-Hitachi. (2014). ESBWR Design Control Document Tier 2, Chapter 1. GE-Hitachi Nuclear Energy Americas.

Lim, Sang Gyu, Kim, Tae Jun, & Kim, Han Gon (2012). CFD Simulation of Acoustic-Induced Vibration in Main Steam Line of APR1400. Proceedings of the KNS spring meeting, (pp. 1CD-ROM). Korea, Republic of: KNS.

[1] http://www.comsol.com/blogs/which-turbulence-model-should-choose-cfd-application/

[2] http://www.cfd-online.com/Wiki/Wilcox%27s_k-omega_model

5. TRAC-BF1 y TRAC-U:

En un principio este trabajo buscó simular vibraciones inducidas por flujo utilizando códigos de malla fina, sin embargo después de correr las simulaciones mostradas en el capítulo anterior, se decidió que una buena opción para realizar este tipo de análisis es a través de un código de sistema de malla gruesa. Este capítulo describe el funcionamiento y modificaciones hechas al código de sistema TRAC-BF1, para su utilización mas allá de la campana que limita las dos fases de un flujo.

TRAC-BF1 fue liberado para la UNAM para su uso en aplicaciones académicas. Este código tiene una enorme capacidad para realizar cálculos precisos de fluidos bifásicos, principalmente para reactores tipo BWR, tanto en estado permanente como transitorios; en la industria y entes reguladores se usó como herramienta de validación de diseños y soporte de análisis de seguridad. Como es usual, el código se fue actualizando en versiones nuevas y esta versión fue la más avanzada después de que decenas de instituciones de investigación y organismos reguladores de países con tecnología de centrales nucleoeléctricas e interés en este tipo de herramientas computacionales ayudaron a madurarla a las condiciones de esa versión. Actualmente, la versión de uso restringido que sigue incorporando avances en las correlaciones que describen los procesos de transferencias de momento y energía entre las fases, e incorpora el modelado de la cinética tridimensional de neutrones del reactor y otras características específicas, formalmente dejó obsoleto su uso para para análisis de licenciamiento o de mejor estimación de centrales, asimismo su interfaz con el usuario, la cual está fundamentalmente basada en archivos de datos de difícil manipulación y análisis. No obstante, este código es la base de nuevos desarrollos como TRACE soportado por la Comisión Reguladora Nuclear de los Estados Unidos (NRC) y TRAC-G que es el código que la compañía General Electric utiliza ahora para evaluar formalmente todos sus diseños de centrales tipo BWR.

Debido a la disposición de la licencia para modificar el código y que TRAC-BF1 es ahora posible de correr/ejecutar/simular modelos complejos en cualquier PC, el Comité Tutor de este proyecto durante el examen de candidatura recomendó enfocar los esfuerzos de investigación

hacia la obtención de una herramienta que permitiese el modelado numérico del fluido de trabajo en condiciones como las esperadas en los reactores HPLWR, durante su operación normal o esperada. Por lo que se recomendó utilizarlo como la base para realizar cálculos de dinámica de fluidos del reactor de interés. Sin embargo, TRAC-BF1 no tiene la capacidad de hacer cálculos precisos más allá de 17 [MPa], por lo que modificarlo era necesario.

El proceso de modificación del código es descrito a lo largo de las siguientes secciones de este capitulo. El proceso comenzó con la remoción de los límites impuestos en el código para que este convergiera más más allá de su zona original, posteriormente se hicieron polinomios para mejorar los actuales representando las propiedades del agua en todas las condiciones esperadas para los diseños actuales del HPLWR, sin embargo estos polinomios no fueron programados debido a la falta de precisión de algunos y su enorme complejidad principalmente alrededor de la línea pseudo crítica. La segunda opción fue incluir tablas de propiedades en el código e interpolar los valores, lo cual hizo que el código se volviera extremadamente lento en modelos muy sencillos y con sólo una propiedad modificada. Esto llevó a la creación de modelos hiperbólicos que fueron programados en el código y que dieron buenos resultados de cálculo.

5.1 Modelado dinámico de dos fases en TRAC-BF1

El modelo hidrodinámico empleado en los componentes de flujo unidimensional y tridimensional es una formulación de dos fluidos para flujo de dos fases en condiciones de no equilibrio térmico ni mecánico entre ellas, espacial y temporalmente. Adicionalmente, el código puede modelar la dinámica de gases no condensables como un gas ideal que intercambia momento y energía con el fluido bifásico. Las ecuaciones de conservación para la masa, energía y momento del fluido de trabajo se formulan para cada fase dando lugar a seis ecuaciones de conservación independientes para un componente cuya respuesta es fundamentalmente unidimensional. Para el flujo bifásico tridimensional del componente VESSEL, que pretende describir las condiciones del fluido en el interior de una vasija como la de los rectores nuclearees tipo BWR, se obtienen diez ecuaciones de conservación.

TRAC-BF1 también incorpora la capacidad de modelar flujos con gases no condensables (aire) asociados al vapor. Se supone que el gas no condensable se mezcla perfectamente con la fase de vapor del componente principal (agua), y se supone que los dos gases constituyen una mezcla de Gibbs-Dalton. En este caso se agrega una ecuación de conservación adicional para la masa de gas no condensable a las ecuaciones de conservación mencionadas anteriormente para la masa, la energía y el momento del fluido principal. El transporte de boro soluble se trata de manera similar, aunque no será tratado en este trabajo.

Para lograr el cierre de las ecuaciones, se debe utilizar un gran número de relaciones constitutivas. Por ejemplo, la fuerza de corte en la interfaz entre las fases del agua debe formularse en términos de las variables hidrodinámicas independientes.

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \left(\alpha_g \rho_g \bar{V_g} + \alpha_l \rho_l \bar{V_l} \right) = 0$$

Ecuación 5.1 Ecuación de masa de la mezcla.

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\alpha_g \rho_g \bar{V}_g \right) = \Gamma_g$$

Ecuación 5.2 Ecuación de masa del vapor.

$$\frac{\partial (\alpha \rho)_{NC}}{\partial t} + \nabla \cdot \left((\alpha \rho)_{NC} \bar{V}_g \right) = \Gamma_{NC}$$

Ecuación 5.3 Ecuación de masa del aire.

$$\begin{split} \frac{\partial \bar{V_g}}{\partial t} + k_{vm} \left(\frac{\rho c}{\alpha_g \rho_g} \right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{V_g} - \bar{V_l} \right) + \bar{V_g} \cdot \nabla \bar{V_g} \\ &= \frac{-f_i}{\alpha_g \rho_g} - \frac{1}{\rho_g} \nabla P - \frac{C_{wg}}{\alpha_g \rho_g} \bar{V_g} |\bar{V_g}| + \bar{g} - k_{vm} \rho \frac{c}{\alpha_g \rho_g} \bar{V_D} \cdot \nabla \left(\bar{V_g} - \bar{V_l} \right) \end{split}$$

Ecuación 5.4 Ecuación de momento del vapor.

$$\frac{\partial \bar{V}_l}{\partial t} + k_{vm} \left(\frac{\rho c}{\alpha_l \rho_l}\right) \frac{\partial}{\partial t} \left(\bar{V}_l - \bar{V}_g\right) + \bar{V}_l \cdot \nabla \bar{V}_l = \frac{-f_i}{\alpha_g \rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \nabla P - \frac{C_{wl}}{\alpha_l \rho_l} \bar{V}_l |\bar{V}_l| + \bar{l} - k_{vm} \rho \frac{c}{\alpha_l \rho_l} \bar{V}_D \cdot \nabla \left(\bar{V}_l - \bar{V}_g\right)$$

Ecuación 5.5 Ecuación de momento del líquido.

$$\frac{\partial \left(\alpha_l \rho_l e_l + \alpha_g \rho_g e_g\right)}{\partial t} + \nabla \left(\alpha_l \rho_l e_l \bar{V}_l + \alpha_g \rho_g e_g \bar{V}_g\right) = -P\nabla \left(\alpha_l \bar{V}_l + \alpha_g \bar{V}_g\right) + Q_{wg} + Q_{wl} + Q_{dg} + Q_{dl}$$

Ecuación 5.6 Ecuación de energía de la mezcla.

$$\frac{\partial (\alpha_g \rho_g e_g)}{\partial t} + \nabla . \left(\alpha_g \rho_g e_g \bar{V_g} \right) = -P \frac{\partial \alpha}{\partial t} - P \nabla . \alpha \bar{V_g} + Q_{wg} + Q_{ig} + \Gamma_g h_{sg} + Q_{dg}$$

Ecuación 5.7 Ecuación de energía del vapor.

En las ecuaciones anteriores, k_{vm} es el coeficiente de masa virtual, y los subíndices C y D se refieren a las fases continua y dispersa, respectivamente.

Se puede obtener un segundo conjunto equivalente de ecuaciones mediante la sustitución de las ecuaciones de mezcla de masa y energía líquidas por las ecuaciones de mezcla anteriores. Para el flujo unidimensional, el primer conjunto de ecuaciones diferenciales se resuelve para fracciones de vacío (α) cerca de los límites de una fase (0.0 y 1.0), mientras que el segundo conjunto se resuelve para fracciones de vacío en la región estricta de dos fases (0.001 < α

<0,999). En este caso, el vector de velocidad se reduce a un solo componente, por lo que las ecuaciones de conservación son seis.

Para el flujo tridimensional (VESSEL), el vector de velocidad se caracteriza por tres componentes, Vr, Vθ y Vz, lo que implica que se resolverá un conjunto de diez ecuaciones escalares. En el caso tridimensional, las ecuaciones de mezcla para la conservación de masa y energía siempre se resuelven independientemente de la fracción vacío.

El cierre de este sistema de ecuaciones requiere que se especifiquen las ecuaciones de estado termodinámicas para cada fase, las cuales fueron modificadas para el cálculo supercrítico; el coeficiente de corte en la interfaz (C_i), las tasas de transferencia de calor en la interfaz (Q_{ig} y Q_{il}), las tasas de transferencia de masa en la interfaz líquido-gas (Γ_g y Γ_l), y los coeficientes de corte en la pared (C_{wg} y C_{wl}). Las condiciones de salto en la interfaz también se utilizan para reducir la cantidad de incógnitas. Todas estas ecuaciones se describen a continuación.

$$\Gamma_g = -\Gamma_l$$

Ecuación 5.8 Continuidad de masa en la interfaz.

$$\Gamma_{g} = \frac{-Q_{ig} - Q_{il}}{h_{sg} - h_{sl}} Q_{ig} = \frac{h_{ig}A_{i}(T_{s} - T_{g})}{Vol} Q_{il} = \frac{h_{il}A_{i}(T_{s} - T_{l})}{Vol}$$

Ecuación 5.8 Continuidad de masa en la interfaz y sus componentes.

Las ecuaciones de campo requieren ecuaciones auxiliares o constitutivas para efectuar el cierre del sistema de ecuaciones. Se ha mencionado que se requieren ecuaciones termodinámicas de estado para cada fase, además de éstas el esfuerzo de corte de la pared para líquido y vapor, el esfuerzo de corte en la interfaz, la trasferencia de calor en la pared, la transferencia de calor en la interfaz y la velocidad de vaporización neta son necesarias.
Las transferencias de calor de pared, Q_{wg} y Q_{wl} , se calculan de manera estándar. Las áreas de superficie representan una estimación real de la superficie total de la pared humedecida por cada fase, mientras que h_{wl} y h_{wg} se basan en correlaciones de transferencia de calor de la literatura. En muchas situaciones de flujo de dos fases, las paredes están totalmente mojadas por la fase líquida, en cuyo caso la transferencia de calor de la pared al vapor es cero.

La velocidad de flasheo Γ se determina a partir de una condición de salto de energía térmica simplificada. Tanto en la ecuación de la continuidad del vapor como en la ecuación de la energía térmica del vapor, los potenciales (T_s - T_g) y (T_s - T_l) se evalúan en el nuevo nivel de tiempo, mientras que h_{ig}A_i y h_{il}A_i se evalúan en el tiempo anterior [2].

5.2 Verificación de oscilaciones en TRAC-BF1

El primer paso a dar con TRAC-BF1 estuvo relacionado con determinar su capacidad de simular oscilaciones de alta frecuencia. Para dar continuidad con los modelos de CFD, el modelo utilizado para validar esto fue el mismo, una T con una válvula de alivio acoplada (SRV), la adaptación de este modelo para TRAC consiste de 4 elementos: un componente TEE, similar a los que se utilizan en las bombas jet pero con el secundario a 90º del primario, un FILL a la entrada, un BREAK a la salida y una válvula instalada en la punta del secundario, figura 5.1.



Fig. 5.1. Esquema del modelo "T" en TRAC.

La válvula en el secundario tiene como función generar las pulsaciones de presión que genera las SRV por el efecto de abrir y cerrar parcialmente a una frecuencia muy alta. Esto se hizo ingresando una señal senoidal (figura 5.2) de presión como función de entrada al elemento VALVE.



Fig. 5.2. Izq. Señal de entrada para la válvula. Der. Señal propagada a la línea principal.

Con este modelo se comprobó que TRAC tiene la capacidad de responder a pulsaciones de presión inducidas por efectos externos dentro de un modelo, lo cual se puede ver en la parte derecha de la figura 5.2. Esta gráfica representa las variaciones de presión que existen en una de las celdas del tubo primario a causa de las fluctuaciones originadas en el secundario. Esto demuestra que TRAC-BF1 tiene la capacidad numérica de resolver modelos con cambios abruptos de presión a altas frecuencias, sin embargo, carece de capacidad para simular agua supercrítica.

5.3 Funcionamiento original de TRAC-BF1

Los rangos de operación original de TRAC-BF1 se establecieron, programaron y verificaron para representar la dinámica de fluidos de trabajo esperados durante la operación normal y esperada en transitorios y accidentes postulados para los reactores de agua en ebullición (BWR), por lo que está alejado de las condiciones de operación del HPLWR. El límite superior de cálculo es de 647 [K] para el líquido y 3000 [K] para el vapor, ambos hasta 19 [MPa]. Estos

límites están determinados por el cálculo de las propiedades de ambas fases, ya que los modelos incluidos en TRAC dejan de ser precisos a partir de 17 [MPa]. Una de las primeras tareas necesarias para poder modificar TRAC-BF1 fue identificar los límites superiores y eliminar las restricciones para que el código realice cálculos a temperaturas y presiones más altas de las programadas originalmente. Con esto, hoy TRAC en su versión modificada es capaz de calcular y converger hasta 714 [K] para la fase líquida, los límites del vapor no se tocaron en una primera versión, pero posteriormente se estableció como 3000 [K] y 45 [MPa].

5.4 Diseño para la modificación de TRAC-BF1 a TRAC-U

Como parte de un proyecto a nivel grupal, se tienen contempladas varias modificaciones a TRAC-BF1, lo cual crearía una nueva versión del código llamada TRAC-U, debido a que todas estas mejoras serían desarrolladas dentro de la UNAM. El propósito principal es investigar qué funciones pueden ser incorporadas al código para permitir el diseño, configuración, inicialización, simulación, análisis, documentación, verificación y validación de modelos de sistemas nucleares complejos, de manera que tanto la curva de aprendizaje como la de uso del código se reduzca de años a meses. Actualmente, el modelado de sistemas sencillos requiere de especialistas que han invertido años en el aprendizaje y dominio del código y su interfase de usuario. El proceso de verificar que un modelo de un sistema está correctamente especificado en un *input-deck* y que los resultados obtenidos son razonablemente correctos puede llevar meses aún para conocedores del código. Por ello se está cooperando con algunas ideas de uso inmediato al provecto de esta tesis. Entre las mejoras contempladas, se tiene pensado crear herramientas gráficas de apoyo para la creación de archivos de entrada que puedan muy probablemente ejecutarse sin conflictos y se obtenga un modelo razonablemente adecuado para el sistema que se desea simular. Se espera contar con una herramienta similar a SNAP de TRACE para poder crear modelos gráficamente omitiendo así errores humanos de escritura. Esta herramienta se está diseñando bajo la plataforma Xcos de SciLab, de forma tal que todos los archivos creados puedan ejecutarse dentro de una plataforma de código libre. Adicionalmente se están creando herramientas para revisión de resultados (post procesamiento), las cuales permiten al usuario verificar el correcto funcionamiento de un

modelo una vez que ha concluido su cálculo. El poder visualizar condiciones iniciales, parámetros de entrada y luego los resultados de manera gráfica es un gran avance en el manejo de los modelos. Esta herramienta genera gráficos de manera automática sobre las propiedades y variables que el usuario considera más importantes dentro de su caso específico. Actualmente estas herramientas también son implementadas dentro de SciLab.

5.5 Modelado a través de polinomios

La ampliación del rango de modelado de TRAC se hizo en diferentes etapas debido a que la estructura del código es compleja y se buscó que las modificaciones fueran lo más eficientes posibles, modificando la menor cantidad de programas posibles. Primero se obtuvieron tablas de propiedades termodinámicas de NIST (*National Institute of Standards and Technology*) para tener una referencia del comportamiento de las propiedades del agua, considerando los rangos esperados del HPLWR durante su operación normal y los transitorios operacionales anticipados, los cuales en principio se establecieron de forma genérica como los de los LWR, solo que posiblemente partiendo de valores alrededor de sus condiciones nominales u operación normal. La información obtenida se corroboró con resultados de TRAC-BF1 y se observó que dentro de las condiciones originales de diseño de TRAC-BF1, el comportamiento de las propiedades es exactamente el mismo, esto puede ilustrarse con la densidad en la figura 5.3.

NIST utiliza la formulación IAPWS-95, que consiste en una sola ecuación para la energía de Helmholtz en función de la temperatura y la densidad. Con esta formulación, todas las propiedades termodinámicas se pueden obtener por diferenciación y manipulación de la ecuación (Harvey H. A. 2001).



Fig. 5.3. Gráfico comparativo entre TRAC y NIST para la densidad

Una vez validados los datos de NIST con respecto a TRAC, se obtuvieron tablas a diferentes presiones en la región supercrítica. Cada tabla corresponde a un valor fijo de presión, mientras que la temperatura aumenta grado a grado desde 293 [K] hasta 823 [K]. Estas tablas fueron adecuadas para que Matlab a través de la función FIT, creara polinomios que representan el comportamiento de las propiedades. En un inicio se planteó que estos polinomios serían las funciones a implementar en TRAC-U para el cálculo de propiedades supercríticas, sin embargo, como se verá en adelante la tarea se fue haciendo más compleja y estos polinomios quedaron para ser programados en una versión mejorada de TRAC-U.



Fig. 5.4. Gráfico comparativo entre TRAC y NIST para la densidad

En la figura 5.4 las líneas en naranja y amarillo muestran como el comportamiento de la densidad fuera del rango original del código no es precisa, sin embargo lo significativo de esto es que el código logró converger fuera de sus límites originales de cálculo, lo cual dejó en claro que una versión de TRAC con el rango extendido hacia la región supercrítica es viable.



Fig. 5.5. Diagrama de flujo para la obtención de polinomios a través de Matlab.

La evaluación de los polinomios obtenidos se hizo mediante el coeficiente de determinación R^2 , el cual dio buenos resultados en la mayoría de las propiedades, sin embargo, en casos específicos como la C_p y la C_v los valores obtenidos están fuera de rango para poder ser considerados. Para la elaboración de los polinomios, la escala de temperatura fue dividida en tres regiones con una sección media que va de 621 [K] a 721 [K]. En esta sección se encuentra el punto crítico, por lo que se espera que sea aquí donde las propiedades den el salto abrupto por el cambio a supercrítico. Esta zona es la más compleja de modelar y exige un mallado más fino en esta escala de temperatura. El trazo de este mallado se debe de hacer distinto para cada propiedad para lograr un código eficiente y los resultados tienen que ser comprobados al ejecutar modelos idénticos. En este punto del trabajo pensar en un refinamiento era absurdo, dado que aún no se tenía la certeza de que la implementación en el código pudiese dar simulaciones convergidas de modelos sencillos.

En la tabla 5.1 se muestran los coeficientes de determinación por cada rango y para cada propiedad. En total se extrajeron 10 propiedades, las cuales son: densidad, volumen específico, entalpía, entropía, C_v , C_p , energía interna, velocidad del sonido, conductividad térmica y viscosidad dinámica. El polinomio que dio mejores resultados fue de grado 4 para la presión y 5 para la temperatura, con lo que se tienen 20 coeficientes por propiedad y por rango de temperatura.

 Tabla 5.1.
 Valores del coeficiente de determinación por rango de cada propiedad.



La determinación del rango intermedio, donde las propiedades tienen un cambio abrupto, se puede hacer mediante una banda de pseudosaturación, justo como lo reportan Zhou Ch. et al., 2012, ellos definen una banda alrededor de la zona de transición para así suavizar el cambio de las propiedades y evitar problemas numéricos en el cálculo.



Fig. 5.6. Banda de pseudosaturación propuesta por Zhou Ch. et al., 2012.

La idea de crear una región de pseudosaturación busca establecer una región cercana al punto crítico donde el código pueda converger aunque los resultados no sean del todo precisos. En el caso de la capacidad calorífica, tanto a volumen como presión constante, $C_v y C_p$, el salto a supercrítico es un pico en el comportamiento por lo que unos grados antes y unos después del punto crítico, el comportamiento es muy similar. Al crear esta región el pico atenúa su efecto en los criterios de convergencia del código, lo cual le permite converger numéricamente y pueda seguir corriendo e incluso pasar de supercrítico a bifásico sin mayores problemas.

Otra forma de poder sortear el problema del salto a supercrítico es suavizar el comportamiento de las propiedades a través de modelos que sigan la trayectoria principal del comportamiento, pero no tengan saltos tan abruptos que hagan que, al derivar cualquier propiedad, el resultado sea infinito.

5.6 Tabulación

Una manera simple de obtener una buena resolución en los resultados es insertar tablas de datos en el código, éstas serían las mismas obtenidas del programa de NIST que se usaron para las pruebas preliminares de modelación. Para este fin se hicieron dos subrutinas nuevas para TRAC, una de búsqueda y otra de interpolación. La idea fue que el código, en función de la temperatura y presión entrara a tablas anexadas a los códigos fuente donde encontraría los valores de las propiedades a las condiciones actuales del modelo; de no encontrar el valor exacto, el código llamaría a una subrutina de interpolación entre dos puntos para obtener el valor correcto. El set de tablas se hizo sólo para la región supercrítica, desde 22 [MPa] hasta 30 [MPa] y el rango de temperatura desde 600 [K] hasta 800 [K], con esto se tuvieron 8 tablas con 200 valores para cada propiedad.

Para probar el funcionamiento del código, se usó un input que simula un PIPE con dos BREAK a sus extremos, los cuales tienen la misma presión y ésta va cambiando en el tiempo. Los resultados mostraron un incremento del tiempo de simulación de fracciones de segundo en el código sin tablas a horas usando el código con tablas. La única versión del código que se compiló con esta modificación utilizó sólo la densidad como variable a interpolar, se cree que al aumentar el número de variables a calcular por este método el tiempo de cálculo siga aumentando e incluso vuelva inviable la simulación por efectos de capacidad de cómputo. Un análisis posterior indica que no tener los valores en línea e ir a la lectura de tablas cada vez que una celda requiere una propiedad y además interpolar, resulta en lecturas a disco que determinan los cambios observados en el consumo de CPU, lo cual es consecuencia de los tamaños de arreglos definidos originalmente en TRAC-BF1.

Un segundo problema observado para la implementación de las tablas es que TRAC calcula la derivada de algunas de las propiedades para calcular otras propiedades, esto es, usa las relaciones termodinámicas de Maxwell para componentes únicos en equilibrio, por ejemplo las variaciones de la densidad con respecto a la presión como con respecto a la temperatura son usadas para obtener la compresibilidad isotérmica o el coeficiente de expansión isentrópica. La forma en que TRAC calcula las derivadas es mediante la derivada de la función programada y no mediante los cambios de la propiedad con respecto a los cambios que tiene la variable deseada del fluido en ese momento. La razón es que el fluido generalmente está en condiciones de no equilibrio térmico y mecánico, mientras que las relaciones termodinámicas entre propiedades del fluido son válidas solo en condiciones de equilibrio. Al intentar implementar el cálculo de la derivada por medio de cambios en la propiedad, el código colapsa inmediatamente marcando un error en el cálculo de propiedades. Al verificar la diferencia entre los valores calculados, ésta es en promedio de tres órdenes de magnitud.

5.7 Modelos hiperbólicos

Después de pasar por las dos rutas antes mencionadas, se decidió crear modelos propios en base a ecuaciones hiperbólicas que describen de forma razonable el comportamiento de las propiedades que el código requiere. TRAC calcula las propiedades termodinámicas a través de dos subrutinas que a su vez llaman a funciones que complementan los cálculos. Para poder hacer una modificación transparente, garantizando que la parte numérica del código no altere en ninguna medida los cálculos, se aislaron estas subrutinas con sus respectivas funciones y se hizo un programa que simula ser TRAC el cual las llama para ejecutarlas, de esta manera

al final de cada modificación se obtienen los cálculos de todas las propiedades y se pudo modificar propiedad por propiedad.

En total se modificaron 10 programas: sigma.f cpll.f, cpvv1.f, rholiq.f, thcl.f, fprop.f, thcv.f, vscl.f, vscv.f y thermo.f de los cuales 6 son funciones que calculan 3 propiedades en 2 fases: calor específico, conductividad térmica y viscosidad dinámica. El programa thermo.f es una subrutina que calcula varias propiedades, de las cuales se amplió el rango de cálculo densidad y energía interna de la fase de vapor si el fluido excede la presión supercrítica. La selección de propiedades a modificar se hizo en función de los datos obtenidos de NIST, sólo las propiedades relacionadas con la temperatura de saturación fueron dejadas sin modificación y son utilizadas en el modo supercrítico. A continuación, se describen las propiedades que se modificaron y como fueron modeladas.

Calor específico: Debido a que el cálculo original de TRAC es muy distinto al comportamiento que describen los datos de NIST, esta propiedad fue sobre escrita para las dos fases a partir de 22 [MPa]. El modelo utilizado se describe en la ecuación 5.1.

$$C_p(T) = (e - e_0 T) + \frac{\left[de^{\left(-f(T - T_0)\right)}\right]}{e^{b(T - T_0)} + e^{-b(T - T_0)}}$$

Ecuación 5.1 Calor específico a presión constante en función de la temperatura.



a)

b)

82



c)

Fig. 5.7 Cp: a) TRAC sin modificar. b) NIST. c) TRAC Modificado.

Conductividad térmica: La conductividad térmica mostró un comportamiento muy distinto en TRAC y en NIST cerca de la región de "cambio de fase" a condiciones supercríticas, por esta razón fue necesario utilizar en una sección los cálculos de TRAC original y a partir de 620 [K] y 22 [MPa] se utilizó el modelo descrito en la ecuación 5.2.

$$C(T) = e + \left[d\left(e^{-f(T-T_0)}\right)\right] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} - e^{-b(T-T_0)}}$$

Ecuación 5.2 Conductividad térmica en función de la temperatura.





c)

Fig. 5.8 Conductividad térmica: a) TRAC sin modificar. b) NIST. c) TRAC Modificado.

Viscosidad dinámica: Al igual que la Cp, la viscosidad dinámica fue sobre escrita a lo largo de todo el rango de cálculo a partir de 22 [MPa]. El modelo utilizado para el cálculo de esta propiedad se muestra en la ecuación 5.3.

$$\mu(T) = e + \left[d\left(e^{-f(T-T_0)}\right)\right] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} + e^{-b(T-T_0)}}$$







Fig. 5.9 Viscosidad dinámica: a) TRAC sin modificar. b) NIST. c) TRAC Modificado.

Dentro de la subrutina thermo.f, se hicieron cambios para la energía interna, entalpía y densidad. Esta misma subrutina calcula las derivadas de estas propiedades, sin embargo las derivadas se dejaron sin cambio, esto debido a que no existen referencias en NIST para la mayoría de las derivadas y que TRAC calcula las derivadas a través de modelos analíticos basados en experimentos a los cuales no se tiene acceso.

$$u(T) = c + mT + be^{d(T-T_0)} \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{a(T-T_0)} + e^{-a(T-T_0)}}$$

Ecuación 5.4 Energía interna en función de la temperatura.





Fig. 5.10 Energía Interna: a) TRAC sin modificar. b) NIST. c) TRAC Modificado.

Debido a la relación termodinámica que existe entre la energía interna y la entalpía, los modelos que se plantean en este trabajo son idénticos, sin embargo, los coeficientes para cada caso fueron distintos. TRAC utiliza la entalpía de saturación para el cálculo de otras propiedades, por lo que la entalpía modificada se dejó sólo como una propiedad extra para trabajo futuro.

$$h(T) = c + mT + be^{d(T-T_0)} \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{a(T-T_0)} + e^{-a(T-T_0)}}$$

Ecuación 5.5 Entalpía en función de la temperatura.

La densidad es la única propiedad que TRAC calcula en distintas subrutinas para el líquido y el vapor. En el caso del líquido, la subrutina thermo.f llama a otra subrutina, rholiq.f para obtener el valor de la densidad y sus derivadas. Para el vapor, el cálculo de la densidad se hace directamente en thermo.f, como una sección más de las propiedades que calcula esta subrutina.

$$\rho(T) = e + \left[d\left(e^{-f(T-T_0)}\right)\right] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} - e^{-b(T-T_0)}}$$

Ecuación 5.6 Densidad en función de la temperatura.





Fig. 5.11 Densidad: a) TRAC sin modificar. b) NIST. c) TRAC Modificado.

Como puede verse, todos los modelos que se crearon para calcular las propiedades en la región supercrítica son modelos hiperbólicos, esto debido a que con pequeñas diferencias se puede hacer que este tipo de ecuaciones describan un comportamiento similar al que realizan todas las propiedades al salir de la campana y entrar en la región supercrítica.

Se han presentado las capacidades de TRAC-BF1 de poder simular esquemas de alta frecuencia que puedan inducir vibraciones inducidas por flujo. Una vez determinado esto se estableció una metodología para modificar el código para sacarlo de sus límites originales de cálculo y llevarlo a la región supercrítica. Esto se hizo primero, modificando los límites de cálculo y revisando los modelos implementados en TRAC-BF1. Debido a que los modelos implementados no siguen el comportamiento de las propiedades a alta presión y temperatura,

se propusieron nuevos modelos simples de calcular que ayudaran a conservar la velocidad de cálculo del código. Estos modelos fueron implementados en el código dentro de las mismas rutinas que TRAC-BF1 usa para calcular las propiedades termofísicas, con esto realizado se creó una nueva versión de TRAC, conocida como TRAC-U, debido a su raíz universitaria. En el siguiente capítulo se analizarán los resultados de esta implementación.

5.8 Referencias

[1] Harvey H. A. 2001. Encyclopedia of Physical Science and Technology, Third Edition, Vol. 16

[2] Zhou Ch, Yang Y, Cheng X., (2012). Feasibility analysis of the modified ATHLET code for supercritical water cooled systems. Nuclear Energy and Design 250 (2012) 600–612.

[3] M. M. Giles, S. Z. Rouhani, R. W. Shumway, G. L. Singer, D. D. Taylor, W. L. Weaver. (1992). TRAC–BF1/MOD1: An Advanced Best-Estimate Computer Program for BWR Accident Analysis. Estados Unidos de América: Idaho National Engineering Laboratory.

6. Modelos y resultados

La verificación de TRAC-U se hizo con dos modelos distintos, el primero buscó revisar las condiciones de convergencia y revisar la transición entre las condiciones originales de TRAC-BF1 y TRAC-U en la región supercrítica. El segundo modelo buscó emular las condiciones de operación del núcleo del HPLWR. Ambos modelos son descritos a continuación, así como los resultados obtenidos de los mismos. Una vez que estos modelos verificaron el funcionamiento del código, se hizo una comparación con datos experimentales divulgados por la Agencia Internacional de Energía Atómica (IAEA).

6.1 Modelo SCW TRAC-BF1

Las pruebas para validar la operación del código desde sus condiciones originales hasta la región extendida de operación se realizaron con un modelo 1D. Este modelo consta de 3 componentes 1 PIPE y 2 BREAK en los extremos. La idea de este modelo es monitorear el comportamiento de TRAC-U desde su región original de operación (TRAC-BF1) hasta la región supercrítica. Para esto, cada BREAK se programó con la misma presión, la cual aumenta con el tiempo mientras la temperatura sigue la línea de saturación a través de todo el dominio del tiempo. La presión inicial es 0.1 [MPa] y la presión final 30 [MPa], la duración total del modelo es 3000 [s].



Fig. 6.1 Modelo de TRAC-U para validación del modo supercrítico.

La escala de tiempo en este modelo es análoga a la presión de tal manera que alrededor de 2200 [s] el modelo alcance el punto crítico. Como se puede ver en la figura 6.2, en torno a ese punto, la densidad de la mezcla tiene un cambio pronunciado que es el punto donde las nuevas

propiedades del código comienzan a funcionar. Se reporta la densidad de la mezcla (RHOM), pero en realidad después del punto crítico el modelo es de una sola fase.



Fig. 6.2 Densidad de la mezcla líquido-vapor.

Después del punto crítico la densidad aumenta y luego vuelve a disminuir, esto se debe a que por arriba de 17 [MPa] TRAC-BF1 no es muy preciso, lo que como resultado crea un retraso entre los modelos propuestos y los polinomios programados originalmente en TRAC-BF1. Una tarea futura para este proyecto es mejorar los modelos que usa TRAC entre 17 y 22 [MPa] para reducir el retraso entre los modelos supercríticos y la región bifásica antes del punto crítico.

Los resultados de este modelo fueron determinantes para verificar el comportamiento del código en la sección de ampliación, a partir de ellos se observó que el comportamiento de los modelos de las propiedades en estado estable permitieron que el código convergiera sin problemas en el punto crítico y más arriba de él. Sin embargo, el hecho de que el modelo siguiera la línea de saturación no garantizaba que el código funcionara bajo cualquier situación, ya que el "cambio de fase" en el punto crítico en realidad no existe en este modelo, debido a que alpha es constante a lo largo de todo el modelo.

6.2 Modelo de núcleo HPLWR

Para verificar el código en un rango más amplio de condiciones se creó un modelo que emula el núcleo del reactor de agua ligera de alto desempeño (HPLWR), cuyo diseño consta de tres etapas de calentamiento. El núcleo del reactor está dividido en 3 regiones radiales, estas regiones son grupos anulares de *clusters* de combustible. En el centro el flujo asciende por el evaporador, luego el agua fluye al sobrecalentador 1 donde baja a una subsección del pleno inferior, finalmente el agua sube por un segundo anillo que se encuentra en la periferia del núcleo, el sobrecalentador 2.

El modelo TRAC-U consta de 3 componentes PIPE que emulan cada sección del núcleo (Figura 6.3). Estos elementos interactúan térmicamente con 3 PIPE que simulan ser el agua de moderación que baja por cada región, de forma tal que el PIPE del evaporador interactúa con el pipe de moderación de la región del evaporador y lo mismo en los otros dos casos. Un diagrama de esto se puede ver en la figura 6.3, donde los colores azul, amarillo y rojo representan al evaporador, supercalentador 1 y supercalentador 2 respectivamente.



Fig. 6.3 Modelo en TRAC-U del núcleo del HPLWR.

El modelo emula las dimensiones del núcleo del HPLWR, el diámetro de la tubería es similar al diámetro hidráulico reportado en los artículos de diseño y la longitud del mismo es la altura del núcleo del reactor (K. Fischer et al., 2009). Como un parámetro de diseño, la presión se establece en 25 [MPa] y las caídas de presión están por debajo de 1 [MPa] (Wank A. et al., 2010), como resultado de esto, la diferencia de presión entre la entrada y la salida es inferior a 50 [kPa]. La temperatura en cada etapa sigue los parámetros de diseño (K. Fischer et al., 2009).

Debido a las condiciones termofísicas, el agua en la entrada es un líquido sobrecalentado, por diseño se espera que el cambio a supercrítico se de en el evaporador. Nuestro objetivo es eliminar la zona de pseudo-saturación que se reportan en otros trabajos (Chong Z. et al., 2012) y lograr un modelado continuo; aunque el cambio no sea completamente preciso. Es por esta razón que una vez que el modelo entra en la región supercrítica, el fluido es considerado como monofásico.



Fig. 6.3 Incremento en la temperatura en el evaporador.

El calentamiento en las regiones centrales del núcleo se hace mediante la interacción térmica celda a celda de los elementos que simulan ser los canales de moderación y una fuente de calor que simula ser la reacción nuclear. El efecto de calentamiento se puede observar celda

a celda conforme el flujo recorre su trayectoria, tal como se esperaría que sucediera en el núcleo del HPLWR.

Es de esperarse que la transferencia de calor dentro del fluido supercrítco no sea la adecuada, puesto que las correlaciones de transferencia de calor son las mismas que usa TRAC-BF1.

El tiempo simulado es de 48 horas, este tiempo garantiza alcanzar el estado estable del modelo ya que las condiciones cambian en el tiempo.



Fig. 6.4 Comparación del incremento de temperatura en el evaporador (componente 20), supercalentador 1 (componente 21) y supercalentador 2 (componente 22), se muestran las celdas 1, 5 y 10 de cada componente.

La densidad es de especial interés en el modelado de agua supercrítica ya que esta varía abruptamente de forma análoga a un cambio de fase. Se ha documentado que el cambio de fase en canales verticales puede llevar a oscilaciones en el flujo debido al cambio de presión hidrostática; estas oscilaciones son causantes de vibraciones y como consecuencia fatiga en los materiales.



Fig. 6.5 Comparación del cambio de densidad en el evaporador (componente 20), supercalentador 1 (componente 21) y supercalentador 2 (componente 22), se muestran las celdas 1, 5 y 10 de cada componente.

Los resultados de densidad confirman que los modelos hiperbólicos agregados al código fueron lo suficientemente buenos como para permitir que el código pase el punto crítico y muestre un comportamiento preciso. El cambio más pronunciado en la densidad se debe al salto supercrítico, y esto tiene lugar en el evaporador (componente 20). Como trabajo futuro, se puede realizar un análisis de las oscilaciones de flujo debido al cambio de densidad en esta región.



Fig. 6.6 Comparación del cambio de densidad en el evaporador (componente 20), supercalentador 1 (componente 21) y supercalentador 2 (componente 22), se muestran las celdas 1 y 10 de cada componente.

El flujo al interior de los componentes es controlado por el FILL de entrada. Por esta razón, es de esperarse que las velocidades sean constantes en el valor establecido. Como primera aproximación se utilizó un flujo estrangulado para poder observar mejor los flujos de calor entre el elemento caliente y el agua de enfriamiento del combustible. La figura 6.7 muestra una gráfica en bardas de este flujo.



Fig. 6.7 Flujo en el evaporador (componente 20), supercalentador 1 (componente 21) y supercalentador 2 (componente 22), se muestran las celdas 1 y 10 de cada componente.

6.3 Validación con datos experimentales

De acuerdo con los datos publicados en el documento IAEA TECDOC 1746 se hizo un benchmark para TRAC-U. En la sección 9 de este documento (IAEA, 2014) se establecen los parámetros para probar la termohidráulica de los códigos que la Agencia usa para simular las condiciones de SCWR. Debido a que TRAC-U en su modalidad supercrítica se encuentra en una etapa temprana de desarrollo, las pruebas se hicieron de acuerdo con el experimento CTB-1 (*Code Testing Benchmark*) "Flujo estacionario en un tubo calentado", el cual tiene como objetivo comprobar la capacidad de los códigos en la predicción de transferencia de calor contra datos experimentales. Este caso se describe en la figura 6.8



Fig. 6.8 Modelo de TRAC-U para el caso 1 del CTB-1. (Kirillov P. et al., 2005)

El experimento descrito por Kirillov P. et al. (2005) consiste en un tubo vertical con flujo ascendente a 24 [Mpa] de presión y una temperatura de entrada de 623.15 [K]. El tubo del experimento está fabricado de acero inoxidable, similar al AISI 304 con un espesor de pared de 2 [mm] y 10 [mm] de diámetro interior. Para realizar el efecto de calentamiento, se conectaron dos terminales eléctricas a la parte inferior y superior de la zona de análisis, lo cual por medio de la resistividad del material, creó una fuente uniforme de calor distribuida a lo largo de la longitud estudiada. No obstante, los resultados de los experimentos mostraron que existen pérdidas locales de calor en la zona donde se colocaron los conectores.

El modelo de TRAC-U para simular este experimento consta de un componente PIPE con 50 celdas, un FILL a la entrada y un BRAEK a la salida. Este modelo asume que el flujo de calor es uniforme a lo largo de todo el tubo.



Fig. 6.9 Distribución longitudinal de las temperaturas de pared y del fluido. La información experimentas se tomó de Kirillov P. et al. (2005).

En la figura 6.9 se puede ver que el efecto de la C_p en el proceso de calentamiento es significativo. Conforme el calor latente se vuelve cero al acercarnos al punto crítico (pseudocrítico), todo el calor suministrado se transforma en calor sensible, por esta razón cualquier discrepancia en la estimación de la C_p resulta en temperaturas muy distintas a las obtenidas del experimento. Al analizar con cuidado solamente la C_p es evidente que crear un modelo capaz de representar su comportamiento a rangos grandes de presión y temperatura, es imposible si se busca precisión en los resultados. Por esta razón es necesario dividir el dominio de la temperatura y presión en rangos más pequeños para así crear modelos locales con coeficientes específicos que logren tener una mejor precisión, los cuales no necesariamente serán hiperbólicos. No obstante esta sub división, es necesario pensar que cerca del punto crítico y de los puntos pseudo-críticos a presiones mayores a 22.1 [Mpa], será necesario utilizar información de NIST a través de tablas e interpolar entre sus valores. Al hacer un parche al código con esta modificación, los resultados mejoraron sustancialmente. Con esto se puede obtener lo mejor de todas las opciones posibles: velocidad de cálculo lejos de la región crítica y precisión cerca de ésta. Además, de esta forma se garantiza que el código puede converger a lo largo de todo el dominio sin necesidad de truncar y crear zonas con dos fases dentro de la región pseudo-crítica.

Las diferencias relativas entre la temperatura del fluido y la de pared se muestran en la figura 6.10, las cuales reportan una diferencia máxima de 10% en los bordes del tubo, esto para los modelos hiperbólicos; no obstante este valor cae prácticamente a cero una vez que se implementaron las tablas para la obtención de la C_p.



Fig. 6.10 Error en los cálculos de las temperaturas. Temperatura de pared (T wall), Temperatura del fluido con modelo hiperbólico (Tbulk Hyp) y Temperatura del fluido con tabla de valores obtenida de NIST (T bulk Table).

El coeficiente de transferencia de calor calculado dentro de TRAC-U, utiliza los mismos modelos que usa TRAC-BF1/MOD1, esta correlación corresponde a la ecuación de Dittus-Boelter:

$$h_{v} = 0.023 R e_{v}^{0.8} P r_{v}^{1/3} \frac{k_{v}}{D_{H}}$$

Ecuación 6.1 Ecuación de Dittus-Boelter implementada en TRAC-BF1 para estimar el coeficiente de transferencia de calor a partid del número de Nusselt.

Es de esperarse que se pierda precisión en el cálculo del coeficiente de transferencia de calor cerca del punto crítico cuando se utiliza la ecuación de Dittus-Boelter. Existe la posibilidad de usar el código para la implementación de distintos modelos, tal como lo propone W. Jäger et al. (2011).



Fig. 6.11 Distribución longitudinal del coeficiente de transferencia de calor.

Los resultados experimentales de Kirillov P. et al., 2005, muestran que el coeficiente de transferencia de calor tiene un pico a la entrada, con un valor de aproximadamente 28 kW/m²K. Este valor permanece estable hasta que la región pseudo crítica se termina, lo cual en términos de longitud del tubo se alcanza alrededor de 2 [m]. Los coeficientes de

transferencia de calor calculados que se muestran en la figura 6.11 muestran dos aspectos muy interesantes.

a) Antes del punto crítico, donde TRAC-U usa las correlaciones originalmente implementadas en TRAC-BF1, las cuales no están verificadas a estas presiones y temperaturas altas. Los valores calculados difieren de los datos experimentales, de forma tal que las temperaturas de pared y fluido son las mismas debido a la enorme tasa de transferencia de calor.

b) Por otro lado, una vez que la zona pseudo-crítica ha terminado y los modelos propuestos son utilizados; los resultados mejoran sustancialmente. Este efecto demuestra la importancia de mejorar los modelos originales de TRAC-BF1 más allá de 17 [MPa].

Tanto en el modelo computacional como en los experimentos, el punto crítico se alcanza a aproximadamente 1 [m] de longitud del tubo. Desde este punto hasta la salida, el coeficiente de transferencia de calor se deteriora, tal como Pioro y Duffey (2005) reportan. Como consecuencia de esto, la ecuación de Dittus-Boelter no es útil, es por esta razón que se requieren implementar nuevos modelos de transferencia de calor no sólo después de 17[MPa], sino también para la región pseudo-crítica. Una vez pasada la región pseudo-crítica el comportamiento de TRAC-U con los experimentos es muy similar.

Las pruebas hechas a las modificaciones de TRAC para llevarlo a la región supercrítica demuestran la estabilidad del cálculo y su capacidad de salir de la campana de dos fases y modelar el fluido supercrítico como una sola fase. Además, es claro que el código es capaz de seguir el comportamiento en el núcleo del HPLWR. No obstante, debido a la falta de información extra sobre el flujo en el núcleo de este reactor, fue necesario realizar pruebas al código usando como referencia datos experimentales que la IAEA utiliza para validar códigos numéricos. Bajo estas pruebas el código demostró que es necesario mejorar los modelos implementados y quizá utilizar un híbrido entre modelos y tablas de búsqueda e interpolación, debido a lo complejo del comportamiento de ciertas propiedades como la C_p. Este mejoramiento debe incluir el refinamiento de las escalas de temperatura y presión en los modelos hiperbólicos propuestos, para que los rangos no sean tan grandes y el

comportamiento se pueda aproximar mejor. Con esto los resultados podrán mejorar sustancialmente y la implementación de otras correlaciones para el coeficiente de transferencia de calor puedan ser implementadas para futuras publicaciones.

6.4 Referencias

Chong Z, Yanhua Y, Xu Ch, "Feasibility analysis of the modified ATHLET code for supercritical water cooled systems ", Nuclear Engineering and Design, vol. 250, pp. 600–612, 2012.

Fischer K, Schulenberg T, Laurien E, "Design of a supercritical water-cooled reactor with a three-pass core arrangement", Nuclear Engineering and Design, vol. 239, no. 4, pp. 800–812, 2009.

International Atomic Energy Agency., 2014. Heat Transfer Behaviour and Thermohydraulics Code T esting for Supercritical W ater Cooled Reactors (SCWR's) IAEA-TECDOC-1746. Vienna, Austria.

Kirillov P, Pomet'Ko R, Smirnov A, Grabezhnaia V, Pioro I, Duffey R, Khartabil H., 2005. Experimental Study on Heat Transfer to Supercritical Water Flowing in 1- and 4-m-Long Vertical Tubes, Proceedings of GLOBAL, Paper no. 518.

Pioro I., Duffey R., 2005. Experimental Heat Transfer to Supercritical Water Flowing Inside Channels (Survey), Nuclear Engineering and Design, 235, pp. 2407-2430.

W. Jäger, V.H. Sánchez Espinoza, A. Hurtado., 2011. Review and proposal for heat transfer predictions at supercritical water conditions using existing correlations and experiments. Nuclear Engineering and Design, 241, pp. 2184–2203.

Wank A, Starflinger J, Schulenberg T, Laurien E, "Mixing of cooling water in the mixing chambers of the HPLWR – High Performance Light Water Reactor", Nuclear Engineering and Design, vol. 240, pp. 3248–3258, 2010.
7. Conclusiones

El objetivo principal de este trabajo fue determinar la capacidad predictiva que los códigos de malla fina tales como el CFD tienen para poder predecir vibraciones de componentes estructurales en un reactor nuclear tipo HPLWR. Se logró determinar que los códigos multi física que pueden realizar este tipo de tareas son muy demandantes desde el punto de vista de los recursos de cómputo sin necesariamente ser totalmente predictivos, aunque podrían ser confirmatorios de contarse con datos experimentales. En el caso de las condiciones esperadas de operación de un HPLWR se tienen datos experimentales para agua supercrítica en condiciones estacionarias pero el software de los CFD aún no tienen esta funcionalidad y se requiere incorporarla de manera personalizada. Los estudios de vibraciones inducidas por flujo son indispensables para sustentar una fase de licenciamiento de un reactor tipo HPLWR. Para explorar los consumos de recursos y capacidades de este tipo de software se modeló la circulación de agua bifásica en un reactor de agua en ebullición, o tipo BWR, ya que incluye presiones y temperaturas similares a las que deberá incursionar el reactor de nuestro interés durante su operación normal y por donde seguramente serían más probables las vibraciones inducidas por fuertes cambios en la densidad del fluido así como cambios abruptos en la dirección de flujo y transferencias de calor. Se encontró que los estudios con códigos de malla fina, seguramente serán una buena herramienta para orientar un diseño, pero actualmente pueden solo ser considerados como una alternativa costosa dentro del proceso de licenciamiento de un nuevo reactor enfriado y moderado por agua supercrítica.

La oportunidad y experiencia de trabajar con el grupo que propuso y ha soportado técnicamente el diseño del HPLWR, permitió determinar la complejidad de un modelo CFD para estas dimensiones de vasija y núcleo. Ello requiere actualmente de muchos recursos de cómputo y el beneficio depende de ajustes y habilidades del usuario del CFD. Esta experiencia dejó claro que un análisis con códigos de malla gruesa podría ser mucho más útil para realizar un estudio de vibraciones y permitiría evaluar la complejidad de incorporar el modelado de agua supercrítica al modelado de fluidos bifásicos, a este tipo de herramientas computacionales. Se determinó que dentro del núcleo del reactor de interés existen tres mecanismos y zonas donde se presentarán cambios abruptos de densidad además del cambio

de dirección en los plenos inferior y superior al ir el refrigerante del evaporador al supercalentador 1 y nuevamente al ir al supercalentador 2. Adicionalmente las transferencias de calor del fluido entre *clusters* en el pleno superior, ya que no todos los *clusters* tienen la misma potencia, podrían reforzar las inestabilidades.

Una vez que se estableció como prioritario el evaluar un código de malla gruesa como herramienta inicial para los estudios establecidos, la decisión preferente fue partir de TRAC-BF1, debido a la disponibilidad de los códigos fuente en la UNAM. Sin embargo, TRAC-BF1 fue originalmente diseñado para reactores BWR, por lo que modificaciones al código eran necesarias para el análisis en la región supercrítica. Una vez definido esto, el propósito de este trabajo pasó a ser investigar cómo mejorar el programa TRAC-BF1 para eliminar las limitaciones que impiden el modelado de flujos SCW y agregar herramientas que permitan el desarrollo y verificación de simuladores para la formación de ingenieros y especialistas. Con esta idea se creó una nueva versión del código, llamada TRAC-U, más allá de eliminar las limitaciones de cálculo, se propusieron modelos hiperbólicos de propiedades termofísicas que permitieron que el código pasara el punto crítico sin la acumulación de errores numéricos que limitaran la convergencia de los modelos. Esta propuesta crea una forma continua de simular desde un fluido de dos fases a un fluido supercrítico de una fase. No obstante, esto se ha logrado a costa de reducir la precisión de los resultados en torno a la línea pseudo saturada. Como primera versión de TRAC-U, este trabajo permitió crear nuevas ideas de mejora. La Cp se puede calcular usando tablas tomadas directamente de NIST. Debido a su comportamiento muy complejo, es casi imposible crear un buen modelo hiperbólico para describirlo (con errores menores al 2%). Como resultado de esto, se propone que solo la C_p deba calcularse a partir de tablas e interpolación en vez de ser modelada. Además, se puede realizar un ajuste más fino de los modelos hiperbólicos de densidad y conductividad térmica para mejorar la precisión de sus resultados; estos ajustes podrían implicar una segmentación de los rangos de presión y temperatura que conforman la región pseudo y super críticas, de forma tal que los modelos se establezcan por regiones más pequeñas las cuales puedan ser modeladas con mayor precisión. Los resultados obtenidos demuestran que el camino ha sido correcto, sin embargo, ese ajuste fino puede dar muchas ventajas al cálculo. Por otro lado, una vez ajustados los modelos, nuevas correlaciones para modelar el HTC deben implementarse y probarse en TRAC-U como un nuevo proyecto.

La creación de TRAC-U implica no sólo aumentar su rango de operación, sino también crear una herramienta mucho más amigable con el usuario para poder construir y verificar modelos. Como parte de la mejora del código se están desarrollando nuevas herramientas para el pre y post procesamiento. Utilizar hoy TRAC-BF1 requiere de un gran esfuerzo debido a que no existe una interfaz gráfica con el usuario, aunado a esto no existen herramientas de verificación y visualización rápida de condiciones iniciales, parámetros, condiciones de frontera y de los resultados, razón por la cual es muy lento desarrollar proyectos en base a esta herramienta. Esta investigación se benefició y aportó a las nuevas herramientas de posprocesamiento. La idea de reducir la curva de aprendizaje y la cantidad de recursos humanos para desarrollar un modelo TRAC-U es actualmente el beneficio principal buscado en el proyecto subsecuente.

Appendix A Thermodynamic Properties

The thermodynamic properties subroutines used in TRAC-BF1/MOD1 are based on polynomial fits to steam table data for water and ideal gas behavior for the noncondensable gas component. The thermodynamic property routines are used by all TRAC-BF1/MOD1 component modules. Tables A.1 through A.8 list the values of the constants.

Subroutine THERMO supplies thermodynamic properties for TRAC-BF1/MOD1. The input variables are the total pressure, the partial pressure of the noncondensable gas component, and the liquid and gas-phase temperatures. The output variables include the saturation temperature corresponding to total pressure; the saturation temperature corresponding to the partial pressure of steam; the specific internal energies of liquid, gas, and noncondensable; the saturated liquid and steam enthalpies corresponding to the partial pressure of steam; the liquid, gas, and noncondensable densities; the derivatives of saturation temperatures and enthalpies with respect to pressure; and, finally, the partial derivatives of liquid, steam, and noncondensable internal energies and densities with respect to pressure (at constant temperature) and with respect to temperature (at constant pressure).

The range of validity for the thermodynamic properties supplied by THERMO is

273.15 K $\leq T_{\ell} \leq$ 713.94 K; 273.15 K $\leq T_{\rm v} \leq$ 3000.0 K; and 1.0 Pa $\leq P \leq 450 \times 10^5$ Pa.

If THERMO is provided with data outside these ranges, it adjusts the data to the corresponding limit and issues a warning message.

A.1 Saturation Properties

A.1.1 Relationship between Saturation Pressure and Temperature

The saturation line that lies between the triple point (273.15 K) and the critical point (647.3 K) is divided into two regions of temperature and pressure, and a separate correlation is used in each region.

First Region of Temperature and Pressure. The first region of temperature is defined by

273.15 K $\leq T_{\rm s} \leq$ 370.4251 K 1 Pa
 $< p_{\rm s} <$ 90564.66 Pa

In this region, thermodynamic relations are used to define the saturation properties. The enthalpy of vaporization, $h_{\ell v}$, is represented as a linear function of temperature

$$h_{\ell v} = 3180619.59 - 2470.2120 T_{\rm s} \tag{A-1}$$

The Clausius-Clapeyron equation, which assumes that steam is an ideal gas and neglects liquid volume compared to steam volume, can be written as

$$\frac{dp_{\rm s}}{dT_{\rm s}} = \frac{h_{\ell \rm v} \, p_{\rm s}}{R_{\rm v} \, T_{\rm s}^2} \tag{A-2}$$

where $R_{\rm v}$ is the gas constant for steam. Substituting for $h_{\ell \rm v}$ and integrating, using the boundary condition $p_{\rm s} = 24821$ Pa at $T_{\rm s} = 338$ K, gives

$$p_{\rm s} = 24821 \left(\frac{T_{\rm s}}{338}\right)^{-5.3512} \exp\left[\frac{20.387(T_{\rm s} - 338)}{T_{\rm s}}\right] \tag{A-3}$$

To compute the saturation temperature for a given pressure, this equation must be solved iteratively. To simplify the solution and avoid iteration, an approximate solution is used that gives the value of saturation temperature to within a fraction of a percent error. First. an approximate value of saturation temperature is determined from

$$T_{\rm s,ap} = \frac{2263}{6.064 - 0.434 \ln\left(\frac{p_{\rm s}}{100000}\right)} \tag{A-4}$$

Constant	Value	Constant	Value
A ₁₁	1.00008875 E-3	C ₁₉	Not used
A ₁₂	7.691625 E2	C ₂₀	9.056466 E4
A ₁₃	1.300115 E-3	C ₂₁	370.4251
A_{14}	1. E-5	C ₂₂	1004.832
C_1	-2263.0	C ₂₃	$C_{16} \cdot C_4$
C_2	0.434	C ₂₄	4186.8
C ₃	-6.064	C ₂₅	287.03
C_4	C ₁₂ / (C ₁₆ - 1)	C ₂₆	$C_{24}(C_5 - C_{29})$
C ₅	273.15	C ₂₇	C ₂₆ + C ₁₀
C ₆	C_{27} - C_{12} · C_5	C ₂₈	(C ₁₂ - C ₂₅) / C ₁₂
C ₇	C ₂₄	C ₂₉	273.15
C ₈	-0.61132 + C ₇ (C ₅ - C ₂₉)	C ₃₀	1.0
C ₉	990.0	C ₃₁	450.0 E5
C ₁₀	$h_{fg}(C_5)$	C ₃₂	C ₅
C ₁₁	1. E5	C ₃₃	713.94026
C ₁₂	461.49	C ₃₄	C ₅
C ₁₃	0.0228	C ₃₅	3000.0
C ₁₄	0.65141	C ₃₆	610.8
C ₁₅	0.0	C ₃₇	221.2 E5
C ₁₆	1.3	C ₃₈	647.3
C ₁₇	C ₂₂ - C ₂₅	C ₃₉	139.6997 E5
C ₁₈	C_{22} / C_{17}	C_{40}	609.625

Table A.1: Miscellaneous constants.

Region	Maximum Pressure (Pa)	Ave	Bve	Cve	Dve
1	20 E5	2.49497 E6	2.08558 E-1	-1.35539 E-7	2.852268 E-14
2	50 E5	2.56008 E6	3.10861 E-2	-6.89888 E-9	4.32037 E-16
3	100 E5	2.59155 E6	8.77499 E-3	-1.794999 E-9	4.29999 E-17
4	150 E5	2.66060 E6	-1.3545 E-2	6.425 E-10	-4.21 E-17
5	200 E5	3.82016 E6	-2.30199 E-1	1.40689 E-8	-3.1786 E-16
6	220 E5	-1.21034 E8	1.80188 E1	-8.74424 E-7	1.40911 E-14
7	250 E5	2.20 E6	0.	0.	0.
8	300 E5	2.20 E6	0.	0.	0.
9	350 E5	2.20 E6	0.	0.	0.
10	400 E5	2.20 E6	0.	0.	0.
11	450 E5	2.20 E6	0.	0.	0.

Table A.2: Constants for steam internal energy function.^a

Region	Maximum Pressure (Pa)	Avg	Bvg	\mathbf{Cvg}	Dvg
1	20 E5	1.06668	2.83108 E-8	-2.1151 E-14	4.7404 E-21
2	50 E5	1.07354	2.651805 E-9	-6.3461 E-16	3.9824 E-23
3	100 E5	1.077773	-2.43 E-11	-7.19799 E-17	4.87999 E-25
4	150 E5	1.085113	-1.9307 E-9	8.91 E-17	-3.896 E-24
5	200 E5	1.16398	-1.63385 E-8	9.5856 E-16	-2.1194 E-23
6	220 E5	3.88988	-3.85959 E-7	1.74763 E-14	-2.6377 E-22
7	250 E5	2.71687	-2.28327 E-7	1.04173 E-14	-1.58428 E-22
8	300 E5	3.97498	-3.06571 E-7	1.063789 E-14	-1.22579 E-22
9	350 E5	1.29469	-2.48349 E-8	7.8979 E-16	-8.079 E-24
10	400 E5	1.05905	-2.46159 E-9	8.8399 E-17	-8.0799 E-25
11	450 E5	1.143019	-7.709599 E-9	1.933599 E-16	-1.46399 E-24

Table A.3: Constants for gamma function.^a

Maximum Temperature	Acp	Ben	Ccp	Dcp	
(K)					
323.15	-7.9678 E2	2.81876 E1	-1.01806 E-1	1.2499 E-4	
373.15	-9.70826 E2	2.8325 E1	-9.76562 E-2	1.16 E-4	
423.15	-1.66497 E3	3.315936 E1	-1.0861179 E-1	1.2399 E-4	
473.15	-6.142048 E3	6.363098 E1	-1.77623 E-1	1.7599 E-4	
523.15	-8.228995 E4	5.377395 E2	-1.16125	8.5599 E-4	
573.15	-6.5842 E5	3.79343 E3	-7.29249	4.704 E-3	
623.15	3.45616 E5	-2.2129 E2	-2.4524	3.14799 E-3	
647.3	1.979837 E6	-1.478255 E4	3.16564 E1	-2.08433 E-2	
673.3	-9.62493 E7	4.363367 E5	-6.58876 E2	3.31461 E-1	
723.3	-1.10749 E7	4.80737 E4	-6.9212 E1	3.30917 E-2	
	Maximum Temperature (K) 323.15 373.15 423.15 423.15 473.15 523.15 573.15 623.15 647.3 647.3 673.3 723.3	Maximum Acp Temperature (K) Acp 323.15 -7.9678 E2 373.15 -9.70826 E2 423.15 -1.66497 E3 473.15 -6.142048 E3 523.15 -8.228995 E4 573.15 -6.5842 E5 623.15 3.45616 E5 647.3 1.979837 E6 673.3 -9.62493 E7 723.3 -1.10749 E7	Maximum Acp Bcp 323.15 -7.9678 E2 2.81876 E1 373.15 -9.70826 E2 2.8325 E1 423.15 -1.66497 E3 3.315936 E1 473.15 -6.142048 E3 6.363098 E1 523.15 -8.228995 E4 5.377395 E2 573.15 -6.5842 E5 3.79343 E3 623.15 3.45616 E5 -2.2129 E2 647.3 1.979837 E6 -1.478255 E4 673.3 -9.62493 E7 4.363367 E5 723.3 -1.10749 E7 4.80737 E4	Maximum Acp Bcp Ccp 323.15 -7.9678 E2 2.81876 E1 -1.01806 E-1 373.15 -9.70826 E2 2.8325 E1 -9.76562 E-2 423.15 -1.66497 E3 3.315936 E1 -1.0861179 E-1 473.15 -6.142048 E3 6.363098 E1 -1.77623 E-1 523.15 -8.228995 E4 5.377395 E2 -1.16125 573.15 -6.5842 E5 3.79343 E3 -7.29249 623.15 3.45616 E5 -2.2129 E2 -2.4524 647.3 1.979837 E6 -1.478255 E4 3.16564 E1 673.3 -9.62493 E7 4.363367 E5 -6.58876 E2 723.3 -1.10749 E7 4.80737 E4 -6.9212 E1	

Table A.4: Constants for steam heat capacity function.^a

Region	Maximum Temperature (K)	$\mathbf{A}\ell\mathbf{e}$	Bℓe	$\mathbf{C}\ell\mathbf{e}$	Dℓe
1	423.15	-1.14367 E6	4.1868 E3	0	0
2	473.15	8.09575 E6	-5.70088 E4	1.34436 E2	-9.78797 E-2
3	523.15	-1.93739 E6	9.74928 E3	-1.32996 E1	1.08799 E-2
4	573.15	-5.32458 E6	2.91794 E4	-5.04522 E1	3.456 E-2
5	623.15	-6.35835 E7	3.2873 E5	-5.63712 E2	3.276 E-1
6	645.15	-6.62391 E9	3.16056 E7	-5.02637 E4	2.665 E1
7	673.15	-5.4759 E9	2.46356 E7	-3.6931 E4	1.84547 E1
8	713.94	-7.15364 E7	3.05608 E5	-4.24245 E2	1.97199 E-1

Table A.5: Constants for liquid internal energy function.^a

257

a. Constants in TRAC-BF1/MOD1 have 14 significant figures.

Table A.	5: N	fiscell	laneous	liquid	property	^v constants. ^a
					rrJ	0 0 110 0 0111 0 10 1

Constant		Value	
$C_{ m k0}$	-8.329 E-4		
$C_{\rm k2}$	-2.2458 E-17		
$C_{\rm k4}$	-1.4504 D-16		
a_ℓ	7.146		

Region	Maximum Temperature (K)	Avo	Bvo	Cvo	Dvo
1	373.15	1.705767 E-3	-6.03208 E-6	1.5944 E-8	-1.2149 E-11
2	473.15	5.21459 E-4	3.518922 E-6	-9.73048 E-9	1.085668 E-11
3	573.15	-1.493186 E-2	9.793156 E-5	-2.01728 E-7	1.40804 E-10
4	603.15	-4.93342 E-1	2.59285 E-3	-4.53871 E-6	2.65379 E-9
5	613.15	-3.45589	1.735179 E-2	-2.90474 E-5	1.62202 E-8
6	623.15	-1.19525 E1	5.89049 E-2	-9.67866 E-5	5.30292 E-8
7	633.15	-3.74466 E1	1.81734 E-1	-2.940499 E-4	1.5863 E-7
8	643.15	-3.97132 E2	1.88018	-2.96739 E-3	1.561217 E-6
9	653.15	-2.31427 E3	1.07102 E1	-1.65217 E-2	8.49552 E-6
10	663.15	2.048156 E3	-9.345278	1.4212 E-2	-7.2037 E-6
11	673.15	-7.38647 E1	3.31449 E-1	-4.96087 E-4	2.477179 E-7
12	713.94	-2.189132 E1	9.67584 E-2	-1.14289 E-4	7.05672 E-8

Table A.7: Constants in liquid specific volume function.^a

Region	Maximum Temperature (K)	Afn	Bfn	Cfn	Dfn
1	373.15	-4.24863 E9	3.75167 E7	-1.00649 E5	8.75072 E1
2	473.15	-2.79363 E8	5.566317 E6	-1.49217 E4	1.0834095 E1
3	573.15	-1.17612 E8	4.38322 E6	-1.208837 E4	8.60345
4	603.15	-4.54151 E9	2.73686 E7	-5.18947 E4	3.15812 E1
5	613.15	-4.01043 E10	2.029257 E8	-3.40759 E5	1.900066 E2
6	623.15	-6.01738 E10	2.99849 E8	-4.96759 E5	2.73686 E2
7	633.15	2.06788 E10	-8.95038 E7	1.282278 E5	-6.072229 E1
8	643.15	8.379355 E10	-3.899718 E8	6.050262 E5	-3.129196 E2
9	653.15	9.240237 E10	-4.267492 E8	6.569561 E5	-3.371112 E2
10	663.15	-2.75477 E10	1.2580004 E8	-1.9147749 E5	9.713614 E1
11	673.15	6.860819 E8	-3.063602 E6	4.561362 E3	-2.264207
12	713.94	4.34584 E7	-1.83799 E5	2.59716 E2	-1.224404 E-1

Table A.8: Constants in liquid specific volume correction factor.^a

which gives the saturation temperature within a few degrees of its correct value. This value is corrected by integrating the Clausius-Clapeyron equation, assuming constant $h_{\ell v}$ between $T_{s,ap}$ and T_s , which gives

$$T_{\rm s} = \frac{T_{\rm s,ap}}{1 - \left[\frac{R_{\rm v} T_{\rm s,ap}}{h_{\ell \rm v}(T_{\rm s,ap})}\right] \ln \left[\frac{p_{\rm s}}{p_{\rm s,a}(T_{\rm s,ap})}\right]}$$
(A-5)

where $h_{\ell v}(T_{s,ap})$ and $p_s(T_{s,ap})$ are calculated using the equations above at $T_{s,ap}$. The derivative along the saturation line is also needed and is given by

$$\frac{\partial T_{\rm s}}{\partial p_{\rm s}} = \frac{R_{\rm v} T_{\rm s}^2}{p_{\rm s} h_{\ell \rm v}(T_{\rm s})} \tag{A-6}$$

Second Region of Temperature and Pressure. The second region of temperature is given by

 $T_{\rm s} \geq 370.4251~{\rm K}$
 $p_{\rm s} \geq 9.056466 \times 10^4~{\rm Pa}$

In this range of temperature and pressure, a simpler functional form is used and is written

$$p_{\rm s} = \frac{1}{\mathsf{A}_{14}} \left(\frac{T_{\rm s} - \mathsf{C}_3}{\mathsf{C}_1} \right)^{\frac{1}{\mathsf{C}_2}} \tag{A-7}$$

$$T_{\rm s} = \mathsf{C}_1(\mathsf{A}_{14}\,p_{\rm s})^{\mathsf{C}_2} + \mathsf{C}_3 \tag{A-8}$$

$$\frac{dT_{\rm s}}{dp_{\rm s}} = \frac{\mathsf{C}_2(T_{\rm s} - \mathsf{C}_3)}{p_{\rm s}} \tag{A-9}$$

Los Alamos National Laboratory has since modified the high-pressure range calculation. Those modifications have not as yet been incorporated into TRAC-BF1/MOD1.

A.1.2 Internal Energy of Saturated Steam

There are 12 pressure ranges in which the saturated vapor internal energy and the derivatives of the saturation enthalpy with respect to pressure and temperature are evaluated. The lowest pressure range uses one functional form, while the 11 highest pressure ranges use another functional form with different sets of constants. The two functional forms are given, along with the sets of constants and pressure ranges.

Lowest Pressure Range. The lowest pressure range is given by $p_v < 5.0 \times 10^5$ Pa, where p_v is the partial pressure of steam. In this pressure range, the internal energy is given by

$$e_{\rm vs} = h_{\rm vs} - \frac{p_{\rm v}}{p_{\rm vs}} = h_{\rm vs} - R_{\rm v} T_{\rm s}$$
 (A-10)

and

$$\frac{de_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} = \frac{dh_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} - R_{\rm v}\frac{dT_{\rm s}}{dp_{\rm v}} \tag{A-11}$$

The quantities have been determined by fitting the saturated vapor enthalpy and its derivative with respect to pressure as

$$h_{\rm vs} = C_8 + C_7 [T_{\rm s}(p_{\rm v}) - C_5] + h_{\ell \rm v} [T_{\rm s}(p_{\rm v})] \tag{A-12}$$

$$\frac{dh_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} = {\rm C_7} - 2470.212 \, \frac{dT_{\rm s}}{dp_{\rm v}} \tag{A-13}$$

Other quantities that will be needed later are $\gamma_{\rm vs}$, the ratio of vapor specific heats along the saturation line, and its derivative along the saturation line with respect to pressure. These quantities are given by

$$\gamma_{\rm vs} = \frac{h_{\rm vs}}{e_{\rm vs}} \tag{A-14}$$

$$\frac{d\gamma_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} = \frac{dh_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} - \frac{\gamma_{\rm vs}}{e_{\rm vs}}\frac{de_{\rm vs}}{dp_{\rm v}} \tag{A-15}$$

Higher-Pressure Ranges. In the high-pressure ranges, the quantities of interest are determined from polynomials. These polynomials have different coefficients for the different pressure ranges. The pressures ranges and coefficients are given in Tables A.2 and A.3. The functions for pressure range j are

$$e_{\rm vs}(j) = \operatorname{Ave}(j) + p_{\rm v}\{\operatorname{Bve}(j) + p_{\rm v}[\operatorname{Cve}(j) + p_{\rm v}\operatorname{Dve}(j)]\}$$
(A-16)

$$\frac{de_{\rm vs}(j)}{dp_{\rm v}} = \text{Bve}(j) + p_{\rm v}[2.0\,\text{Cve}(j) + p_{\rm v}\,3.0\,\text{Dve}(j)]$$
(A-17)

$$\gamma_{\rm vs}(\mathbf{j}) = \operatorname{Avg}(\mathbf{j}) + p_{\rm v} \{\operatorname{Bvg}(\mathbf{j}) + p_{\rm v}[\operatorname{Cvg}(\mathbf{j}) + p_{\rm v}\operatorname{Dvg}(\mathbf{j})]\}$$
(A-18)

$$\frac{d\gamma_{\rm vs}(j)}{dp_{\rm v}} = Bvg(j) + p_{\rm v}[2.0\,Cvg(j) + p_{\rm v}\,3.0\,Dvg(j)]$$
(A-19)

$$h_{\rm vs} = e_{\rm vs}(j)\,\gamma_{\rm vs}(j) \tag{A-20}$$

$$\frac{dh_{\rm vs}(j)}{dp_{\rm v}} = \gamma_{\rm vs}(j) \frac{de_{\rm vs}(j)}{dp_{\rm v}} + e_{\rm vs}(j) \frac{d\gamma_{\rm vs}(j)}{dp_{\rm v}}$$
(A-21)

A.1.3 Heat Capacity of Saturated Steam at Constant Pressure

Although the heat capacity of steam is not an output variable of the THERMO subroutine, it is used in subsequent calculations. The temperature is divided into 10 regions, with the heat capacity and its derivative with respect to pressure being determined from the same polynomial function in each temperature range with different coefficients. The polynomial function is given by

$$Cps(j) = Acp(j) + T_s \{Bcp(j) + T_s [Ccp(j) + T_s Dcp(j)]\}$$
(A-22)

$$\frac{d \operatorname{Cps}(j)}{dp_{v}} = \{\operatorname{Bcp}(j) + T_{s}[2.0 \operatorname{Ccp}(j) + 3.0 T_{s} \operatorname{Dcp}(j)]\}\frac{dT_{s}}{dp_{v}}$$
(A-23)

A.2 Liquid Properties

A.2.1 Liquid Internal Energy

The liquid internal energy is computed by adding a correction term to the internal energy at saturation (corresponding to saturation pressure at the liquid temperature), that is

$$e_{\ell}(T_{\ell}, p) = e_{\ell}(T_{\ell}, \text{PSL}) + \text{ELP}$$
(A-24)

where PSL is the saturation pressure corresponding to T_{ℓ} and

$$ELP = (p - PSL) \left(\frac{\partial e_{\ell}}{\partial p}\right)_{T_{\ell}}$$
(A-25)

where the derivative of liquid internal energy with respect to pressure at constant temperature is given by

$$\left(\frac{\partial e_{\ell}}{\partial p}\right)_{T_{\ell}} = C_{k0}[1 - \exp(C_{k4} \operatorname{PSL})] + C_{k2} \operatorname{PSL}^2$$
(A-26)

The derivative of the liquid internal energy is calculated from

$$\left(\frac{\partial e_{\ell}}{\partial T_{\ell}}\right)_{p} = \frac{\partial}{\partial T_{\ell}} e_{\ell} (T_{\ell}, \text{PSL})_{p} + \text{ERT}$$
(A-27)

where

$$\operatorname{ERT} = \frac{\partial}{\partial T_{\ell}} (\operatorname{ELP})_{p} = \{ C_{k0} [1 - (C_{k4} \, p + C_{k4} \, \operatorname{PSL}) \exp(C_{k4} \, \operatorname{PSL}) - 1] + C_{k2} [2p \, \operatorname{PSL} - 3 \, \operatorname{PSL}^{2}] \} \frac{d \, \operatorname{PSL}}{dT_{\ell}}$$
(A-28)

The liquid internal energy at saturation is computed from a third-order polynomial in each of eight temperature ranges. The polynomial coefficients are different in each temperature range. The temperature ranges and the coefficients for each range are given in Table A.5. The polynomial function is given by

$$e_{\ell}(T_{\ell}, \text{PSL}) = A\ell e(j) + T_{\ell} \{B\ell e(j) + T_{\ell} [C\ell e(j) + T_{\ell} D\ell e(j)]\}$$
(A-29)

for each temperature range j.

A.2.2 Liquid Density

The liquid density is computed in two steps. The density is computed from the primary liquid density function to which a residual void correction is applied.

Primary Liquid Density Correlation. The primary liquid density is computed from a correlation for the liquid specific volume as a function of liquid temperature, to which a pressure-dependent correction factor is applied, and is

$$\rho_{\ell}(T_{\ell}, p) = \frac{1}{v_{\ell}(T_{\ell}) \left[1 - \frac{\ln\left(1 + \frac{p}{F(T_{\ell})}\right)}{a_{\ell}}\right]}$$
(A-30)

where

$$v_{\ell}(T_{\ell}) = \operatorname{Avo} + T_{\ell}[\operatorname{Bvo} + T_{\ell}(\operatorname{Cvo} + T_{\ell}\operatorname{Dvo})]$$
(A-31)

and

$$F(T_{\ell}) = \operatorname{Afn} + T_{\ell}[\operatorname{Bfn} + T_{\ell}(\operatorname{Cfn} + T_{\ell}\operatorname{Dfn})]$$
(A-32)

The temperature range is broken up into 12 temperature regions, and the polynomial coefficients are different in each region. The temperature regions and the coefficients for each region are listed in Tables A.7 and A.8.

The derivatives of the liquid density with respect to pressure and temperature are found by differentiation of the liquid density function.

Residual Void Correction. After evaluation of the functions described above, the liquid density and its derivatives are modified to reflect a residual void fraction. In the following, the

unmodified values computed by the formulas described above are denoted by a tilde (). There are two pressure ranges for the residual void correction.

High-Pressure Residual Void Correction – The high-pressure range for the residual void correction is given by

P > 4.E5 Pa.

In the high-pressure region, the corrected liquid density and its derivatives are given by

$$\rho_{\ell}(T_{\ell}, p) = \left(1 - \frac{1000}{p}\right) \tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell}, p) \tag{A-33}$$

$$\left[\frac{\partial\rho_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial T_{\ell}}\right]_{p} = \left(1 - \frac{1000}{p}\right) \left[\frac{\partial\tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial T_{\ell}}\right]_{p}$$
(A-34)

$$\left[\frac{\partial\rho_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial p}\right]_{T_{\ell}} = \left(1 - \frac{1000}{p}\right) \left[\frac{\partial\tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial p}\right]_{T} + \frac{1000\tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell},p)}{p^{2}}$$
(A-35)

 $\label{eq:low-Pressure Residual Void Correction – The low-pressure region for the residual void correction is given by $$P < 4.0E5 Pa.$}$

In this region of pressure, the corrected liquid density and its derivatives are given by

$$A\ell f = 6.25E - 9p + 0.005$$
 (A-36)

$$\rho_{\ell}(T_{\ell}, p) = \mathcal{A}\ell f \, \tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell}, p) \tag{A-37}$$

$$\left[\frac{\partial\rho_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial p}\right]_{T_{\ell}} = (1 - A\ell f) \left[\frac{\partial\tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial p}\right]_{T_{\ell}} + 6.25E-9\,\tilde{\rho}_{\ell} \tag{A-38}$$

$$\left[\frac{\partial \rho_{\ell}(T_{\ell}, p)}{\partial T_{\ell}}\right]_{p} = (1 - \mathrm{A}\ell \mathrm{f}) \left[\frac{\partial \tilde{\rho}_{\ell}(T_{\ell}, p)}{\partial T_{\ell}}\right]_{p}$$
(A-39)

A.3 Vapor Properties

There are two vapor species in TRAC-BF1/MOD1, steam and noncondensable gas. Correlations are provided for the properties of each of these species.

A.3.1 Steam Properties

Steam properties are computed from different correlating functions, depending upon whether the steam is superheated or subcooled.

Superheated Steam $(T > T_s(p_v))$. Superheated steam is defined as steam whose temperature is greater than the saturation temperature based on the partial pressure of steam.

Internal Energy of Super-heated Steam – The internal energy of steam is computed by integrating the enthalpy from the saturated state to the temperature of interest along a line of constant pressure to give

$$e_{\rm v}(T_{\rm v,p}) = e_{\rm v}[T_{\rm s}(p_{\rm v}), p_{\rm v}] + \mathbf{A}_{12} \left\{ [T_{\rm v} - T_{\rm s}(p_{\rm v})] + (T_{\rm v}^2 - \beta)^{1/2} - \frac{T_{\rm s}(p_{\rm v})}{\mathbf{A}_{11}{\rm Cps} - 1} \right\}$$
(A-40)

and

$$\beta = T_{\rm s}^2(p_{\rm v}) \left[1 - \frac{1}{(\mathbf{A}_{11} \rm{Cps} - 1)^2} \right]$$
(A-41)

where β is the isobaric thermal expansion coefficient.

The saturated vapor enthalpy function was described in Section A.1.2, and the other constants are listed in Table A.1. The derivative of vapor internal energy with respect to temperature at constant pressure is given by

$$\left(\frac{\partial e_{\rm v}}{\partial T_{\rm v}}\right)_{p_{\rm v}} = \frac{\mathsf{C}_4}{1 - \frac{\beta}{\kappa^2}} \tag{A-42}$$

and

$$\kappa = \mathbf{A}_{13}(e_{\rm v} - e_{\rm vs}) + T_{\rm s} \left(1 + \frac{1}{\mathbf{A}_{11} \mathrm{Cps} - 1} \right) \tag{A-43}$$

where κ is the isothermal compressibility.

The derivative of vapor internal energy with respect to pressure at constant temperature is given by

$$\left(\frac{\partial e_{\mathbf{v}}}{\partial p}\right)_{T_{\mathbf{v}}} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial e_{\mathbf{v}}}{\partial T_{\mathbf{v}}}\right)_{p} \left[\left(1 - \frac{\beta}{\kappa^{2}}\right) \kappa_{p}' + \frac{1}{\kappa} \frac{d\beta}{dp} \right]$$
(A-44)

$$\begin{aligned} \kappa_p' &= \left(\frac{\partial \kappa}{\partial p_{\rm v}}\right)_{T_{\rm v}} - \mathtt{A}_{13} \left(\frac{\partial e_{\rm v}}{\partial p_{\rm v}}\right)_{T_{\rm v}} = -\mathtt{A}_{13} \left(\frac{d e_{\rm vs}}{d p_{\rm v}}\right) + \left(1 + \frac{1}{\mathtt{A}_{11} \mathrm{Cps} - 1}\right) \left(\frac{d T_{\rm s}}{d p_{\rm v}}\right) \\ &- \frac{\mathtt{A}_{11} T_{\rm s}}{(\mathtt{A}_{11} \mathrm{Cps} - 1)^2} \left(\frac{d \mathrm{Cps}}{d p_{\rm v}}\right) \end{aligned}$$
(A-45)

$$\frac{d\beta}{d\kappa} = \frac{2}{T_{\rm s}} \left[\beta \frac{dT_{\rm s}}{dp_{\rm v}} + \mathbf{A}_{11} \frac{d\,\mathrm{Cps}}{dp_{\rm v}} \left(\frac{T_{\rm s}}{\mathbf{A}_{11}\mathrm{Cps} - 1} \right)^3 \right] \tag{A-46}$$

Density of Superheated Steam. The density of superheated steam is given by

$$\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p) = \frac{p_{\rm v}}{(\gamma_{\rm vs} - 1)e_{\rm vs} + 0.3D_e} \tag{A-47}$$

and

$$D_e = \mathbf{A}_{12} \left[T_{\rm v} - T_{\rm s} + (T_{\rm v}^2 - \beta)^{1/2} - \frac{T_{\rm s}}{\mathbf{A}_{11} \text{Cps} - 1} \right]$$
(A-48)

The derivative of steam density with respect to temperature at constant pressure is given by

$$\left(\frac{\partial \rho_{\rm v}}{\partial T_{\rm v}}\right)_p = \frac{-0.3\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v})}{(\gamma_{\rm vs} - 1)e_{\rm vs} + 0.3D_e} \left(\frac{\partial e_{\rm v}}{\partial T_{\rm v}}\right)_p \tag{A-49}$$

The derivative of steam density with respect to temperature at constant pressure is given by

$$\left(\frac{\partial\rho_{\rm v}}{\partial p_{\rm v}}\right)_{T_{\rm v}} = \frac{1 - \rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v}) \left[e_{\rm vs}\frac{\partial\gamma_{\rm vs}}{\partial p_{\rm v}} + (\gamma_{\rm vs} - 1.3)\frac{\partial e_{\rm vs}}{\partial p_{\rm v}}\right]}{(\gamma_{\rm vs} - 1)e_{\rm vs} + 0.3D_e} - \frac{0.3\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v})}{(\gamma_{\rm vs} - 1)e_{\rm vs} + 0.3D_e} \left(\frac{\partial e_{\rm v}}{\partial p_{\rm v}}\right)_{T_{\rm v}}$$
(A-50)

Subcooled Steam $[T_v < T_s(p_v)]$. Subcooled steam is defined as steam whose temperature is less than the saturation temperature based on the partial pressure of steam.

Internal Energy of Subcooled Steam – The internal energy of steam is computed by integrating the internal energy from the saturated state to the temperature of interest along a line of constant pressure, assuming that the heat capacity at constant volume remains constant at its value on the saturation line. This gives

$$e_{\rm v}(T_{\rm v},p) = e_{\rm v}[T_{\rm s}(p_{\rm v}),p_{\rm v}] + [T_{\rm v} - T_{\rm s}(p_{\rm v})] \frac{\operatorname{Cps}[T_{\rm s}(p_{\rm v})]}{C_{16}}$$
(A-51)

$$\left[\frac{\partial e_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v})}{\partial T_{\rm v}}\right]_{p_{\rm v}} = \frac{\operatorname{Cps}[T_{\rm s}(p_{\rm v})]}{\mathsf{C}_{16}} \tag{A-52}$$

$$\left(\frac{\partial e_{\mathbf{v}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{v}})}{\partial p_{\mathbf{v}}}\right)_{T_{\mathbf{v}}} = \left\{\frac{\partial e_{\mathbf{v}}[T_{\mathbf{s}}(p_{\mathbf{v}}), p_{\mathbf{v}}]}{\partial p_{\mathbf{v}}}\right\}_{T_{\mathbf{v}}} + \left\{\frac{\partial \operatorname{Cps}[T_{\mathbf{s}}(p_{\mathbf{v}}), p_{\mathbf{v}}]}{\partial p_{\mathbf{v}}}\right\}_{T_{\mathbf{v}}} \left[\frac{T_{\mathbf{v}} - T_{\mathbf{s}}(p_{\mathbf{v}})}{\mathsf{C}_{16}}\right] - \frac{\operatorname{Cps}[T_{\mathbf{s}}(p_{\mathbf{v}}), p_{\mathbf{v}}]}{\mathsf{C}_{16}} \left[\frac{\partial T_{\mathbf{s}}(p_{\mathbf{v}})}{\partial p_{\mathbf{v}}}\right]$$
(A-53)

where the derivatives and heat capacity of saturated steam were described in Section A.1.

Density of Subcooled Steam – The density of subcooled steam is computed using the same correlating functions as for superheated steam (as described in Section **Density of Superheated Steam**) except that the correlating parameter, D_e , is given by

$$D_e = \frac{\text{Cps}[T_s(p_v), p_v]}{C_{16}} [T_v - T_s(p_v)]$$
(A-54)

Steam Density Corrections. There are two separate corrections applied to the steam density as computed from the formulation described in the previous sections. If the computed density is negative, then the steam density and its derivatives with respect to pressure and temperature are recomputed assuming that steam is a perfect gas. These relations are

$$\rho_{\rm v}(T_{\rm v},p) = \frac{p_{\rm v}}{\mathsf{C}_{12}T_{\rm v}} \tag{A-55}$$

$$\left(\frac{\partial \rho_{\rm v}}{\partial T_{\rm v}}\right)_{p_{\rm v}} = \frac{-\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p)}{T_{\rm v}} \tag{A-56}$$

$$\left(\frac{\partial \rho_{\rm v}}{\partial p}\right)_{T_{\rm v}} = \frac{\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p)}{p_{\rm v}} \tag{A-57}$$

The second correction is used whenever the computed steam density is greater than the computed liquid density. In this case, the vapor density and its derivatives with respect to pressure and temperature are set approximately equal to their corresponding liquid properties. Thus,

if $\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v}) \ge 0.999 \rho_{\ell}(T_{\ell}, p)$, then

$$\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v}) = 0.999 \rho_{\ell}(T_{\ell}, p) \tag{A-58}$$

$$\left[\frac{\partial\rho_{\rm v}(T_{\rm v},p_{\rm v})}{\partial p_{\rm v}}\right]_{T_{\rm v}} = 0.999 \left[\frac{\partial\rho_{\ell}(T_{\ell},p)}{\partial p_{\rm v}}\right]_{T_{\ell}} \tag{A-59}$$

$$\left[\frac{\partial \rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v})}{\partial T_{\rm v}}\right]_{p_{\rm v}} = 0.999 \left[\frac{\partial \rho_{\ell}(T_{\ell}, p)}{\partial T_{\ell}}\right]_{p_{\rm v}} \tag{A-60}$$

A.3.2 Noncondensable Gas Properties

The density and internal energy of the noncondensable gas are computed from the perfect gas law and are given by

$$e_{\rm a}(T_{\rm v},p_{\rm a}) = C_{17} T_{\rm v}$$
 (A-61)

$$\left[\frac{\partial e_{\rm a}(T_{\rm v}, p_{\rm a})}{\partial T_{\rm v}}\right]_p = C_{17} \tag{A-62}$$

$$\left[\frac{\partial e_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}})}{\partial p_{\mathbf{a}}}\right]_{T_{\mathbf{v}}} = 0 \tag{A-63}$$

$$\left[\frac{\partial \rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}})}{\partial p_{\mathbf{a}}}\right]_{T_{\mathbf{v}}} = \frac{1}{\mathsf{C}_{25} T_{\mathbf{v}}} \tag{A-64}$$

$$\left[\frac{\partial \rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}})}{\partial T_{\mathbf{v}}}\right]_{p_{\mathbf{a}}} = -\mathsf{C}_{25} \,\rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}}) \left[\frac{\partial \rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}})}{\partial p_{\mathbf{a}}}\right]_{T_{\mathbf{v}}} \tag{A-65}$$

$$\rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}}) = p_{\mathbf{a}} \left[\frac{\partial \rho_{\mathbf{a}}(T_{\mathbf{v}}, p_{\mathbf{a}})}{\partial p_{\mathbf{a}}} \right]_{T_{\mathbf{v}}}$$
(A-66)

A.3.3 Properties of Water Mixtures

The internal energy of a mixture of steam and noncondensable gas is given by the densityweighted average of the internal energies of the two species

$$e_{\rm m}(T_{\rm v,p}) = \frac{\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v})e_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v}) + \rho_{\rm a}(T_{\rm v}, p_{\rm a})e_{\rm a}(T_{\rm v}, p_{\rm a})}{\rho_{\rm v}(T_{\rm v}, p_{\rm v}) + \rho_{\rm a}(T_{\rm v}, p_{\rm a})}$$
(A-67)

The density of a mixture of steam and noncondensable gas is the sum of the densities of the two species.

A.4 Supercritical Properties

The verification of the new models was done with data taken from NIST (National Institute of Standards and Technology) which are validated internationally and are issued by the United States Department of Commerce.

TRAC calculates thermodynamic properties with two subroutines that in turn call functions to complement the calculations. In order to be able to make a transparent modification, guaranteeing that numerical errors are not possible, all programs involved were isolated and a program that simulates TRAC-BF1 was created. This program creates a sweep of pressure and temperature to evaluate every property. Once this validation was accomplished, all modified programs were added to TRAC-BF1 .f programs and a new version of TRAC was compiled, this new version is known as TRAC-U01.

In total, 7 programs were modified, of which 6 are functions that calculate 3 properties in 2 phases: specific heat, thermal conductivity and dynamic viscosity. The remaining program is a subroutine that calculates several properties, of which 2 were modified: density and internal energy. The selection of properties to be modified was based on the NIST data selected, only the properties related to the saturation temperature were left unchanged and are modifications in the supercritical mode. The properties that were modified and how they were modeled are described below.

A.4.1 Heat Capacity of Supercritical Fluid at constant pressure.

Because the original calculation of TRAC is very different from the behavior that describes the NIST data, this property was on the writing for the two phases from 22 [MPa]. The model used is described next.

$$C_{p}(T) = (e - e_{0}T) + \frac{[d e^{(-f(T - T_{0}))}]}{e^{b(T - T_{0})} + e^{-b(T - T_{0})}}$$
(A-68)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
b	-0.19	-0.19	-0.19	-0.25	-0.25	-0.2	-0.15	-0.12	-0.1	-0.08	-0.07	-0.05
d	500,000.00	330,000.00	170,000.00	140,123.00	100,000.00	80,000.00	65,000.00	52,000.00	47,000.00	42,000.00	36,000.00	32,000.00
e	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000	6000
f	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
T0	650	650	645	660	665	665	670	675	675	680	680	690
e0	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3

A.4.2 Thermal conductivity.

Thermal conductivity showed a very different behavior in TRAC-BF1 and NIST near the supercritical cjump, for this reason it was necessary to use the original TRAC-BF1 calculations in a section and from 620 [K] and 22 [MPa] the model A-69 was used.

$$C(T) = e + [d(e^{-f(T-T_0)})] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} - e^{-b(T-T_0)}}$$
(A-69)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
а	-0.041	-0.041	-0.041	-0.041	-0.03	-0.03	-0.03	-0.022	-0.022	-0.022	-0.022	-0.022
b	-0.04	-0.04	-0.04	-0.04	-0.03	-0.03	-0.03	-0.021	-0.021	-0.021	-0.021	-0.021
d	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.18	0.18	0.18	0.18	0.18
e	0.28	0.28	0.28	0.28	0.29	0.29	0.29	0.31	0.31	0.31	0.31	0.31
f	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
T0	650	650	650	650	660	660	660	670	670	673	673	673

A.4.3 Dynamic Viscosity.

Like Cp, the dynamic viscosity was overwritten throughout the entire calculation range from 22 [MPa]. The model used to calculate this property is A-70.

$$\mu(T) = e + [d(e^{-f(T-T_0)})] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} + e^{-b(T-T_0)}}$$
(A-70)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
а	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016	-0.016
b	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02
d	3E-05	3E-05										
e	4E-05	4.1E-05	4.2E-05									
f	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
T0	680	680	680	680	680	680	680	680	680	680	680	680

Within the thermo.f subroutine, changes were made for internal energy, enthalpy and density. This same subroutine calculates the derivatives of these properties, however the derivatives were left unmodified, this due to two reasons: there are no references in NIST for most of the derivatives and TRAC-BF1 calculates the derivatives through analytical models based on experiments to which there is no access.

A.4.4 Internal Energy.

$$u(T) = c + mT + be^{d(T-T_0)} \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{a(T-T_0)} + e^{-a(T-T_0)}}$$
(A-71)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
а	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06
b	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000	400000
d	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000
e	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005	0.0005
T0	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650
m	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000	3000

A.4.5 Enthalpy.

Due to the thermodynamic relationship between internal energy and enthalpy, the models presented in this work are identical, however the coefficients for each case were different. TRAC-BF1 uses the enthalpy of saturation to calculate other properties, so the modified enthalpy was left only as an extra property for future work.

$$h(T) = c + mT + be^{d(T-T_0)} \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{a(T-T_0)} + e^{-a(T-T_0)}}$$
(A-72)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
а	0.07	0.07	0.06	0.05	0.04	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
b	550,000.00	550,000.00	550,000.00	550,000.00	550,000.00	550,000.00	600,000.00	650,000.00	650,000.00	600,000.00	600,000.00	600,000.00
с	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00	10,000.00
d	0.0001	0.0001	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0001	0.0001	0.0001
T ₀	650.00	650.00	660.00	660.00	660.00	670.00	670.00	670.00	670.00	680.00	680.00	680.00
m	3,250.00	3,250.00	3,300.00	3,200.00	3,200.00	3,200.00	3,200.00	3,100.00	3,100.00	3,200.00	3,200.00	3,200.00

A.4.6 Density.

Density is the only property that TRAC-BF1 calculates in different subroutines for liquid and steam. For liquid, thermo.f subroutine calls another subroutine: rholiq.f to obtain the density value and its derivatives. For steam, density calculation is done directly in thermo.f, as another section of the properties that this subroutine calculates.

$$\rho(T) = e + \left[d \left(e^{-f(T-T_0)} \right) \right] \frac{e^{a(T-T_0)} - e^{-a(T-T_0)}}{e^{b(T-T_0)} - e^{-b(T-T_0)}}$$
(A-73)

P [MPa]	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33
а	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02
b	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019	-0.019
d	350	350	350	350	350	350	300	300	300	300	300	300
e	410	410	410	420	440	430	450	450	450	450	450	450
f	0.0009	0.0009	0.0009	0.00085	0.0007	0.0008	0.0003	0.0003	0.0004	0.0004	0.00045	0.0004
T0	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650	650

As can be seen, all the models that were created to calculate the properties in the supercritical region are hyperbolic models, this is because with small differences this type of equations can describe a very similar behavior to that performed by thermo-physical properties near the critical point.