



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA

FACULTAD DE INGENIERÍA

DESARROLLO DE MODELOS PARA
EL DISEÑO DEL COMBUSTIBLE DE UN
REACTOR NUCLEAR RÁPIDO ENFRIADO POR GAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN INGENIERÍA

ENERGÍA – SISTEMAS ENERGÉTICOS

PRESENTA

RICARDO REYES RAMÍREZ

TUTOR

DRA. CECILIA MARTÍN DEL CAMPO MÁRQUEZ



2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE

Secretario: DRA. CECILIA MARTÍN DEL CAMPO MÁRQUEZ

Vocal: DR. GILBERTO ESPINOSA PAREDES

1^{er}. Suplente: DR. ARTURO GUILLERMO REINKING CEJUDO

2^{do}. Suplente: DR. EDMUNDO DEL VALLE GALLEGOS

Lugar donde se realizó la tesis:

FACULTAD DE INGENIERÍA DE LA UNAM

TUTOR DE TESIS:

DRA. CECILIA MARTÍN DEL CAMPO MÁRQUEZ

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Cecilia', written over a horizontal line.

FIRMA

Agradecimientos:

Doy gracias a Dios por la vida que me da y porque me ha permitido caminar más allá de lo que en algún momento soñé cuando era niño.

Agradezco a mis padres por todos sus desvelos y quebrantos, creo que hoy se cumplen sus anhelos. Este trabajo también es logro de ellos.

Agradezco a mis queridos maestros formadores, sin su ayuda, difícilmente hubiese aprendido muchos conceptos y teorías que estaban ocultos a mi entendimiento. Y muchas lecciones en el ámbito personal y profesional. Sé que en un tiempo futuro serán muy importantes en mi vida.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca de doctorado que me brindó y al proyecto CONACYT-54583 con el tema “Desarrollo de modelos de física de reactores para el diseño y optimización de combustible de reactores nucleares avanzados”.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) porque me ha permitido ser parte de ella. Me llevo muchas cosas de mi querida universidad. Espero que sus valores y enseñanzas de honestidad, trabajo, valor, dedicación, entre algunas otras, me acompañen siempre en cualquier lugar.

Agradezco a los diferentes institutos de investigación que me proporcionaron los medios para que pudiese realizar los cálculos de este trabajo. Especialmente a la Agencia Internacional de Energía Atómica, al Laboratorio Nacional de los Álamos y al Comisariado de Energía Atómica de Saclay, Francia; en especial al grupo de trabajo TRIPOLI.

Le dedico mi trabajo a:

María Socorro

Melisa

Gregorio

Susana

Mis hermanos

Mis sobrinos

Índice

Índice de Figuras	iii
Índice de Tablas	v
RESUMEN.....	1
INTRODUCCIÓN	3
1 PROSPECTIVA DE LOS REACTORES AVANZADOS.....	5
1.1 Reactores nucleares avanzados.....	6
1.2 Ciclo termodinámico del GFR.....	11
2 MÉTODO MONTE CARLO Y CÓDIGOS DE CÓMPUTO	17
2.1 Método Monte Carlo	17
2.1.1 Historia del método de Monte Carlo	17
2.1.2 Conceptos básicos del método Monte Carlo	17
2.1.3 Algoritmo de simulación Monte Carlo.....	21
2.1.4 Método de Monte Carlo para transporte de partículas.....	22
2.1.5 Cálculo de la criticidad.....	26
2.1.6 Ventajas y desventajas	28
2.2 Código MCNPX	28
2.3 Código TRIPOLI-4.....	30
2.4 Condiciones de frontera.....	32
3 CÁLCULOS DE QUEMADO DE COMBUSTIBLE	35
3.1 MCNPX-C90	35
3.2 TRIPOLI-4-D	36
3.3 Parámetros de control de quemado.....	37
3.4 Validación homogéneo-heterogéneo	39
3.5 MCNPX-C90 y TRIPOLI-4-D resultados de quemado de combustible	40
4 MODELOS DE COMBUSTIBLE	51
4.1 Modelos de ensamble de combustible.....	51
4.2 Composición del combustible	51
4.3 Modelo 1: Arreglo de varillas de combustible	52
4.4 Modelo 2: Ensamble de bloque hexagonal con dispersión de esferas.....	55
4.5 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible	58
4.6 Parámetros de seguridad.....	62
4.6.1 Coeficiente de reactividad por variación de la temperatura del combustible.	62
4.6.2 Coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante	64
4.6.3 Coeficiente de reactividad por expansión térmica de los materiales	66
5. DISEÑO DEL NÚCLEO DEL REACTOR.....	71
5.1 Determinación del tamaño axial del reflector.....	71
5.2 Selección del material reflector	73
5.3 Diámetro equivalente del núcleo del reactor	75
5.4 Altura activa del núcleo del reactor y ajuste de reflector axial	78
5.5 Configuración del núcleo.....	81
6 MODELOS SIMPLIFICADOS DE ENSAMBLE DE COMBUSTIBLE Y NÚCLEO DEL REACTOR	85
6.1 Mezcla homogénea de combustible.....	85
6.2 Modelos de ensamble de combustible	86

6.2.1	Resultados ensamble de combustible en medio infinito	86
6.2.2	Resultados ensamble de combustible con reflector axial.....	87
6.3	Modelos simplificados del núcleo	89
CONCLUSIONES		93
ANEXO A.....		95
BIBLIOGRAFIA.....		105

Índice de Figuras

Figura 1.1 Evolución tecnológica de reactores nucleares	5
Figura 1.2 Diagrama del ciclo de potencia del reactor nuclear GFR	9
Figura 1.3 Modelo del ciclo de potencia del reactor nuclear GFR	13
Figura 1.4 Ventana principal del simulador del ciclo de potencia GFR	15
Figura 2.1 Ejemplo de función de densidad de probabilidad, $p(x)$	20
Figura 2.2 Función de distribución, $c(x)$, obtenida de la integración de la función densidad de probabilidad.....	21
Figura 2.3 Trayectoria aleatoria de una partícula a través de un medio.....	23
Figura 2.4 Dirección de la partícula en coordenadas esféricas (θ , ϕ)	24
Figura 2.5 Ángulos locales de dispersión de la partícula	25
Figura 3.1 k_{inf} en función del tiempo de irradiación de los modelos heterogéneo y homogéneo de ensamble de combustible	40
Figura 3.2 k_{inf} en función del tiempo de irradiación, modelo de ensamble de combustible en medio infinito	42
Figura 3.3 Variación de la densidad atómica del U-235 en función del tiempo de irradiación	43
Figura 3.4 Variación de la densidad atómica del U-238 en función del tiempo de irradiación	43
Figura 3.5 Variación de la densidad atómica del Pu-239 en función del tiempo de irradiación...	44
Figura 3.6 Variación de la densidad atómica del Pu-241 en función del tiempo de irradiación...	44
Figura 3.7 Inventario de masas consumidas en los isótopos de combustible en 300 días de irradiación.....	45
Figura 3.8 Variación de la densidad atómica del Np-237 en función del tiempo de irradiación ..	46
Figura 3.9 Variación de la densidad atómica del Np-239 en función del tiempo de irradiación ..	46
Figura 3.10 Variación de la densidad atómica del Am-241 en función del tiempo de irradiación	47
Figura 3.11 Variación de la densidad atómica del Am-243 en función del tiempo de irradiación	47
Figura 3.12 Inventario de masas de actínidos producidos	48
Figura 3.13 Variación de la densidad atómica del Cs-137 en función del tiempo de irradiación.	49
Figura 3.14 Variación de la densidad atómica del Nd-148 en función del tiempo de irradiación	49
Figura 3.15 Variación de la densidad atómica del Xe-135 en función del tiempo de irradiación	50
Figura 3.16 Inventario de masas de productos de fisión	50
Figura 4.1 Descripción geométrica del Modelo 1 (MCNPX)	54
Figura 4.2 Descripción geométrica del Modelo 1 (TRIPOLI-4).....	54
Figura 4.3 Descripción geométrica de la zona de combustible del Modelo 2 (MCNPX).....	57
Figura 4.4 Vista frontal del ensamble de combustible Modelo 2 y celda básica de combustible (TRIPOLI-4).....	57
Figura 4.5 Fracciones de volumen y de masa en el ensamble.....	59
Figura 4.6. Factor de multiplicación efectiva en frío y en caliente para los dos modelos	60
Figura 4.7 Exceso de reactividad por unidad de metal pesado	62
Figura 4.8 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible	63
Figura 4.9 Variación de k_{eff} en función del cambio de la densidad del refrigerante	65
Figura 4.10 Casos calculados en los cuales se considera la expansión volumétrica del combustible	67

Figura 4.11 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible considerando dilatación térmica de los materiales	69
Figura 5.1 Factor de multiplicación efectivo k_{eff} en función del espesor axial del reflector para un ensamble de combustible con condición de reflexión lateral.....	72
Figura 5.2 Ganancia de reactividad por cada cm adicional de reflector axial	73
Figura 5.3 Cálculo de criticidad con diferente reflector axial.....	74
Figura 5.4 Cálculos de criticidad para modelos del núcleo desnudo, en función del diámetro equivalente	76
Figura 5.5 Cálculos de criticidad en función del diámetro equivalente, configuración de núcleo desnudo y con reflector	77
Figura 5.6 Ganancia de reactividad por cada cm adicional de reflector axial	79
Figura 5.7 Factor de multiplicación efectiva para diferentes alturas activas y espesores de reflector	80
Figura 5.8 Configuración disposición radial del núcleo del reactor; PZ=0; TRIPOLI-4.....	82
Figura 5.9 Vista lateral del núcleo del reactor; PX=0; MCNPX.....	83
Figura 5.10 Vista lateral del núcleo; PY=0; MCNPX.....	83
Figura 6.1 Modelos heterogéneo y homogéneo de ensamble de combustible; MCNPX.....	87
Figura 6.2 Modelos de ensamble de combustible homogéneo y heterogéneo con reflector axial superficies de flujo y corriente; MCNPX.....	89
Figura 6.3 Modelo simplificado del núcleo del reactor con una composición de combustible 20% Pu en la mezcla de metal pesado; PZ=0; TRIPOLI-4	91
Figura 6.4 Modelo combinado simplificado del núcleo del reactor tipo ANULAR.....	92
Figura 6.5 Modelo combinado simplificado del núcleo del reactor tipo TRIANGULAR; PZ=0; TRIPOLI-4	92
Figura A1 Posiciones relativas de los productos de varios procesos nucleares en la carta de núclidos	100

Índice de Tablas

Tabla 1.1 Propiedades termodinámicas del ciclo GFR	14
Tabla 1.2 Balance termodinámico del ciclo y por componente	15
Tabla 3.1 Características físicas del ensamble de combustible 71 cm de altura activa	38
Tabla 3.2 Valores de quemado para un periodo de irradiación de 300 días para el modelo de ensamble homogéneo	38
Tabla 3.3 k_{inf} como una función del tiempo de irradiación, modelo de ensamble de combustible en medio infinito	41
Tabla 4.1 Densidades de los isótopos de la mezcla de combustible	52
Tabla 4.2 Características de la celda básica del Modelo 1	53
Tabla 4.3 Características de la Microcelda y la celda básica del Modelo 2.....	56
Tabla 4.4 Inventario de volúmenes y masas de los diferentes componentes de los modelos de ensamble de combustible	58
Tabla 4.5 Factor de multiplicación efectiva de los modelos de ensamble de combustible.....	59
Tabla 4.6 Reactividad por unidad de masa del material fisible en el ensamble.....	61
Tabla 4.7 Cálculo del coeficiente de reactividad por temperatura del combustible (efecto Doppler) para el Modelo 1 a diferentes temperaturas	63
Tabla 4.8 Cálculo del coeficiente de reactividad por temperatura del combustible	64
(efecto Doppler) para los modelos 1 y 2	64
Tabla 4.9 Cálculo del coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante en el sistema ensamble de combustible Modelo 1	65
Tabla 4.10 Dimensiones dilatadas del combustible	66
Tabla 4.11 Dimensiones dilatadas del encamisado.....	67
Tabla 4.12 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible considerando dilatación térmica de los materiales	68
Tabla 5.1 Cálculos de criticidad para un ensamble de combustible variando el espesor axial de reflector	72
Tabla 5.2 Resultados de criticidad para núcleo del reactor desnudo en MCNPX y TRIPOLI-4..	76
Tabla 5.3 Criticidad para modelos con variación de altura de combustible activo y espesor de reflector	79
Tabla 5.4 Criticidad para modelos de núcleo con diferentes alturas de combustible activo.....	80
Tabla 6.1 Composición de los modelos homogéneos de combustible y reflector	86
Tabla 6.2 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible en medio infinito	87
Tabla 6.3 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible con reflector axial	88
Tabla 6.4 Cálculos de flujo y corriente de neutrones de los modelos de ensamble de combustible con reflector axial, homogéneo y heterogéneo.....	88
Tabla 6.5 Cálculos de criticidad para modelos simplificados de núcleo del reactor GFR; TRIPOLI-4	90
TABLA A1 Serie de isótopos a los que le da seguimiento TRIPOLI-4-D	101

RESUMEN

Este trabajo presenta una contribución al análisis neutrónico para el diseño del combustible y del núcleo de un Reactor Rápido Enfriado por Gas (GFR: Gas-Cooled Fast Reactor) actualmente en desarrollo a nivel internacional. El trabajo está dividido en seis capítulos.

La introducción contiene la información general del GFR como reactor de cuarta generación; sus principales características, los materiales considerados en su diseño, sus parámetros técnicos, sus ventajas y sus principales usos como fuente generadora de energía. Así mismo, se justifica el objetivo del presente trabajo.

El primer capítulo presenta una breve descripción de los reactores que integran la cuarta generación de reactores nucleares. En este mismo capítulo se realizó un estudio de balance termodinámico de primera y segunda ley de la termodinámica del ciclo de potencia del reactor GFR; para realizar los cálculos, se consideró una potencia térmica de entrada de 600 MWth. Según los resultados obtenidos se constató que el rendimiento termodinámico de este reactor es alto ~50%.

En el segundo capítulo se hace una descripción del método Montecarlo, base matemática de los códigos MCNPX¹ y TRIPOLI-4²; tales códigos se utilizaron para realizar las simulaciones de los modelos del combustible y del núcleo del reactor. En este mismo capítulo se hace una descripción de ellos.

En el tercer capítulo se realizaron cálculos de quemado para un modelo homogéneo de ensamble de combustible, con el objetivo de comparar los códigos MCNPX-CINDER90 en adelante MCNPX-C90 y TRIPOLI-4-DEPLETION, en adelante TRIPOLI-4-D. Los cálculos de quemado se realizaron utilizando 2 métodos de cálculo: 1) CSADA método de cálculo de segundo orden utilizado en los cálculos de quemado en ambos códigos; y 2) EULER simplificado como método de primer orden utilizado únicamente en el código TRIPOLI-4-D. Se validó el código TRIPOLI-4-D, desarrollado por el Comisariado de Energía Atómica de Saclay, Francia, el cual se aprendió a usar en una estancia de investigación de tres meses en el Centro Nuclear de Saclay, Francia. Con los resultados de los cálculos de quemado se escribió un artículo³ en la revista Annals of Nuclear Energy. Según los resultados existen pequeñas diferencias en los cálculos neutrónicos de combustible con las características de un medio multiplicador de neutrones con espectro de energía rápido. TRIPOLI-4-D utilizando un método de primer orden tarda la mitad de tiempo que MCNPX-C90 con una diferencia de aproximadamente 300 pcm (por cien mil) en el factor de multiplicación infinito. Además de que TRIPOLI-4-D quema ligeramente

¹ Ch. D. Harmon, II, R. D. Busch, J. F. Briesmeister, R. A. Foster, "Criticality Calculations with MCNP; A Primer", Los Alamos National Laboratory, New Mexico.

² J. P. Both, A. Mazzolo, Y. Pénéiau, O. Petit, B. Roesslinger, "User manual for Version 4.3 of the TRIPOLI-4 Monte-Carlo method particle transport computer code", DEN/DM2S/SERMA/LEPP/CEA/Saclay 91191Gif-sur-Yvette CEDEX FRANCE.

³ Ricardo Reyes-Ramírez, Cecilia Martín-del-Campo, Juan Luis Francois, Emeric Brun, Erick Dumonteil, Fausto Malvagi, "Comparison of MCNPX-C90 and TRIPOLI-4-D for fuel depletion calculations of a Gas-cooled Fast Reactor", Annals of Nuclear Energy, 37, 2010.

más rápido el combustible. En lo que se refiere a la evolución de los materiales, existe una perfecta concordancia en los resultados obtenidos con los códigos y métodos de cálculo empleados.

En el cuarto capítulo se presentan cálculos comparativos de factor de multiplicación de dos propuestas de ensamble de combustible: 1) Arreglo de varillas de combustible y 2) Matriz inerte con dispersión de esferas de combustible. Según los resultados, el modelo basado en varillas de combustible hace mejor uso del metal pesado. Se seleccionó el modelo de varillas como modelo base para el diseño del núcleo del reactor. Se realizaron cálculos de coeficientes de reactividad y se verificó que el efecto que causa un incremento de temperatura del combustible es negativo. El efecto que causa una disminución de densidad en el refrigerante es positivo, y el efecto en la reactividad, que causa la expansión térmica de los materiales, es negativo y muy pequeño. El efecto combinado es negativo.

En el quinto capítulo se presentan cálculos de diseño del núcleo del reactor. En base a los resultados, se propuso un núcleo de ~304 MWth, con una configuración de 78 ensambles de combustible, 84 ensambles de reflector, 7 ensambles de control, con una altura activa de 100 cm y 60 cm de espesor de reflector axial, un diámetro equivalente de 207 cm. Se seleccionó el carburo de zirconio como reflector.

En el sexto capítulo se muestran los cálculos de modelos simplificados de ensamble de combustible en medio infinito y de ensamble de combustible con reflector axial. Se realizaron comparaciones de resultados y se constató que es factible hacer cálculos de criticidad de modelos simplificados de combustible en medio infinito. Se observaron diferencias importantes entre los modelos homogéneo y heterogéneo cuando se realizaron cálculos de ensamble combustible con reflector axial. Para estudiar qué comportamiento se tiene en los valores de factor de multiplicación cuando se consideran diferentes composiciones en las regiones del núcleo del reactor, se realizaron cálculos de criticidad de modelos simplificados del núcleo con una sola composición de combustible y modelos combinando 3 composiciones de combustible que corresponden a tres enriquecimientos de plutonio (18% Pu, 20% Pu y 22% Pu) en la mezcla de metal pesado.

Al final se presenta la sección de conclusiones de este trabajo, derivadas de los resultados obtenidos de las diversas pruebas realizadas a modelos del combustible y del núcleo del reactor.

INTRODUCCIÓN

El reactor rápido enfriado por gas (GFR: Gas-cooled Fast Reactor) es uno de los seis conceptos de reactores que formarán la IV generación de reactores nucleares. Este reactor fue seleccionado de un grupo de más de 100 prototipos en el Foro Internacional de Reactores de Generación IV (IV Generation International Forum, GIF). Los reactores de cuarta generación están enfocados principalmente en metas de: economía, seguridad, confiabilidad, sustentabilidad, resistencia a la proliferación y protección física. Seis conceptos de reactores nucleares han sido seleccionados para integrar la cuarta generación de reactores nucleares: el reactor de muy alta temperatura (Very High Temperature Reactor, VHTR), el reactor de agua super-crítico (Supercritical Water Reactor, SCWR); el reactor de sales fundidas (Molten Salt Reactor, MSR), el reactor rápido enfriado por plomo (Lead-cooled Fast Reactor, LFR); el reactor rápido enfriado por sodio (Sodium-cooled Fast Reactor, SFR) y el reactor GFR del cual trata este trabajo.

El reactor GFR presenta características termodinámicas que lo ubican como una propuesta muy atractiva en cuanto a la generación de energía. Está concebido para operar a altas temperaturas y alcanza un rendimiento termodinámico cercano al 50%. Puede ser usado para generar energía eléctrica, producir hidrógeno, desalar agua de mar y para generar calor de proceso que se puede utilizar en la industria en general.

En cuanto a características neutrónicas, el GFR está concebido para operar en el espectro de energías de neutrones rápidos, por lo tanto no necesita material moderador pues las principales tasas de reacción suceden a altas energías. Usa gas helio como refrigerante, debido a que es un gas inerte que no genera mezclas explosivas, y como es un gas no sufre cambio de fase y por lo tanto no genera vacíos en el refrigerante que alteren la reactividad del sistema. Sin embargo tiene la desventaja de poseer una baja inercia térmica. Debido a que está concebido para operar a alta temperatura y en un ambiente de alta irradiación, se han realizado estudios para determinar qué tipo de materiales se adaptan mejor a las condiciones de operación del reactor. Las características principales que deben cumplir los materiales a usarse en el diseño del GFR son: a) Una temperatura de fundición alta, resistentes al deterioro por ambientes de alta irradiación y alcanzar un quemado mayor a 5% FIMA⁴ (Fissions Per Initial Heavy Metal Atom). Los materiales cerámicos son los que mejor se adaptan a las condiciones de operación del GFR.

Este tipo de reactor operará un ciclo cerrado de combustible, y por lo tanto, se tiene considerado construir una planta de tratamiento de combustible irradiado dentro de las instalaciones de la planta de potencia GFR. El combustible gastado puede provenir de este reactor o de otro tipo de reactores, el reprocesado consiste en extraer los productos de fisión y reutilizar el combustible fértil y los actínidos junto con una fracción de uranio fresco que corresponde con la fracción de productos de fisión extraída; y a las pérdidas de actínidos; por tal motivo se considera que este reactor es un incinerador de actínidos.

Se espera que este tipo de reactor alcance su madurez tecnológica alrededor del año 2030. Tal situación contribuirá a producir energía eléctrica y/o calor de proceso para producir diversos

⁴ U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and The Generation IV International Forum, "A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems", December (2002).

satisfactores que contribuirán al incremento de la calidad de vida de diversas poblaciones del mundo sin perjudicar de manera significativa al medio ambiente.

La investigación de los reactores de Generación IV está siendo desarrollada con las teorías más avanzadas de la física de reactores. En particular el reactor GFR presenta retos muy importantes en cuanto al modelado y los cálculos de física de reactores. A diferencia del combustible de los reactores térmicos de gas (HTGR), el combustible de los GFR tendrá una densidad muy alta de metales pesados (uranio, plutonio y actínidos menores), debido a que la densidad de potencia de los GFR será del orden de 10 veces mayor que la densidad de potencia de los HTGR⁵. Debido a esto los GFR no podrán utilizar el mismo tipo de combustible que los HTGR, en donde las partículas de material físil están dispersas en grafito (combustible TRISO). De esta manera el combustible tipo TRISO no es adecuado para los reactores rápidos de gas porque el grafito tiende a hincharse cuando se somete a un alto flujo de neutrones rápidos, además de que el grafito modera a los neutrones, situación que no se desea tener en un reactor rápido.

Por otro lado, uno de los requisitos neutrónicos que se pide a un reactor convertidor de neutrones rápidos para que tenga un factor de conversión igual a uno, es decir que produzca la misma cantidad de material físil que la cantidad de material que consume, es que tenga una baja absorción parásita de neutrones. Por lo tanto se debe de diseñar el núcleo del reactor con un combustible adecuado para un espectro de neutrones rápidos y para lograr una conversión efectiva⁶. Además se requiere que este tipo de reactores sean capaces de reciclar el plutonio y los actínidos menores para tener un mayor aprovechamiento del combustible y una reducción en la cantidad de combustible gastado que tendrá que disponerse de manera definitiva. Todo esto, aunado a que se cuenta con muy pocos datos experimentales, hace que el modelado, diseño y análisis del combustible de los reactores GFR sea un tema amplio para investigación de frontera.

Por lo anterior, en la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional Autónoma de México, un grupo de investigadores decidimos realizar este trabajo, cuyo objetivo es desarrollar modelos basados en la física de reactores nucleares para diseñar el combustible y el núcleo de un reactor tipo GFR.

⁵ Meyer, M.K., 2004. Report on the Feasibility of GFR Fuel for Minor Actinide Management. Rev. 0, 8/30/04. Argonne National Laboratory, USA.

⁶ Khalil, H., 2004. The Gas-Cooled Fast Reactor System. America's Nuclear Energy Symposium 2004, Miami Beach, Florida, U.S.A.

1 PROSPECTIVA DE LOS REACTORES AVANZADOS

El uso pacífico de la energía nuclear comenzó aproximadamente en el año 1950 con los reactores prototipo, los cuales forman la primera generación de reactores nucleares de fisión controlada, entre los que destacan los reactores de uranio natural moderados por grafito que operaron principalmente en Francia y en el Reino Unido. La segunda generación la componen los reactores comerciales, los cuales iniciaron operación en los años 70's del siglo pasado y que actualmente están en operación comercial (BWR, PWR, CANDU y los reactores Rusos entre algunos otros). Actualmente se encuentran en etapa de licenciamiento los reactores que forman parte de la tercera generación de reactores, algunos ya han sido construidos y se encuentran en operación comercial (ABWR), otros se encuentran en construcción (EPR), y algunos otros ya han sido licenciados EPR, algunos otros se encuentran en etapa de licenciamiento (ESBWR, PBMR, GT-MHR entre otros). Aunque la mayoría de los reactores de tercera generación aún no se encuentran en operación comercial, ya se está trabajando en el desarrollo de la tecnología de los reactores que formarán parte de la cuarta generación, los cuales tienen las metas comunes relacionadas a la economía, confiabilidad, sustentabilidad, resistencia a la proliferación, protección física y disponibilidad. La **Figura 1.1** muestra un esquema de la evolución de los reactores nucleares.

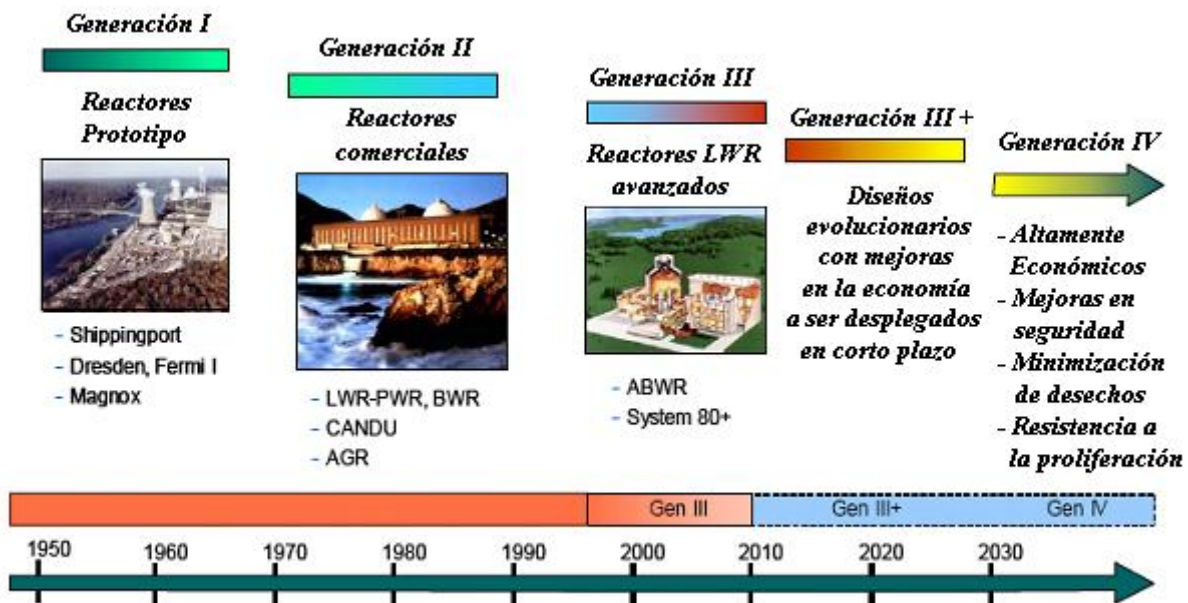


Figura 1.1 Evolución tecnológica de reactores nucleares⁷

En este trabajo nos vamos a enfocar principalmente en la generación IV de reactores nucleares de la cual seis conceptos fueron seleccionados de un grupo de 100 propuestas de reactores nucleares.

⁷ Akira OMOTO, "Nuclear Power", DIR-NENP, IAEA, 2007.

1.1 Reactores nucleares avanzados

Los sistemas de energía nuclear de generación IV son esperados para ofrecer mejoras significativas sobre los sistemas actuales en las áreas de economía, seguridad y disponibilidad, sustentabilidad, resistencia a la proliferación y protección física. El Foro internacional de Cuarta Generación evaluó más de 100 conceptos de sistemas, identificando los seis más prometedores y esbozó la investigación y desarrollo necesarios para llevarlos a la comercialización en el año 2030. Los miembros del Foro Internacional de Reactores Generación IV (GIF), están colaborando en la investigación y desarrollo necesarios para desarrollar sistemas de energía nuclear generación IV, más allá de lo que se está llevando a cabo actualmente por la industria.

A continuación se da una breve descripción de cada uno de los seis conceptos de reactores nucleares que forman parte de la generación IV y que actualmente se encuentran en etapa de desarrollo.

Reactor de Muy Alta Temperatura (Very High Temperature Reactor - VHTR) opera en el espectro de neutrones térmico y un ciclo abierto de combustible de uranio (un solo paso). Se espera que su madurez tecnológica sea posible alrededor del año 2020 y está destinado para la producción de electricidad de alta eficiencia y/o para producción de hidrógeno mediante procesos termoquímicos sin emisiones de carbono, pues tiene una temperatura de salida del refrigerante arriba de los 1000°C. Su eficiencia termodinámica es alrededor del 50%. El diseño de referencia tiene una potencia de 600 MWth con un refrigerante de helio y combustible de uranio-grafito, ya sea en bloques prismáticos o en lecho de esferas (pebble bed). El VHTR requiere avances significativos en investigación y análisis del desempeño del combustible y en materiales sometidos a altas temperaturas, así como en aleaciones de alta temperatura como cerámicas reforzadas con fibras y materiales compuestos. Los procesos termoquímicos de separación de agua y de electrólisis a alta temperatura necesitan aún bastante investigación e integración al sistema.

Reactor Enfriado con Agua Supercrítica (Supercritical Water Cooled Reactor - SCWR) opera en un espectro de neutrones térmico y utiliza un ciclo abierto de combustible de uranio. El ciclo de potencia utiliza como refrigerante agua a altas presiones y temperaturas (25 MPa y 550°C) operando arriba del punto crítico del agua para alcanzar una eficiencia termodinámica cercana al 44%. La planta de referencia tiene una potencia de 1700 MWe. Este sistema se considera que será económico por su alta eficiencia y su simplificación (equipos y componentes). Está destinado principalmente a la producción de electricidad, aunque se podría considerar la producción de hidrógeno utilizando el proceso de electrólisis a alta temperatura. El SCWR requiere investigación y desarrollo en materiales y estructuras para ser utilizados en un ambiente corrosivo de alta temperatura del agua supercrítica, así como en aspectos de operación y seguridad relacionados con el diseño propio de la planta.

El Reactor Rápido Enfriado por Plomo (Lead Cooled Fast Reactor - LFR) opera en un espectro de neutrones rápido y utiliza un ciclo cerrado del combustible, para un manejo eficiente de los actínidos y para la conversión del uranio fértil. Utiliza metal líquido eutéctico de plomo o de plomo-bismuto como refrigerante. El reactor es enfriado por circulación natural y tendrá una potencia entre 120 y 400 MWe, con una temperatura del refrigerante entre 550°C y 800°C,

dependiendo del éxito en la investigación y desarrollo de los materiales. El LFR se caracteriza por una alta sustentabilidad debido a su ciclo de combustible cerrado y una buena resistencia a la proliferación y protección física, debido al empleo de un núcleo de vida larga, de entre 15 y 30 años. La seguridad es mejorada por el uso de un refrigerante relativamente inerte. Está destinado principalmente a la producción de electricidad y de hidrógeno y al manejo de actínidos con una muy buena resistencia a la proliferación. El LFR necesita desarrollar investigación de combustibles y materiales sometidos ambientes de corrosión y altas temperaturas, y a lo relacionado a la tecnología del reciclado de combustible.

Reactor Rápido Enfriado por Sodio (Sodium Cooled Fast Reactor – SFR) funciona en un espectro de neutrones rápido y un ciclo cerrado del combustible, para un manejo eficiente de los actínidos y para la conversión del uranio fértil. Con este sistema se pretende tener un ciclo de combustible con reciclado total de actínidos, mediante dos opciones:

- a) Reactor de tamaño intermedio (150 a 500 MWe) con refrigerante de sodio y un combustible de aleación metálica de zirconio con uranio, plutonio y actínidos menores. El proceso de reciclado se basa en un proceso pirometalúrgico, ubicado en una instalación contigua al sistema SFR.
- b) Reactor de tamaño mediano a grande (500 a 1500 MWe) con refrigerante de sodio y un combustible de óxidos mixtos de uranio y plutonio (MOX). El proceso de reciclado se basa en un proceso acuoso avanzado, ubicado en una instalación central sirviendo a varios reactores.

La temperatura de salida del refrigerante es de 550°C para los dos tipos de reactores. El SFR se caracteriza por una alta sustentabilidad debido a su ciclo de combustible cerrado y un excelente desempeño en el manejo de los actínidos. Está destinado principalmente a la producción de electricidad y al manejo de actínidos. El SFR requiere investigación y desarrollo en la simplificación de la planta y la demostración de la tecnología del reciclado del combustible.

Reactor de Sales Fundidas (Molten Salt Reactor - MSR) opera en un espectro de neutrones de térmico a epitérmico y utiliza un ciclo cerrado del combustible, para la utilización eficiente del plutonio y de los actínidos menores. El combustible del MSR es una mezcla líquida "circulante" de fluoruros de sodio, zirconio y uranio. La planta de referencia es de 1000 MWe. El sistema opera a baja presión (5 atmósferas) con una temperatura de salida del refrigerante de 700°C, mejorando con esto la eficiencia térmica. El MSR se caracteriza por una alta sustentabilidad debido a su ciclo cerrado de combustible y una excelente flexibilidad para la destrucción de actínidos. La economía de este sistema no es muy favorable, debido al gran número de subsistemas para el mantenimiento del combustible y refrigerante. Está destinado principalmente a la producción de electricidad y a la destrucción de plutonio y de actínidos menores. El MSR necesita investigación y desarrollo en sus procesos químicos y en el diseño de la planta.

Reactor Rápido Enfriado por Gas (Gas-cooled Fast Reactor – GFR) opera en el espectro de neutrones rápido y un ciclo cerrado de combustible, para un manejo eficiente de los actínidos y para la conversión del uranio fértil. El combustible puede ser del tipo de ensamble de barras o placas, o de bloques prismáticos. La potencia del diseño de referencia es de 288 MWe. El GFR se caracteriza por una alta sustentabilidad debido a su ciclo de combustible cerrado y un excelente desempeño en el manejo de los actínidos. Está destinado principalmente a la producción de electricidad y manejo de actínidos, aunque también es muy buen candidato para producir hidrógeno de manera económica. El GFR necesita investigación y desarrollo en

combustibles y materiales sometidos a alta temperatura en un espectro rápido de neutrones, así como en lo relacionado a la tecnología del reciclado de combustible. También requiere investigación en el diseño de la planta en aspectos relacionados con la seguridad en condiciones de operación fuera de lo normal.

De los seis conceptos de reactores nucleares que forman la generación IV, en este trabajo se seleccionó al reactor GFR para desarrollar investigación en lo relacionado al modelado del combustible y del núcleo del reactor desde un punto de vista neutrónico y es por tal motivo que se ahondará más en la descripción de este concepto de reactor nuclear.

Las características principales del GFR como planta de generación de energía eléctrica son: Un ciclo directo de turbinas de gas de 600 MWth de potencia, usa gas helio como refrigerante, funciona en el espectro de energías de neutrones rápidos, ciclo cerrado de combustible, plutonio como material fisible del combustible, no necesita moderador y tiene un rendimiento termodinámico cercano al 50%, entre algunas otras características.

En la **Figura 1.2** se muestra el esquema del reactor GFR con las siguientes características de operación:

- Potencia de 600 MWth
- Presión de operación 9 Mpa
- Temperatura de operación del refrigerante de 850 °C
- Caída de presión en el núcleo de 0.05 Mpa
- Temperatura en condiciones de accidente (1600 °C)
- Temperatura de fundición de los materiales (>2000 °C)
- Densidad de combustible > 5 g/cm³
- Resistencia a la radiación 80 dpa (asegura un quemado > 5% de metal pesado).

En lo referente al arreglo del núcleo del reactor, existen varias propuestas de tipos de combustible, aunque varios investigadores coinciden en los materiales empleados para el núcleo: combustible, encamisados, estructuras de soporte, reflector y refrigerante⁸. Como combustible se han propuesto mezclas de materiales cerámicos de uranio más plutonio más carbono o nitrógeno, a tales mezclas se les denominó carburos o nitruros⁹. Para las estructuras de soporte del combustible y los encamisados existen propuestas de compuestos cerámicos, basados también en carburos y nitruros¹⁰.

⁸ Yutai Katoh, Thak-Sang Byun and Randy K. Nanstad, "Materials Fabricated For Futurix-Mi Experiment, Gen IV Nuclear Energy Systems, U.S. DEPARTMENT OF ENERGY, ORNL May, (2005).

⁹ F. Carre, "Gas Cooled Fast Reactor (GFR)", Generation IV R&D Scope Meeting Boston, Massachusetts, USA, June 25, (2002).

¹⁰ K. D. Weaver, E. E. Feldman, J. Gan, W. F. Gale, M. J. Driscoll, K. Czerwinski, "Gas-Cooled Fast Reactor (GFR) FY04 Annual Report", GENIV Nuclear Energy Systems, September 30 (2004).

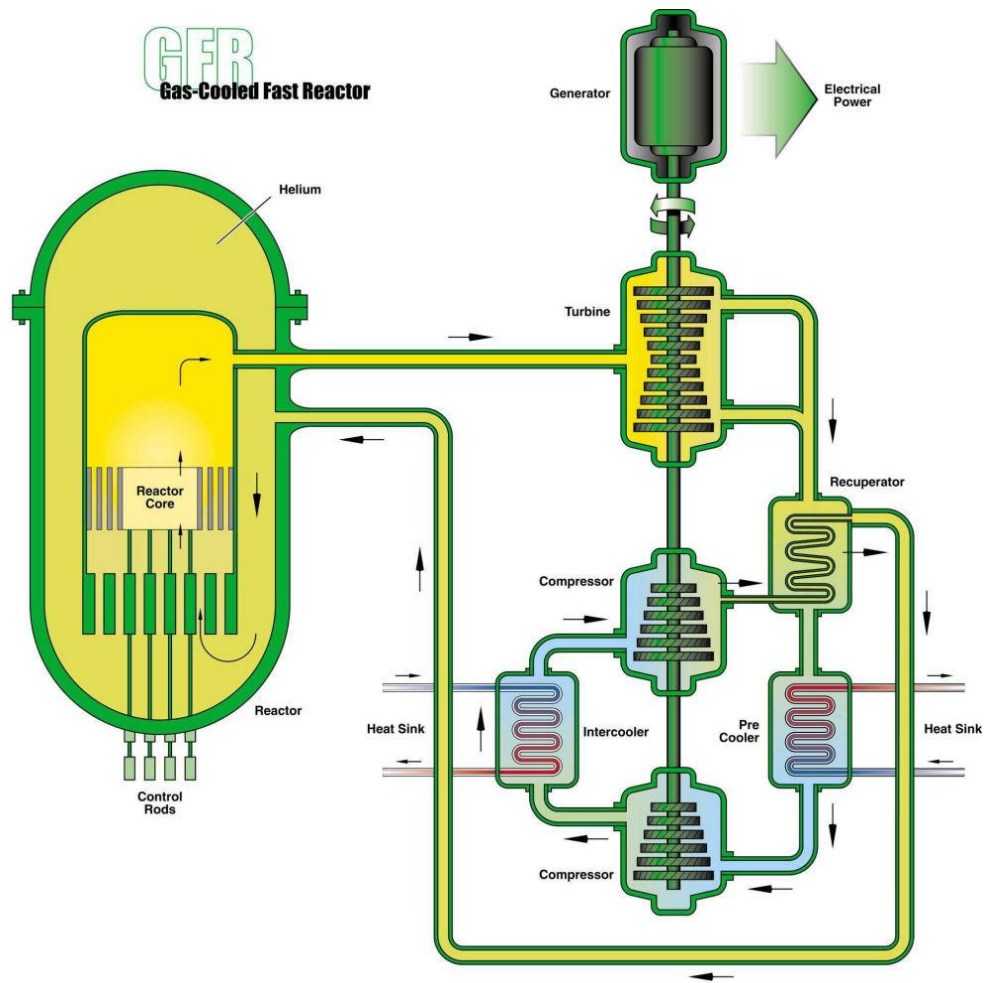


Figura 1.2 Diagrama del ciclo de potencia del reactor nuclear GFR¹¹

Para el reflector se proponen compuestos también basados en materiales cerámicos de silicio y zirconio (Zr_3Si_2), (carburo de zirconio (ZrC), carburo de silicio (SiC), además de carbono (C) y acero, aunque no con las mismas características de los materiales que se usarán como soporte y encamisado del combustible, ya que estos materiales están expuestos a condiciones más severas que el reflector en lo que concierne a temperatura, presión e irradiación¹².

Como material refrigerante se emplea gas helio, ya que es inerte, no reacciona con los materiales componentes del núcleo y por lo tanto no genera mezclas explosivas, además alcanza altas temperaturas (850 °C) necesarias para mejorar la eficiencia del ciclo¹³.

¹¹ Cathy J. Barnard, Technical integrator, "Generation IV Nuclear Energy Systems Program", External Release Idaho National Laboratory, September 2007.

¹² R. Jacqmin, "Gas-cooled Reactor Core Physics R&D Activities in France", Gen-IV Reactor Physics Workshop, p. 21, CEA, Chicago, April 30, (2004).

¹³ P. Hejzlar, V. Dostal, M.J. Driscoll, P. Dumaz, G. Poullennec and N. Alpy. "Assessment of Gas Cooled Fast Reactor with Indirect Supercritical CO_2 Cycle", Nuclear Engineering and Technology ICAPP 2005, Vol. 38, p. 110, 112 (2005).

Existen varias propuestas en lo referente al arreglo geométrico de los ensambles de combustible y a la disposición del núcleo del reactor. Modelos de dispersión de esferas, arreglos de varillas de combustible, arreglos hexagonales de ensambles de placas paralelas, y arreglos en lecho de esferas^{14 15}.

En este trabajo, se seleccionaron: el arreglo de varillas de combustible y el modelo de dispersión de esferas de combustible para ser estudiados.

En base a la información encontrada en los diferentes documentos de la tecnología del reactor GFR acerca de las propiedades de los diferentes materiales que pueden ser utilizados en los componentes del núcleo, los materiales propuestos son:

1. Una mezcla de carburo de uranio más plutonio para el combustible;
2. Una mezcla de carburo de silicio para el encamisado y estructuras de soporte;
3. Una mezcla de carburo de zirconio como reflector;
4. Gas helio como refrigerante.

Los cálculos neutrónicos de los modelos de ensamble de combustible considerados, se realizaron con los códigos de cómputo MCNPX y TRIPOLI-4.

De acuerdo a los resultados obtenidos¹⁶ se seleccionó el *Modelo 1* de ensamble de combustible de varillas para construir modelos del núcleo del reactor y determinar sus dimensiones axiales y radiales. Con este modelo y en base a diferentes pruebas variando las dimensiones axiales y radiales de las distintas partes que componen el núcleo (principalmente combustible y reflector) se determinaron las dimensiones del núcleo del reactor.

Tanto las dimensiones del reactor como las características de composición del combustible serán ajustadas mediante cálculos de quemado del combustible en un proceso iterativo hasta llegar a definir neutrónicamente un reactor que pueda tener una longitud de ciclo de 18, 24 o más meses y que proporcione la potencia requerida.

Para los cálculos de quemado de combustible se utilizarán los códigos de cómputo acoplados a MCNPX (CINDER90) y para Trípoli4 (TRIPOLI-4-Depletion). Con los cálculos de quemado de combustible se pueden conocer las diferentes etapas de quemado de combustible y conocer los materiales o isótopos presentes en el mismo, como cantidades de material fértil, físil, transuránicos y venenos.

¹⁴ Ph. Martin, M. Tourasse, N. Chauvin, Ph. Brossard, D. Warin, “Progress in Fuels for Fast Reactors”, OECD/NEA, IEMPT-9, september 26-29, 2006, Nîmes, France.

¹⁵ K. D. Weaver (INEEL), T. Y. C. Wei (ANL), E. E. Feldman (ANL), M. J. Driscoll (MIT), H. Ludewig (BNL), T. Marshall (INEEL),” Generation IV Nuclear Energy Systems – The Gas-Cooled Fast Reactor (GFR), Report on Safety System, Design for Decay Heat Removal, September (2003)

¹⁶ Ricardo Reyes R., Cecilia Martín-del-Campo M., Juan Luis Francois L. “Estudio de Ensamblados de Combustible para el Reactor Nuclear GFR”, XIX Congreso Anual de la SNM, Mérida Yucatán, México, del 6 al 9 de Julio 2008.

1.2 Ciclo termodinámico del GFR

En esta sección se muestra el GFR como planta de potencia. Con los valores de sus principales parámetros termodinámicos y sus condiciones de operación se realizó un balance de primera y segunda ley de la termodinámica, con el objetivo de conocer los rendimientos termodinámicos de la planta.

Existen varias propuestas y varios tamaños para el GFR. Existe una propuesta de referencia de 600 MWth¹⁷ de ciclo directo de turbinas de gas, con gas helio como refrigerante; y otra de ciclo indirecto de 2400 MWth¹⁸ que usa helio como refrigerante en el circuito primario y CO₂ supercrítico como sustancia de trabajo en el circuito secundario.

De las dos propuestas mencionadas en el párrafo previo se consideró el modelo de ciclo directo de turbinas de gas para realizar un balance termodinámico del ciclo de potencia. Se conocen sus principales parámetros de operación (propiedades termodinámicas del gas helio como sustancia de trabajo), y los principales componentes de la planta de potencia (reactor, turbina, compresores, intercambiadores de calor y regenerador).

Se realizó el cálculo de las principales propiedades termodinámicas del ciclo (presión, volumen, temperatura, entalpía, entropía y exergía) y con el valor de las mismas, se realizó un balance termodinámico del ciclo, el correspondiente a las leyes de la termodinámica (primera y segunda ley). Con ayuda de un programa de cómputo, se realizó un simulador del ciclo de potencia.

Este reactor describe un ciclo Brayton de turbinas de gas y está compuesto por 7 dispositivos principales: 1. compresor de baja presión, 2. inter-enfriador, 3. compresor de alta presión, 4. recuperador, 5. reactor nuclear (fuente de calor), 6. turbina y 7. enfriador (ver **Figuras 1.3 y 1.4**).

Su ciclo termodinámico consta de 8 estados localizados en puntos intermedios entre un dispositivo y otro, de tal forma que un punto es la salida de un dispositivo y la entrada de otro. Cada estado presenta principalmente 6 propiedades termodinámicas, las que se usaron para realizar el balance de planta del GFR, de las cuales algunas se conocen por las fuentes de información acerca de este tipo de tecnología y las demás se pueden calcular, ya que como se trata de propiedades de estado y la mayoría depende de la temperatura. Unas quedan determinadas por el valor de otras, y otras más se determinan en función del conocimiento del proceso que se realiza. Existen procesos a volumen constante, a presión constante, y procesos adiabáticos y reversibles, entre algunos otros.

La sustancia de trabajo del ciclo es gas helio, el cual es un gas noble e inerte. No reacciona químicamente con los elementos del sistema y por lo tanto no genera mezclas explosivas. Sin embargo tiene la desventaja de tener una pobre inercia térmica, por tal motivo es necesario considerar sistemas activos auxiliares para remoción de calor en algún evento que involucre pérdida de refrigerante.

¹⁷ H. Khalil, "The Gas-Cooled Fast Reactor System", Argonne National Laboratory, United States (2005).

¹⁸ P. Dumaz, P. All'egre, C. Bassi, T. Cadiou, A. Conti, J.C. Garnier, J.Y. Malo, A. Tosello, "Gas cooled fast reactors – Status of CEA preliminary design studies", Direct Nuclear Engineering and Design, March 2007.

Es importante conocer algunos parámetros termodinámicos del helio, como su calor específico a presión y a volumen constante, su masa molecular, su constante particular en lo referente a la constante universal de los gases, y su coeficiente politrópico. A partir de estos datos y aplicados a ecuaciones de estado, junto con los valores de los rendimientos de los equipos, el calor suministrado y los valores máximo y mínimo de presión y temperatura, se calcularon las propiedades termodinámicas del gas en cada estado del ciclo.

Con los cálculos termodinámicos del ciclo de potencia del GFR se conocieron los valores de sus propiedades termodinámicas en cada estado del ciclo. Se conocieron los valores de sus rendimientos termodinámicos (primera y segunda ley de la termodinámica) y se tiene un primer acercamiento a este tipo de tecnología en base a su análisis termodinámico. Con tales valores se conoció que este tipo de reactor alcanza un rendimiento termodinámico cercano al 50%.

Se construyó un simulador utilizando VISUAL BASIC, el cual calcula los valores termodinámicos en cada dispositivo que conforma la planta de potencia y realiza el balance termodinámico del ciclo¹⁹.

Por orden y conveniencia se propone que el ciclo comience a la entrada del compresor de baja presión, a tal punto se le denominó estado 1. De tal estado se conoce únicamente su temperatura de 305 K (32 °C), la mayoría de los cálculos se realizó en grados Kelvin, debido a que son las unidades que se manejan en propiedades termodinámicas como: entalpía, entropía y exergía.

Para calcular las propiedades del estado 1 se conoce la presión máxima y la relación de presiones, por lo tanto se puede conocer la presión 1 ya que la relación de presiones se define como la relación que existe entre la presión máxima y la presión mínima del ciclo, ver las ecuaciones (1.1) y (1.2).

$$RP = p_{\max} / p_{\min} = p_4 / p_1 \quad (1.1)$$

$$p_1 = p_{\min} = p_{\max} / RP = p_4 / RP \quad (1.2)$$

¹⁹ Ricardo Reyes R., Cecilia Martín-del-Campo M., “Simulador del Ciclo de Potencia del Reactor Nuclear Rápido Refrigerado por Gas”, *Simposio LAS/ANS 2007, XVIII Congreso Anual de la SNM, XXV Reunión Anual de la SMSR, Copatrocinado por la AMEE*, Cancún, Quintana Roo, MÉXICO, del 1 al 5 de Julio 2007.

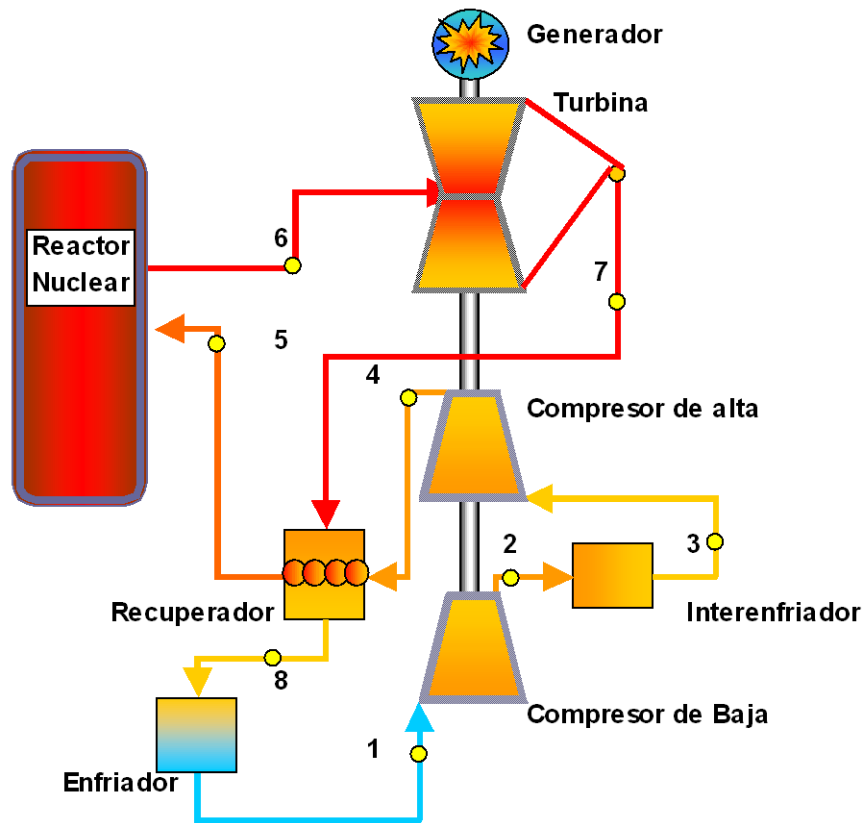


Figura 1.3 Modelo del ciclo de potencia del reactor nuclear GFR

Con las propiedades de temperatura y presión se puede calcular el volumen mediante la ecuación de estado para gases ideales la cual se muestra en la ecuación (1.3).

$$pV = R_{He}T \quad (1.3)$$

De la ecuación (1.3) se conoce la presión y la temperatura, además del valor de la constante particular para el helio, por lo tanto el volumen se puede despejar para conocer su valor.

El cambio de entalpía, se define como el producto del calor específico a presión constante por la diferencia de temperaturas del estado final menos el estado inicial, según lo muestra la ecuación (1.4).

$$\Delta h = h_{final} - h_{inicial} = Cp(T_{final} - T_{inicial}) \quad (1.4)$$

La entropía es función de la temperatura y la presión, la cual por la segunda ley de la termodinámica, se define como: “El grado de desorden del sistema”. Esta propiedad es calculada mediante la ecuación (1.5) con la que se calcula el incremento de entropía de un estado inicial a un estado final después de un proceso.

$$\Delta S = S_{final} - S_{inicial} = Cp \ln(T_{final} / T_{inicial}) - R_{He} \ln(p_{final} / p_{inicial}) \quad (1.5)$$

Por último se tiene la exergía, propiedad que se define como “La capacidad que tiene la sustancia de realizar trabajo”. Esta propiedad se puede calcular con ayuda de la ecuación (1.6).

$$b_i = (h_i - h^o) - T^o(s_i - s^o) \quad (1.6)$$

Siendo b_i , h_i , y s_i la exergía, la entalpía y la entropía en el estado i. Y h^o , T^o , y s^o , la entalpía, temperatura y entropía del ambiente estable de referencia.

En las **Tablas 1.1 y 1.2** se muestran los resultados de las propiedades termodinámicas del ciclo de potencia y del balance del ciclo. En la **Figura 1.3**, se muestra una imagen de la ventana principal del simulador, mediante un programa orientado a objetos (Visual Basic²⁰). Las conclusiones a las que se llega en función de los resultados del ciclo termodinámico se presentan a continuación. Aunque el objetivo principal de esta tesis es encontrar un modelo neutrónico del núcleo del reactor nuclear GFR, esta sección se justifica por el hecho de mostrar los principales componentes del sistema GFR como planta de generación de potencia y sus propiedades termodinámicas.

Tabla 1.1 Propiedades termodinámicas del ciclo GFR

Estado	Flujo másico M (kg/s)	Presión p (MPa)	Volumen v (m³/kg)	Temperatura T (K)	Entalpía h (kJ/kg)	Entropía s (kJ/kg K)	Exergía b (kJ/kg)
1	324	3.46	0.18	305.15	1590.2	20.75	2189.0
2	324	5.58	0.14	375.68	1956.5	20.84	2529.2
3	324	5.58	0.11	305.15	1590.2	19.76	2484.9
4	324	9	0.09	375.68	1956.5	19.85	2825.0
5	324	9	0.18	763.15	3968.5	23.53	3739.8
6	324	8.87	0.26	1123.15	5837.8	25.57	5001.9
7	324	3.46	0.47	791.31	4114.7	25.70	3238.2
8	324	3.46	0.24	403.84	2102.7	22.21	2267.7
AER*	324	0.101	6.13	298.15	1553.9	27.974	0

*Ambiente Estable de Referencia.

²⁰ F.J. Ceballos, *Visual Basic Versión 5 Curso de Programación*, Editorial RA-MA, Madrid, España (1997).

Tabla 1.2 Balance termodinámico del ciclo y por componente

Volumen de control	Q (MW)	W (MW)	B _d (MW)	B _d (%)
Compresor 1		-118.67	8.45	9.61
Interenfriador	-118.67		14.36	16.33
Compresor 2		-118.67	8.45	9.61
Regenerador	-1.5E-10		18.08	20.56
Reactor	605.67		0.00	-
Turbina		558.29	13.12	14.92
Enfriador	-166.0		25.50	28.97
TOTAL	320.96	320.96	87.9	100%
η_I (%)	52.99	<i>Eficiencia Primera Ley</i>		
η_{II} (%)	75.17	<i>Eficiencia Segunda Ley</i>		

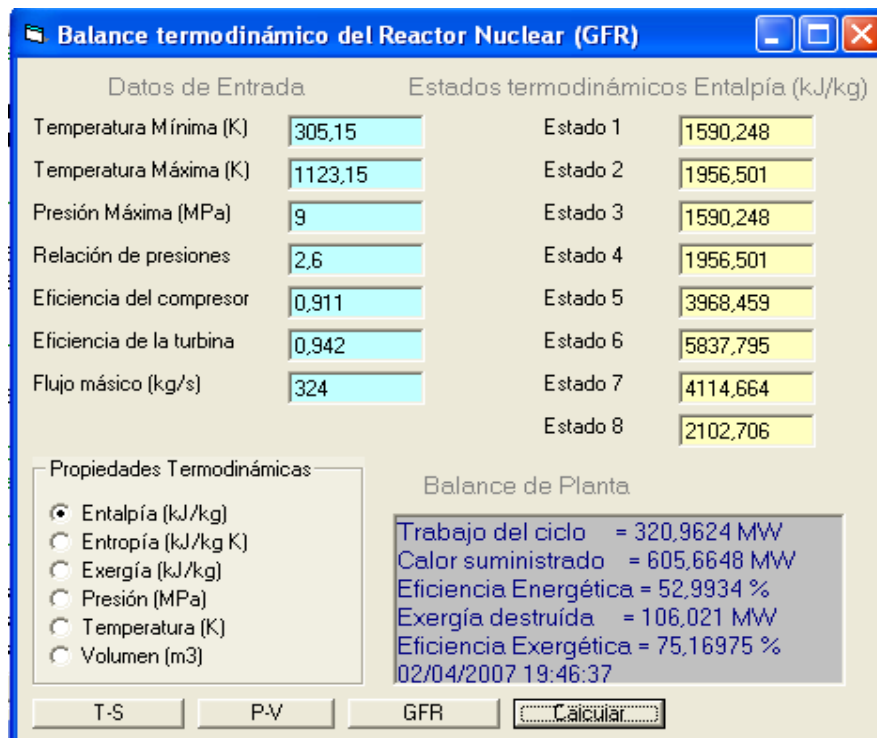


Figura 1.4 Ventana principal del simulador del ciclo de potencia GFR

El simulador que se construyó, es una herramienta que puede acercar a cualquier persona al conocimiento del reactor nuclear rápido enfriado por gas e interactuar con sus propiedades termodinámicas y conocer cómo funciona su ciclo termodinámico.

La eficiencia termodinámica de este reactor es más alta que la de los reactores enfriados por agua con ciclo Rankine por lo tanto la energía del combustible es mejor aprovechada.

El helio a la salida del reactor GFR tiene muy alta temperatura y puede ser aprovechado para la producción de hidrógeno. Esta producción puede hacerse mediante el típico proceso de reformado de metano con vapor de agua, el cual requiere de temperaturas entre 700 y 850 °C. También puede hacerse mediante el proceso termoquímico yodo-azufre, que requiere de una temperatura de 900 °C, el cual se encuentra aún en desarrollo pero tiene la ventaja de no producir bióxido de carbono, lo que hace que se cumplan las metas económicas de este concepto de reactor²¹.

²¹ J.Y. Malo, T. Mizuno, T.Y.C. Wei, C. Mitchell, P. Coddington, “GIF GFR end-of-exploratory phase design and safety studies”, International Conference on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

2 MÉTODO MONTE CARLO Y CÓDIGOS DE CÓMPUTO

Se seleccionaron dos códigos de cómputo: TRIPOLI-4 y MCNPX, para realizar los cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible y del núcleo con el fin de obtener un modelo de configuración del núcleo que se ajuste a las características de operación y que cubra las metas del concepto GFR. Ambos códigos utilizan el método Monte Carlo para realizar los cálculos de criticidad de los modelos a simular. A continuación se presenta una breve descripción este método.

2.1 Método Monte Carlo

Los códigos MCNPX y TRIPOLI-4, usan el método Monte Carlo para realizar los cálculos en aplicaciones nucleares. Cálculos de blindaje, de radiación y análisis físico de neutrones. Monte Carlo es un método estadístico en el que las características de las partículas (por ejemplo el flujo) son estimadas por el muestreo de un gran número de historias de partículas individuales, cuyas trayectorias son simuladas por un calculador numérico.

2.1.1 Historia del método de Monte Carlo

El método de Monte Carlo fue nombrado así por la ciudad de Montecarlo en Mónaco donde se juega “la ruleta”, el juego de azar que genera números aleatorios. Este método surge formalmente en el año 1944.

El empleo del método de Monte Carlo para fines de investigación comenzó con el desarrollo de la bomba atómica en la Segunda Guerra Mundial, en el Laboratorio Nacional de Los Álamos. Von Neumann y Ulam perfeccionaron la técnica y la aplicaron a problemas de cálculo de difusión de neutrones en un material. Alrededor de 1970, los desarrollos teóricos en complejidad computacional comienzan a proveer mayor precisión y relación para el empleo del método Monte Carlo.

Actualmente el método Monte Carlo a veces es usado para analizar problemas que no tienen un componente aleatorio explícito; en estos casos un parámetro determinista del problema se expresa como una distribución aleatoria y se simula dicha distribución. La simulación de Monte Carlo también fue creada para resolver integrales que no se pueden resolver por métodos analíticos, para solucionar estas integrales se usaron números aleatorios. Posteriormente fue utilizado para cualquier esquema que emplee números aleatorios, usando variables aleatorias con distribuciones de probabilidad conocidas.

2.1.2 Conceptos básicos del método Monte Carlo

En el método Monte Carlo se combinan conceptos estadísticos como lo es el muestreo aleatorio, con la generación de números aleatorios y la automatización de los cálculos. Es un

procedimiento matemático que consiste en la generación numérica de series mediante un muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad.

2.1.2.1 Generación de números pseudo-aleatorios

La generación de una buena secuencia de números aleatorios es la base probabilística del método de Monte Carlo. Cada número aleatorio debe ser totalmente independiente de los otros números de la secuencia. Además, dos generadores aleatorios independientes deben proporcionar estadísticamente el mismo valor promedio de salida.

Comúnmente las secuencias de números se obtienen de algún algoritmo y se denominan números pseudo-aleatorios, mostrando así el origen determinista. Este algoritmo debe generar números de una manera realmente estocástica si se quiere simular correctamente los sucesos de interacción que sufren las partículas con la materia. Esto hace que los generadores deban cumplir una serie de características:

- a) Buena distribución; los números obtenidos deben estar uniformemente distribuidos en el intervalo en el que se obtienen $[0, 1]$. Si se toma un sub-intervalo cualquiera, la fracción de números aleatorios que aparece respecto del total tiene que ser la misma para todo sub-intervalo de la misma amplitud.
- b) Al ser generados mediante un algoritmo, siempre tienen un ciclo más o menos largo. En simulaciones con gran cantidad de números aleatorios es importante evitar las correlaciones, por lo tanto estos números no deben ser repetidos.
- c) Se debe reproducir una sucesión de números usados. Si se repite la simulación en las mismas condiciones el resultado debe ser el mismo.

2.1.2.2 Teorema del límite central

El fundamento del método de Monte Carlo, se puede encontrar en el teorema del límite central de la teoría de probabilidades; el cual afirma que si se consideran N variables aleatorias $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$ independientes, cuyas leyes de probabilidad coinciden y, por lo tanto, sus valores medios y su variancia cualquiera que sea el intervalo $[a', b']$, para grandes valores de N se cumple:

$$p(a' \leq \rho_N \leq b') \approx \int_{a'}^{b'} p(x) dx \quad (2.1)$$

Siendo $p(x)$ la densidad de probabilidad y

$$\rho_N = \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3 + \dots + \Psi_N \quad (2.2)$$

Tomando este teorema como base, si se ha de calcular una magnitud m desconocida, entonces su valor medio y variancia serán respectivamente

$$\langle \Psi \rangle = m \quad (2.3)$$

$$V_{\Psi} = b^2 \quad (2.4)$$

Considerando las N variables aleatorias independientes $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$, con la misma distribución que Ψ . La ley de la variable suma ρ_N será aproximadamente normal, con un valor medio Nm y una variancia Nb^2 . Para un intervalo de confianza $\pm 3\sigma$ tenemos que;

$$p\left(m - \frac{3b}{\sqrt{N}} \leq \frac{\rho_N}{N} \leq m + \frac{3b}{\sqrt{N}}\right) = 0.997 \quad (2.5)$$

$$p\left\{\left|\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Psi_i - m\right| \leq \frac{3b}{\sqrt{N}}\right\} \quad (2.6)$$

Este resultado indica que el valor medio de los N valores resultantes del sorteo de la variable Ψ es una estimación del valor m , al tiempo que este error es inversamente proporcional a N , lo cual refiere escoger una muestra de gran tamaño para conseguir un error pequeño.

2.1.2.3 Técnicas de muestreo

El análisis elemental de la teoría de probabilidades nos va a permitir conocer más a fondo el funcionamiento interno de la técnica de Monte Carlo y poder interpretar los resultados obtenidos.

Función de densidad de probabilidad

En el método de Monte Carlo para análisis numérico, se obtienen resultados estadísticos de determinadas variables físicas (energía, posición, etc.) sacando una muestra apropiada de la distribución de probabilidad. Para ello escogemos un conjunto de muestras aleatorias x_i distribuidas de acuerdo con la función de densidad de probabilidad (pdf por sus siglas en inglés: *probability density function*) denominada $p(x)$, tal como se muestra en la **Figura 2.1**. Así, $p(x)dx$ nos indica la probabilidad de que cualquiera x_i quede incluida entre x y $x+dx$. En general, $p(x)$ debe cumplir algunos requisitos:

- Se define positiva ($p(x) \geq 0$).
- Es integrable y normalizada

$$\int_a^b p(x)dx = 1 \quad (2.7)$$

a y b son números reales que cumplen

$$-\infty < a < b < \infty$$

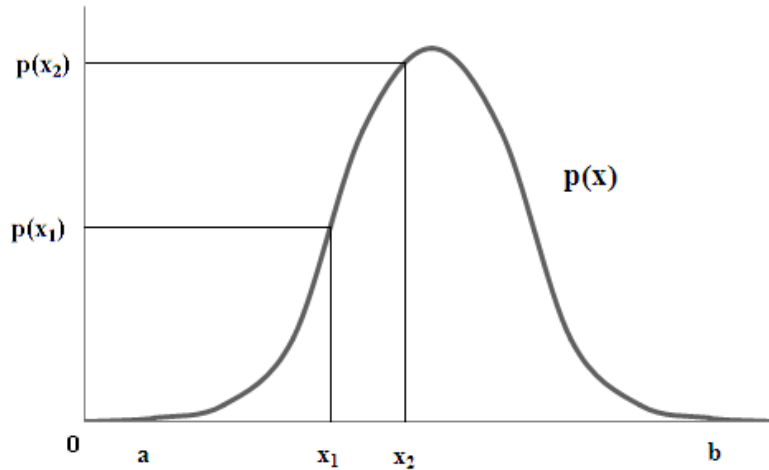


Figura 2.1 Ejemplo de función de densidad de probabilidad, $p(x)$

Función de distribución

Asociada a cada función densidad de probabilidad, $p(x)$, se puede definir la función de distribución, denominada $c(x)$, como la suma de las probabilidades de cada x_i perteneciente al interior de cada intervalo infinitesimal entre a y x ,

$$c(x) = \int_a^x p(x')dx' \quad (2.8)$$

Como la probabilidad de eventos excluyentes es aditiva, $c(x)$ se interpreta como la probabilidad que cualquier x_i dado, sea menor o igual que x . La función $c(x)$ es monótona creciente en x , ya que $p(x) \geq 0$ para todo x . Como se muestra en la **Figura 2.2**, la probabilidad integrada, a lo largo de todos los posibles resultados es la unidad, $c(b)=1$,

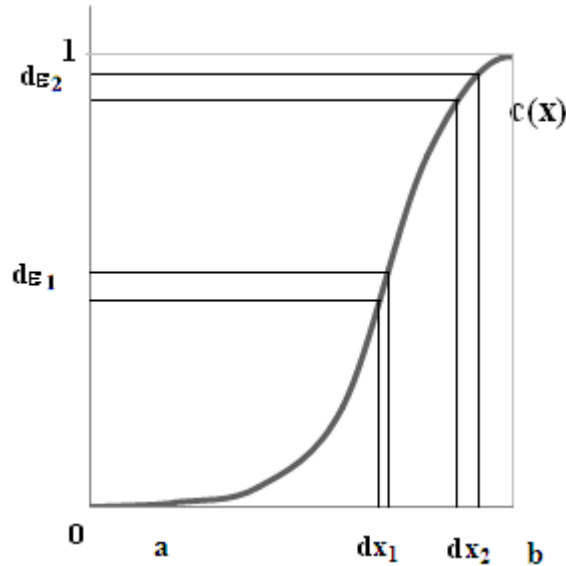


Figura 2.2 Función de distribución, $c(x)$, obtenida de la integración de la función densidad de probabilidad

2.1.3 Algoritmo de simulación Monte Carlo

El algoritmo de Simulación Monte Carlo tiene fundamento en la generación de números aleatorios, se basa en:

- Determinar la o las variables aleatorias y sus funciones de distribución de probabilidad.
- Generar un número aleatorio uniformemente distribuido en $(0,1)$.
- Determinar el valor de la variable aleatoria para el número aleatorio generado de acuerdo a las pdf que se tengan.
- Iterar los dos pasos anteriores tantas veces como muestras se necesiten.
- Calcular la media, desviación estándar, error y realizar el histograma.
- Analizar resultados para distintos tamaños de muestra.

Otra opción para trabajar con el método Monte Carlo, cuando la variable aleatoria no es directamente el resultado de la simulación o se tienen relaciones entre variables, es la siguiente:

- Diseñar el modelo lógico de decisión.
- Especificar las distribuciones de probabilidad para las variables aleatorias relevantes.
- Incluir posibles dependencias entre variables.
- Muestrear valores de las variables aleatorias.
- Calcular el resultado del modelo según los valores del muestreo (iteración) y registrar el resultado.
- Repetir el proceso hasta tener una muestra estadísticamente representativa.

- Obtener la distribución de frecuencias del resultado de las iteraciones.
- Calcular la media, y la desviación.
- Analizar los resultados.

Las principales características a tener en cuenta para la implementación o utilización del algoritmo son:

- El sistema debe ser descrito por una o más funciones de distribución de probabilidad (pdf).
- El proceso de generación de los números aleatorios es importante para evitar que se produzca correlación entre ellos.
- Establecer límites y reglas de muestreo para las pdf; conocer qué valores pueden adoptar las variables.
- Definir cuándo, un valor aleatorio tiene o no sentido para el modelo a simular.
- Estimar con qué error trabajamos, cuánto error podemos aceptar para que una corrida sea válida.
- Paralelización y vectorización: En aplicaciones con muchas variables se recomienda trabajar con varios procesadores paralelos para realizar la simulación.

2.1.4 Método de Monte Carlo para transporte de partículas.

Todos los procesos que involucran el transporte de partículas tienen naturaleza estocástica, es decir, no se puede prever qué tipo de interacción se va a producir en cada momento y lugar sino que solamente se puede asignar una probabilidad a cada uno de los posibles sucesos. Sin embargo, las distribuciones de probabilidad que describen el comportamiento del sistema que queremos estudiar son conocidas. El método de Monte Carlo construye un modelo estocástico, que basándose en las funciones de densidad de probabilidad modela secuencialmente eventos individuales de una variable aleatoria. Teóricamente se siguen todos los eventos o interacciones que sufre cada partícula desde su origen hasta que alcanza una condición terminal, ya sea por absorción, escape, energía de corte, etc. Lo mismo se aplica para todas las partículas creadas en el proceso.

El método de Monte Carlo es considerado el más preciso para simular el transporte de partículas y en particular de neutrones en un medio. Por el alto grado de detalle con el que considera la distribución de energía, las interacciones de los neutrones con los diferentes materiales, la geometría y la trayectoria que siguen los neutrones en el medio.

Para cualquier evento, el método de Monte Carlo genera un número aleatorio a partir de las funciones de distribución de probabilidad, que definirá el tipo de interacción y otros parámetros. Posteriormente, se calcula el valor esperado de todos los eventos simulados. El valor esperado de una o varias variables aleatorias es equivalente al valor de una cantidad física del sistema estudiado.

En cada etapa de la vida de un neutrón, su comportamiento futuro se puede determinar con ayuda de varias pdf's. El tipo de interacción se determina por tasas de secciones eficaces (por ejemplo

σ_s/σ_t es la probabilidad de que una interacción sea una dispersión elástica); el ángulo de dispersión del neutrón (si es dispersado) se obtiene de la sección eficaz diferencial ($\sigma_s(\varphi)$); y así sucesivamente.

Trayectoria de las partículas

La historia de una partícula comienza calculando mediante procesos aleatorios la probabilidad de que se cree un neutrón, de manera análoga se obtiene la energía, la posición y la dirección inicial de la trayectoria de dicho neutrón, tomando en cuenta que éstas son independientes entre sí. Después se simula la distancia libre que recorrerá la partícula antes de interactuar y el tipo de colisión que sufrirá. La energía y dirección de las partículas dispersadas y de los neutrones secundarios son variables aleatorias que también se calculan en la simulación. Este proceso continúa para cada uno de los neutrones que se van generando hasta que se alcanza una condición terminal. Con este método es posible obtener la distribución exacta de los neutrones, siguiendo paso a paso su “trayectoria aleatoria” a través del medio.

Considérese la trayectoria de una partícula que viaja a través de un medio homogéneo, dado que la partícula es dispersada frecuentemente, su trayectoria será en zig-zag, tal como se muestra en la **Figura 2.3**.

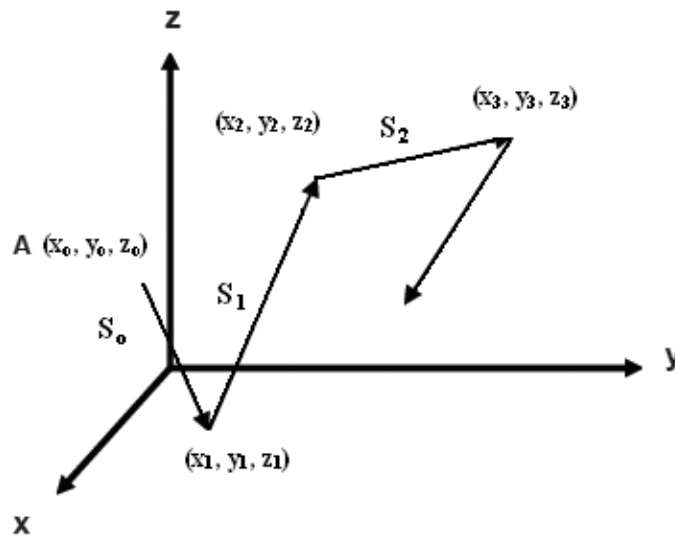


Figura 2.3 Trayectoria aleatoria de una partícula a través de un medio

Para seguir la trayectoria del viaje de la partícula es necesario conocer sus coordenadas espaciales (x_0, y_0, z_0) , las coordenadas esféricas de su dirección (θ, ϕ) y su energía. Estas variables son suficientes para definir el estado α , de la partícula, donde:

$$\alpha \equiv \alpha(x, y, z; E; \theta, \phi) \quad (2.9)$$

El sistema de coordenadas esféricas que definen la dirección de la partícula se muestra en la **Figura 2.4**

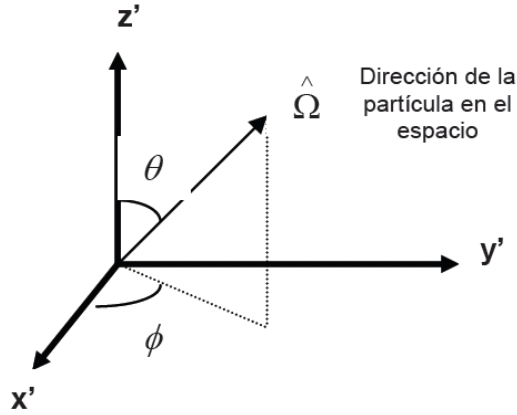


Figura 2.4 Dirección de la partícula en coordenadas esféricas (θ, ϕ)

La trayectoria de una partícula se puede construir de colisión a colisión como una sucesión de estados $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$, donde el i -ésimo estado es:

$$\alpha_i \equiv \alpha_i(x_i, y_i, z_i; E_i; \theta_i, \phi_i) \quad (2.10)$$

En el i -ésimo estado, una partícula tiene las coordenadas espaciales del punto en donde ocurre la colisión y tanto la energía y dirección de la partícula después de dicha colisión. A excepción del estado inicial, cada estado sucesivo está en función del estado previo y de las leyes de dispersión, obedecidas por la partícula en el material de interés. Por ejemplo, el estado α_0 comienza con condiciones iniciales y por muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad, correspondientes a cada tipo de interacción se determina el estado α_1 , y así sucesivamente, construyendo de esta forma la historia de la vida de cada partícula.

Se requiere de procedimientos matemáticos para seleccionar la posición de la siguiente colisión, así como la nueva energía y dirección de la partícula, si es que sobrevive a una colisión.

Considérese una partícula que ha sufrido su i -ésima colisión (una dispersión), las coordenadas del punto de su siguiente colisión se obtienen de la siguiente manera: si s es la longitud de la trayectoria que la partícula viaja hasta su próxima colisión, la probabilidad de que la partícula viaje la distancia s sin tener una interacción es: $e^{-\Sigma_r s}$

La probabilidad de que la partícula sufra una interacción en el intervalo ds es:

$$\Sigma_i ds \quad (2.11)$$

por lo tanto, la probabilidad de que la partícula sufra una interacción entre s y $s+ds$ es:

$$\Sigma_t e^{-\Sigma_t s} ds \quad (2.12)$$

Donde Σ_t es la sección eficaz macroscópica total.

Para completar la simulación de todo sistema físico, es necesario saber la orientación de una partícula después de que sufre una interacción. Esto resulta de establecer un procedimiento para seleccionar aleatoriamente un valor de s (s_i) de la función de probabilidad. Una vez determinado el valor de s_i , las coordenadas de la siguiente colisión se obtienen de:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + s_i (\cos \theta_i \cos \phi_i) \\ y_{i+1} &= y_i + s_i (\cos \theta_i \sin \phi_i) \\ z_{i+1} &= z_i + s_i (\sin \theta_i) \end{aligned} \quad (2.13)$$

De forma similar, la energía de la partícula después de la dispersión se obtiene muestreando la función de probabilidad apropiada.

Por ejemplo en el caso de una interacción que sea una dispersión, los ángulos “locales” después de la dispersión (θ_0 , ϕ) pueden determinarse. θ_0 es el ángulo de deflexión y ϕ es el ángulo azimutal. Se obtiene un número aleatorio ϕ que esté uniformemente distribuido entre $[0$ a $2\pi]$. Finalmente, con los ángulos “locales” (θ_0 , ϕ) se puede determinar la nueva dirección de la partícula, (θ_i , ϕ_i) ver **Figura 2.5**.

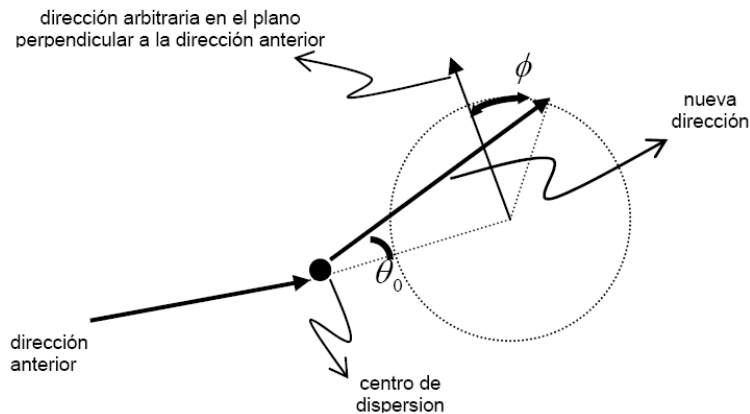


Figura 2.5 Ángulos locales de dispersión de la partícula

Otro ejemplo es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann, para la distribución de energía de los neutrones en equilibrio térmico con los átomos del medio, la cual está dada por:

$$n(E) = cte E^{1/2} e^{(-E/kT)} \quad (2.14)$$

La función $n(E)$ puede ser continua como la definida anteriormente, o puede ser discreta cuando hay un número finito de posibles resultados. Por ejemplo, el espectro de energía de los neutrones de fisión $X(E)$, es una función de densidad de probabilidad continua. Un ejemplo de una función

discreta se puede construir notando que σ_a/σ_t y σ_s/σ_t son las probabilidades de absorción y dispersión en un material, respectivamente, siendo σ_t la sección eficaz microscópica total.

2.1.5 Cálculo de la criticidad

Para los cálculos de criticidad se estima el valor del factor de multiplicación efectiva de neutrones (k_{eff}) cuando se consideran los factores de probabilidad de fuga de neutrones y el factor de multiplicación infinita (k_{inf}) cuando no se consideran las fugas de neutrones. En estos cálculos, un grupo de historias de neutrones se refiere a un ciclo de k (en teoría de reactores se define como una generación de neutrones), donde el factor de multiplicación está dado por la razón del número de neutrones generados en los eventos de fisión que se presentan en el ciclo, entre el número de neutrones cuyas historias son evaluadas en este ciclo (es decir, el número de neutrones al inicio de la generación). El valor esperado del factor de multiplicación (k) se estima promediando sobre los eventos en el ciclo. De la misma forma, también se puede obtener el valor esperado de la probabilidad de fuga o la fracción de eventos que llevan a captura. El error relativo en la estimación de k usualmente disminuye conforme el número de ciclos aumenta, por lo que se necesita un gran número de ciclos para obtener una buena estimación. El factor de multiplicación se estima mediante la siguiente expresión:

$$k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i \quad (2.15)$$

Donde: k es el factor de multiplicación estimado para el sistema de interés, y k_i es el factor de multiplicación estimado en el i -ésimo ciclo. Se hablará de k_{eff} cuando se consideren fugas y de k_{inf} en el caso particular de no considerar las fugas.

El método Monte Carlo se puede resumir en la siguiente secuencia de generación de números aleatorios, entre 0 y 1, usados para producir una distribución aleatoria de cantidades que simulan un modelo:

1. Para la k_{eff} inicial del ciclo, se genera un número aleatorio para determinar la posición inicial del neutrón.
2. Usar un número aleatorio para seleccionar la energía del neutrón.
3. Usar el siguiente número aleatorio para determinar la dirección coseno para el neutrón.
4. Determinar la localización del lugar de la siguiente colisión con el siguiente número aleatorio (la distancia recorrida depende de la sección eficaz total del material).
5. Verificar la nueva localización para ver si la partícula ha escapado (fuga) del sistema. Si esto ha ocurrido, agregar uno al total fugado y regresar al paso 1 y comenzar otra historia con otro neutrón, si no ha fugado, pasar al paso 6.
6. Determinar qué tipo de interacción ha ocurrido en la nueva posición basada en el siguiente número aleatorio. Cada uno de los tipos de interacción tiene una sección eficaz asociada que determina su probabilidad de ocurrencia.

- a) Si la interacción es una dispersión, entonces se determina la nueva energía del neutrón después de la dispersión vía el siguiente número aleatorio. Entonces ir al paso 3 y continuar el seguimiento del neutrón.
 - b) Si la interacción es absorción, ir al paso 1 y comenzar un nuevo seguimiento a otro neutrón en el sistema.
 - c) Si la interacción es fisión, determinar el número de neutrones que se crearon en este evento de fisión y tabular el número total de nuevos neutrones creados en este ciclo k_{eff} . También almacenar la localización del evento de fisión con cada uno de los nuevos neutrones así que se puede comenzar su seguimiento en esta ubicación en el siguiente ciclo.
7. Cuando un grupo dado de historias ha sido completado, la k_{eff} se evalúa dividiendo el número de nuevos neutrones creados en este ciclo entre el número de historias evaluadas en el ciclo.

Repetir el proceso para tantos ciclos como sea requerido hasta obtener una estadística apropiada.

Error relativo

Existe una diferencia entre el valor esperado verdadero de una función f y el valor de la misma función cuando sólo se toma un muestreo de N variables estadísticas independientes (número de partículas a simular). Para saber si nuestra simulación arroja un resultado confiable, es importante tomar en cuenta el error relativo R . Este dato representa la precisión estadística y es calculado por el programa a partir cada historia aleatoria.

El error esperado en $(f)_N$ se estima con la desviación estándar

$$\delta_N^2 = \left\langle \left[f(x_1, x_2, \dots, x_N) - f(x_1, x_2, \dots, \infty) \right]^2 \right\rangle \quad (2.16)$$

Sin embargo como no se tiene un número infinito de variables, el error se estima considerando cada selección aleatoria como un estimador independiente de $(f)_N$, así,

$$\delta_N^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[f(x_i) - \langle f \rangle_N \right]^2 \quad (2.17)$$

La suma de las desviaciones estándar, ϵ_{sum} , es N veces el valor de δ_N^2 . Por consiguiente:

$$\epsilon_{sum} = \sqrt{N} \delta_N \quad (2.18)$$

El error relativo (R) es la media de ϵ_{sum} , de tal manera que:

$$R = \frac{\epsilon_{sum}}{N} = \frac{\delta_N}{\sqrt{N}} \quad (2.19)$$

El error relativo R es proporcional a $1/\sqrt{N}$, es decir, mientras mayor sea el número de partículas simuladas se podrá obtener un resultado más preciso. Para reducir el error relativo en una simulación se puede aumentar N o reducir el valor de δ_N . Sin embargo, el presupuesto limita el incremento que se puede tener en N por el tiempo de cálculo que ocupa. Por esta razón, existen técnicas de reducción de varianza en el código MCNP que se basan en disminuir el valor de δ_N . Al realizar un gran número de historias al azar, aumentará la precisión del valor promedio o de otras cantidades de interés.

2.1.6 Ventajas y desventajas

La ventaja principal del método de Monte Carlo sobre los métodos deterministas es que Monte Carlo representa con mayor exactitud la geometría y los datos nucleares, pues los métodos deterministas requieren de geometrías razonablemente simples y usar aproximaciones de multigrupos de energía para datos de secciones eficaces de neutrones de energía continua, mientras que el método Monte Carlo puede manejar detalladamente geometrías complejas y datos de sección eficaz en el espectro de energía continua, y datos multigrupos también; así como geometrías simples y complejas.

La desventaja del método Monte Carlo es que no proporciona una solución exacta, ya que se basa en cálculos estadísticos, mediante el seguimiento de las historias individuales de los neutrones desde que nacen hasta que mueren. Para disminuir el error se requiere dar seguimiento a un gran número de historias de neutrones, lo que hace que se requiera considerable tiempo de cómputo.

2.2 Código MCNPX

El código MCNPX fue desarrollado por el Laboratorio Nacional de los Álamos en Estados Unidos, desde 1940 por los científicos: Fermi, Richtmyer, Von Newman y Ullan²², hasta la época actual con la versión de 2.6 de MCNPX, que incluye cálculos de quemado utilizando un encadenamiento entre MCNPX y CINDER90. En la sección de apéndices aparece una breve explicación de cómo realiza los cálculos de quemado la nueva versión de MCNPX.

El diseño de los modelos a ser calculados se realiza mediante archivos de entrada donde se colocan los parámetros que definen el diseño de cada modelo a simular. Pues cada modelo es caracterizado por un grupo de propiedades como el volumen, material, geometría. En cada modelo se simulan las interacciones de las partículas las cuales quedan determinadas por los parámetros de control de la simulación.

A continuación se presenta una breve descripción de los principales componentes de un archivo de entrada.

²² Fensin M. L. et al., 2008. Monte Carlo Burnup Interactive Tutorial. Los Alamos National Laboratory. American Nuclear Society. Summer Meeting. pp. 17-61. Anaheim. CA.

Archivo de entrada

El archivo de entrada está compuesto por tres partes o secciones, las cuales se forman con líneas de código y a tales líneas se les denomina tarjetas.

Primera sección, *Tarjetas de celda*. En esta sección se construyen las celdas que componen el diseño a simular. Cada celda está compuesta por un arreglo de números y valores que describen un espacio de volumen físico que es ocupado por un material. El **primer** término de la celda, corresponde al *número de celda* (número entero), el **segundo** término, se refiere al número de material ocupado para llenar el volumen de la celda (entero). El **tercer** término es la densidad del material. El **cuarto** término es un arreglo de números enteros que representan superficies, positivos para superficies externas y negativos para superficies internas y mediante operadores como el operador unión (dos puntos) y el operador intersección (un espacio en blanco) se forma el volumen de la celda. El siguiente término se refiere al universo al que pertenece dicha celda, el universo es una etiqueta que agrupa cierto número de celdas que son parte de un sistema o arreglo de volúmenes que interactúan entre sí y que posteriormente pueden ser ocupados para llenar otras celdas. El **quinto** término puede ser opcional, se usa para llenar el volumen declarado en la celda, según el diseño del modelo a simular esto se hace mediante la orden *Fill*. Por último, se declara la importancia de la celda en relación con la partícula en estudio, con valores de **cerro** cuando se consideran condiciones de escape de las partículas en la celda y de **uno** cuando si adquiere importancia su contribución a evitar la fuga de la partícula en estudio (en nuestro caso el neutrón).

Tarjetas de superficie, en esta sección se construye la geometría de las superficies declaradas en la sección de *tarjetas de celda*. La forma geométrica y las dimensiones de cada volumen se realizan mediante instrucciones que describen formas geométricas, a las cuales únicamente se les colocan sus dimensiones, es decir, radio, altura, longitud y centro geométrico. En este trabajo, se usaron: planos, cilindros, esferas y hexágonos.

Tarjetas de datos, en esta sección se colocan los datos de control de criticidad, que corresponden a la simulación del modelo, los cuales son: el número de ciclos que se correrán; el número de neutrones por ciclo y el brinco, que considera un cierto número de ciclos inactivos que persigue el objetivo de diversificación de las fuentes de neutrones en todo el volumen ocupado por el material combustible. En esta tarjeta, se coloca un valor estimado del factor de multiplicación (k), dicho valor, generalmente es 1, y sirve para comenzar los cálculos de iteración del sistema. El valor final de la estimación del factor de multiplicación es el promedio de los valores del factor de multiplicación de los ciclos activos. Aunque físicamente no se escribe en la tarjeta de datos, el número de historias de neutrones queda implícito, pues es el producto del número de ciclos por el número de neutrones por ciclo, el cual es el tamaño de la muestra.

En esta misma sección de datos, se colocan los valores de las densidades de cada isótopo de los elementos de las mezclas de los materiales del sistema. Aquí también se colocan las extensiones de las librerías donde el programa buscará los valores de las secciones eficaces de los isótopos. Cada valor es buscado con el símbolo denominado Z Aid, el cual es una clave que se forma a partir del número atómico y la masa atómica de cada isótopo. El programa localiza los valores de secciones eficaces de los materiales empleados en los modelos buscando el Z Aid. En el Z Aid se colocan las extensiones de las bibliotecas, para realizar cálculos a diferentes temperaturas por

ejemplo: 92235.17c, 94239.60c, 92238.32c y 94241.31c; son los ZAIIDs de las bibliotecas de secciones eficaces de los isótopos U-235 a 1200 K, Pu-239 a (300 K) bibliotecas ENDF-VI; U-238 a 1200 K, y Pu-241 a 300 K, usando bibliotecas JEFF.

En este trabajo se utilizaron las librerías de secciones ENDF-VI a 300 K y a 1200 K en los cálculos de los modelos de ensamble de combustible y en algunos modelos del núcleo del reactor. En algunos modelos de ensamble de combustible y en modelos de cálculos de quemado del combustible se ocuparon las librerías “cea-2005 versión 4.1”, las cuales se obtuvieron de las librerías JEFF3.1 y JEFF3.2 (JEFF: Joint European Fisión and Fusión), las cuales fueron proporcionadas por el equipo TRIPOLI de SERMA/CEA/SACLAY/FRANCIA.

Para distinguir cada una de las tres secciones de tarjetas descritas anteriormente, se marcan con una línea o tarjeta en blanco. Los comentarios se ponen anteponiendo los caracteres “C” y “\$”. Las condiciones de reflexión en las superficies de los modelos se colocan con el carácter “*”.

Los resultados obtenidos de los cálculos de criticidad realizados de los modelos de combustible y núcleo MCNPX presenta tres valores de confianza: 68%, 95% y 99% de confianza, que corresponden a 1σ , 2σ y 2.6σ respectivamente.

2.3 Código TRIPOLI-4

TRIPOLI-4 es un código de transporte de radiación, el cual ocupa el método Monte Carlo para simular el comportamiento de partículas (neutrones y fotones) en geometrías tridimensionales. Las principales aplicaciones se encuentran en: radioprotección y blindaje, criticidad y seguridad nuclear, diseño de reactores de fisión y fusión e instrumentación nuclear. Puede usar datos de secciones eficaces de las siguientes bibliotecas: JEF2, JEFF3, ENDF-VI, ENDF-VII y JENDL3.3 entre algunas otras²³.

Archivo de entrada

Este tipo de archivo se construye a manera de bucles, es decir se abre una instrucción que codifique determinadas acciones y después se cierra.

Para construir el archivo de entrada se emplean principalmente cinco secciones o instrucciones básicas. Es importante decir que hay más secciones que se pueden emplear para modelar diseños más elaborados.

La primera sección corresponde al diseño geométrico de los volúmenes que contienen los materiales del modelo. Estos volúmenes se pueden construir a partir de la unión e intersección de superficies, o mediante formas geométricas prediseñadas. Esta sección se divide en dos partes,

²³ Petit O. et al., 2008. TRIPOLI-4 Version 6 User Guide. SERMA/LTSD/RT/09-4742/A CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France.

en la primera únicamente se declara el tipo de geometría y se escriben sus dimensiones (instrucción TYPE). En la segunda parte, se declara cada uno de los volúmenes que intervienen en el diseño en función de las formas geométricas declaradas en la primera sección (instrucciones VOLU y COMBI), se declara su ubicación y su jerarquía, ya que cuando se trata de un arreglo de varios volúmenes que se interceptan entre sí, se debe indicar cuál es el volumen que predomina sobre los demás, esto se hace con un operador llamado ECRASE.

En esta sección también se pueden incluir modelos de redes (mallas) y redes de redes, esto se hace mediante el uso de operadores "RESC" y "RESH". El primer operador, construye una malla cuadrada. El tamaño de la malla queda determinado por las dimensiones asignadas a los ejes coordenados, puesto que será el número de repeticiones de la malla o celda básica a lo largo de las direcciones (x, y, z). El operador "RESH" se usa para mallas hexagonales, se aplica lo mismo para las mallas cuadradas, con la diferencia que en este caso, la extensión de la red queda determinada radialmente, es decir, un par de coordenadas toman el mismo valor. Pueden ser por ejemplo: $x=y$ o $y=z$ o $x=z$ quedando una coordenada libre para tomar cualquier valor, el resultado será un arreglo hexagonal determinado por los valores de las coordenadas iguales.

Las redes de redes se forman a partir de la generación de una red que toma como volumen básico o celda de repetición una red construida previamente.

En esta sección también se pueden usar operadores como "MATCH", el cual realiza un recorte a la red que se construya, para que únicamente queden los volúmenes que intervienen en el modelo, ya que cuando se genera una red hexagonal, en el volumen total, aparecen volúmenes cortados no deseados.

Existen otros comandos como "EXCEPT", "REPLACE", "MAILLE", "SOUS-MAILLE" y "GARDE", mismos que se emplean cuando se requiere manipular elementos individuales de los volúmenes de una red, con el objetivo de cambiar el material, el tamaño, o eliminar uno o más elementos de las redes. Para hacerlo se debe considerar el grado de profundidad, que es de cierta manera la trayectoria o camino que permite ubicar al elemento a modificar, ya que en ocasiones tal elemento es parte de una celda o malla del volumen básico de una red que a su vez es parte de otra red, y a esto es a lo que se le llama profundidad.

En esta sección también se introducen los operadores necesarios para el desplegado gráfico del modelo diseñado, lo que sirve como ayuda visual al usuario.

Existe otro tipo operadores que pueden ser empleados en esta sección para la elaboración de los diferentes modelos a simular, sin embargo no se mostrarán debido a que se extendería mucho esta sección.

La primera sección se declara con los operadores GEOMETRIE ... FING.

Sección dos, tiene la función de fijar las condiciones de frontera en las caras exteriores del modelo, existiendo cuatro opciones: escape, reflexión, traslación y coseno. En los cálculos de los modelos de combustible que se han realizado, únicamente se ha trabajado con condiciones de escape, que son las que aparecen por omisión, y con condiciones de reflexión, las cuales deben ser declaradas con los operadores "LIMIT" ... "FIN_LIMIT".

En la sección tres se colocan las densidades de los materiales que ocupan los volúmenes declarados en la sección uno. Se pone el número total de materiales. A cada material se le asigna un nombre y se escribe el número total de núclidos que lo componen, con el valor respectivo de la densidad atómica de cada isótopo de dicho material. Esta sección se declara con los operadores “COMPOSITION” “FIN_COMPO”.

En la sección cuatro se hace una asignación de los volúmenes y los materiales que los componen. A cada material se le asignan vía numérica, los volúmenes que le pertenecen, mediante el arreglo: nombre de la composición del material, número total de volúmenes que tienen dicha composición, número de volumen. Esta sección se declara con las instrucciones: “GEOMCOMP” ... “FIN_GEOMCOMP”.

La quinta sección, es donde se hace la descripción de las fuentes. Aquí se colocan parámetros de distribución espacial de las fuentes, puede ser puntual, factorizada o analítica, incluso se pueden colocar las tres opciones en un mismo modelo. En los modelos que se han diseñado, únicamente se ha usado distribución espacial puntual.

Además de la distribución espacial de las fuentes están su distribución energética y su distribución temporal, las cuales pueden ser calculadas en varias formas, por ejemplo: Dirac, espectro lineal, emisión de banda, espectro de Maxwell, espectro tabulado, espectro analítico, distribución uniforme, distribución angular, densidad uniforme, línea de distribución, densidad analítica y densidad tabulada. Los operadores con los que se declara esta sección son: “LIST_SOURCE 1” ... “FIN_LIST_SOURCE”.

Por último, se tiene la sección de los parámetros de simulación, (en MCNPX se denominaron parámetros de control de criticidad). Aquí se coloca el número de ciclos, el número de neutrones por ciclo, la frecuencia, el límite inferior de energía (1×10^{-11} eV) y la partícula que se considera como partícula de seguimiento (neutrón), número de ciclos inactivos y condición de criticidad. Esta sección se declara con los operadores “SIMULATION” ... “FIN_SIMULATION”.

En las salidas de TRIPOLI-4 los valores de los factores de multiplicación se reportan con una desviación estándar para un 99.8% de confianza correspondiente a 3σ .

Las bibliotecas de secciones eficaces que se emplearon en los cálculos de los modelos de combustible y núcleo fueron las mismas que se utilizaron con el código MCNPX.

2.4 Condiciones de frontera

Para las diferentes simulaciones de los ensambles de combustible y del núcleo se utilizaron diversas condiciones de frontera según la situación física que se deseaba reproducir: condición de reflexión, condición de continuidad o condición de escape.

A continuación se da una breve explicación de las condiciones de frontera utilizadas en los modelos de ensamble de combustible propuestos.

La **condición de reflexión**, considerada como condición de medio infinito, ya que el efecto que causa es como si los ensambles se repitieran infinitamente, y por lo tanto no existiera fuga de neutrones en las superficies que contengan esta condición de frontera. Matemáticamente se muestra en la ecuación (2.20). En MCNPX sólo se le coloca un asterisco a la superficie que se considera como superficie de reflexión y en TRIPOLI-4 se construye un bucle en el cual se introducen las superficies con condiciones de reflexión.

$$\int_{\hat{e}_s \cdot \hat{\Omega} > 0} \hat{\Omega} \psi(r_s, \hat{\Omega}, E) d\hat{\Omega} + \int_{\hat{e}_s \cdot \hat{\Omega} < 0} \hat{\Omega} \psi(r_s, \hat{\Omega}, E) d\hat{\Omega} = 0 \quad (2.20)$$

Donde:

\hat{e}_s : es el vector unitario normal a la superficie que encierra al volumen de estudio, y la cual es considerada como frontera.

$\hat{\Omega}$: es el vector unitario que representa la dirección de los neutrones que atraviesan la superficie con energía comprendida entre E y E+dE.

ψ : es la densidad de flujo angular la cual se define como el producto de la velocidad de los neutrones con energía cinética E relativa al sistema de laboratorio por la densidad neutrónica la cual está en función de la posición, la dirección y la energía $n(r, \hat{\Omega}, E)$.

El producto de la dirección de los neutrones, por la densidad de flujo angular de los mismos, se define como la corriente angular:

$$j(r, \hat{\Omega}, E) = \hat{\Omega} \psi(r, \hat{\Omega}, E) \quad (2.21)$$

La ecuación (2.20) representa la suma de las corrientes de neutrones angulares que atraviesan la superficie de frontera, lo que dice esa ecuación es que la suma cero hace una corriente nula, es decir los neutrones que salen del sistema (el primer término de la ecuación (2.20), el producto punto de la normal a la superficie por la dirección de los neutrones es mayor que cero, por lo tanto se consideran partículas que están saliendo del volumen) son los mismos que los que entran al sistema (el producto punto es menos que cero, por lo tanto, los neutrones están entrando al sistema) por lo tanto no hay fugas.

La **condición de continuidad** es definida por la ecuación (2.22), la cual describe que las partículas pueden pasar de un medio a otro, siempre y cuando no se encuentren fuentes distribuidas en la frontera o interfaz.

$$\psi(r_{i^-}, \hat{\Omega}, E) = \psi(r_{i^+}, \hat{\Omega}, E) \quad (2.22)$$

Por último, se tiene la **condición de vacío o condición de escape** la cual se puede definir cuando una frontera separa a un medio material de otro esencialmente vacío, y en el supuesto que no haya superficies entrantes ni fuentes exteriores. La condición matemática que se impone procede del hecho físico de que ningún neutrón ingresa en el medio procedente del exterior es decir, en

cualquier punto de la superficie donde se coloque esta condición de frontera se deberá considerar la ecuación (2.23)

$$\psi(r_s, \hat{\Omega}, E) = 0 \quad \forall \hat{\Omega} \text{ tal que } \hat{\Omega} \cdot \hat{e}_s < 0 \quad (2.23)$$

Se considera que las partículas se pierden cuando abandonan el sistema, esta condición de frontera se introduce en la línea de código, en la sección de las tarjetas de celda (IMP:N=0), para el caso de MCNPX y para TRIPOLI-4 sólo se coloca el nombre de la condición de frontera en el bucle que se construye.

Las condiciones de frontera que se consideran en TRIPOLI-4 son: ESCAPE (por omisión), REFLECTION, TRASLATION y COSIN. En los modelos que se simularon, se consideraron sólo condiciones de escape y reflexión.

3 CÁLCULOS DE QUEMADO DE COMBUSTIBLE

Se realizaron cálculos de quemado para conocer cómo varía la reactividad con el tiempo y la tasa de consumo de material fisible y de formación de transuránicos y productos de fisión.

Para realizar los cálculos de quemado de combustible se hizo uso de los códigos de cómputo MCNPX acoplado a CINDER90 en adelante MCNPX-C90²⁴; y TRIPOLI-4 acoplado a MENDEL²⁵ en adelante TRIPOLI-4-D.

3.1 MCNPX-C90

MCNPX-C90 realiza cálculos de quemado mediante un proceso que involucra cálculos de flujo en estado estable en MCNPX y de quemado en CINDER90. MCNPX realiza cálculos en estado estable para determinar los valores de flujo, de tasas de reacción, la producción de neutrones de fisión (ν) y de energía liberada por fisión (Q), empleando 63 grupos de energía. CINDER90 toma esos valores y realiza los cálculos de evolución del combustible para generar el nuevo número de densidades que se usarán en el siguiente paso de tiempo; MCNPX entonces toma esos nuevos valores de densidades y genera otro grupo de flujos y tasas de reacción. Este proceso se repite hasta el paso final de irradiación especificado por el usuario.

Para realizar los cálculos de quemado MCNPX-C90²⁶ utiliza el método llamado *Promediado de secciones eficaces para la aceleración de quemado* (Cross Section Averaging for Depletion Acceleration, CSADA), el cual es un método que implica un cálculo matemático de segundo orden descrito a continuación:

1. MCNPX realiza cálculos de flujo y tasas de reacción al inicio del paso de tiempo.
2. CINDER 90 toma los valores de flujo y tasas de reacción y realiza cálculos de quemado hasta la mitad del paso de tiempo $[t(i) \rightarrow t(i+1/2)]$ **cálculo predictor**.
3. A la mitad del paso de tiempo son re-calculados los flujos y las densidades de colisión en estado estable.
4. Los nuevos valores de flujo y densidades de colisión son utilizados para realizar el cálculo de quemado sobre el paso de tiempo completo $[t(i) \rightarrow t(i+1)]$ **cálculo corrector**.

La aproximación anterior es verdadera sólo si la forma del flujo varía linealmente entre los dos pasos de tiempo.

²⁴ Hendricks, J.S., et al., 2008. MCNPX 2.6.0 Extensions. Los Alamos National Security, LLC.

²⁵ Tsilanizara, A., Lahaye, S., Brun, E., 2009. Etat du solveur Evolution et les premières vérifications, SERMA/LLPR/RT/09-4640/A, CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette 292, Cedex, France.

²⁶ Ver Apéndice A para mayor información.

3.2 TRIPOLI-4-D

Tripoli-4-D es un código que está siendo desarrollado por el Comisariado de Energía Atómica de Francia y oficialmente aún no existe algún documento que explique la forma en la que este código realiza sus cálculos de quemado. Sin embargo lo que se expresa en este trabajo es lo que se aprendió por la interacción con el grupo de investigadores que están desarrollando dicho código. Es importante hacer la aclaración de que existen muchas cosas que no se conocen acerca de cómo realiza sus cálculos dicho código, tal vez esas dudas queden resueltas cuando aparezca algún documento que exponga paso a paso la forma en que el código funciona. En este trabajo se muestra la información recabada por la experiencia acumulada en tres meses de trabajo.

TRIPOLI-4-D realiza cálculos de flujo y de tasas de reacción en estado estacionario considerando 281 grupos de energía, una diferencia con respecto a MCNPX (63 grupos de energía). Para realizar los cálculos de quemado este código presenta tres alternativas; dos referentes a métodos de segundo orden y una a un método de primer orden:

1. Método de segundo orden CSADA lo mismo que MCNPX-C90
2. Método de MEAN o NEWTON de segundo orden.
3. Método de primer orden EULER EXPLÍCITO

El método CSADA ya fue explicado por lo tanto se pasará directamente a la explicación de los métodos de NEWTON y de EULER EXPLÍCITO, métodos que utiliza TRIPOLI-4-D para realizar los cálculos de evolución del combustible.

Método de MEAN

El método MEAN también es un método de segundo orden el cual se describe a continuación:

1. Se realizan los cálculos de los flujos y las tasas de reacción al comienzo del paso (ϕ_0, N_0).
2. Con los valores calculados en estado estacionario se realizan los cálculos de quemado sobre el paso completo y se obtienen los nuevos valores de flujos y de densidades [t(i)→t(i+1)] (ϕ_1, N_1) (**cálculo predictor**).
3. Con los nuevos valores de flujos y densidades se hace nuevamente el cálculo de quemado sobre el paso completo de tiempo (ϕ^*, N^*) (**cálculo corrector**).
4. Se calcula el valor promedio de las densidades $[(N_1 + N^*)/2]$ resultado de las dos secuencias de quemado y ese valor se usa para los cálculos en el siguiente paso de tiempo.

Método de primer orden EULER explícito.

Se trata de un método de primer orden en donde los cálculos de quemado se realizan en base a la siguiente secuencia de cálculo:

1. Se calculan los valores del flujo y las tasas de reacción en estado estacionario al inicio del paso.

2. Esos valores son usados para realizar los cálculos de quemado sobre el paso de tiempo completo.
3. Se calculan los nuevos valores de flujo y de tasas de reacción para ser usados en los cálculos de quemado del siguiente paso.

3.3 *Parámetros de control de quemado*

Para realizar los cálculos de quemado en cada modelo se debe considerar un grupo de variables físicas particulares a cada modelo de quemado, las cuales son:

El volumen sobre el que se dará seguimiento a la evolución del combustible.

La masa de metal pesado que contiene el volumen en evolución.

La densidad de potencia del volumen en evolución.

La potencia específica del material en evolución.

La potencia que genera el volumen en evolución.

En base a los valores de las características físicas enumeradas, se pueden calcular los valores de quemado en función del tiempo de irradiación. Considerando el volumen ocupado por 271 celdas básicas de combustible y para una altura de combustible activo de 71 cm se tienen los valores que se presentan en la **Tabla 3.1**.

En base a las características físicas del modelo de ensamble de combustible y considerando un periodo de irradiación dividido en 12 pasos de quemado de 25 días por cada paso se calcularon los valores de quemado en función del tiempo de irradiación, tales valores se presentan en la **Tabla 3.2**.

MCNPX-C90 realiza sus cálculos de quemado en base al tiempo de irradiación y TRIPOLI-4-D realiza los cálculos de quemado en base a los valores de energía es por ello que se realizaron los cálculos de los valores de quemado en base a los tiempos de irradiación. Para simplificar las simulaciones se despreció el cambio de masa de metal pesado.

Además de las características físicas que aportan los datos necesarios para que los códigos realicen los cálculos de quemado, se necesitan datos de control de criticidad lo mismo que para los cálculos de transporte (sin considerar la variación en el tiempo). Los parámetros de criticidad que se consideraron se muestran a continuación:

- 4000 neutrones por ciclo;
- 500 ciclos;
- k_{eff} estimada de 1;
- Brinco de 30 ciclos inactivos para la distribución de fuentes de neutrones en todo el material;
- Fuente de neutrones colocada en el centro geométrico del combustible.

Tabla 3.1 Características físicas del ensamble de combustible 71 cm de altura activa

Parámetro	Valor	Unidades
Geometría	Hexagonal	
Apotema	11.16	cm
Lado	12.89	cm
Altura	71	cm
Perímetro	77.34	cm
Área activa	389.86	cm ²
Volumen activo	27680.34	cm ³
Densidad de potencia	100	W/cm ³
Composición del metal pesado	U/Pu (80/20)	% peso
Composición de combustible	HM/C (80/20)	% peso
Masa de metal pesado	66121.53	gramos
Potencia específica	41.86	W/g
Potencia generada	2.768	MW

Tabla 3.2 Valores de quemado para un periodo de irradiación de 300 días para el modelo de ensamble homogéneo

Paso	Tiempo Irradiación (Días)	Masa de metal pesado MTU*	Potencia MWth	quemado MWd/MTU
0	0	0.0661	2.77	0.0
1	25	0.0661	2.77	1046.6
2	50	0.0661	2.77	2093.1
3	75	0.0661	2.77	3139.7
4	100	0.0661	2.77	4186.3
5	125	0.0661	2.77	5232.9
6	150	0.0661	2.77	6279.4
7	175	0.0661	2.77	7326.0
8	200	0.0661	2.77	8372.6
9	225	0.0661	2.77	9419.1
10	250	0.0661	2.77	10465.7
11	275	0.0661	2.77	11512.3
12	300	0.0661	2.77	12558.8

*Toneladas Métricas metal pesado (Metric Tonnes Uranium) involucra los elementos con Z>90

Las bibliotecas de secciones eficaces que se utilizaron en los cálculos de quemado fueron las denominadas cea-2005 versión 4.1, las cuales fueron obtenidas de las bibliotecas JEFF3.1 y JEFF3.2 (JEFF: Join European Fission and Fusion). Las cuales fueron proporcionadas por el grupo de investigadores de TRIPOLI-4 de CEA/SERMA/SACLAY/FRANCIA. Se utilizaron en MCNPX-C90 y en TRIPOLI-4-D.

Se realizaron cálculos de quemado de los modelos homogéneo y heterogéneo de ensamble de combustible, para validar los cálculos del modelo homogéneo. Los cálculos de validación se realizaron únicamente con el código MCNPX-C90 con el método CSADA, y en condiciones en caliente.

Posterior a los resultados de validación se presentan los resultados de cálculos de quemado del modelo homogéneo de ensamble de combustible. Los cálculos fueron realizados en condiciones en caliente (1200 K). En los cálculos de quemado se utilizó el método de segundo orden CSADA tanto en el código TRIPOLI-4-D como en el código MCNPX-C90 y se compararon con el método de primer orden EULER Explícito disponible en el código TRIPOLI-4-D.

Se realizaron cálculos de factor de multiplicación en función del tiempo, y se le dio seguimiento a las concentraciones isotópicas de algunos elementos en el combustible, los cuales se pueden jerarquizar en tres grupos:

1. Los elementos de combustible: se refiere a los isótopos de uranio y plutonio que componen la mezcla de metal pesado.
2. Los actínidos son isótopos que se forman a partir de las capturas de neutrones por el combustible.
3. Los productos de fisión los cuales se forman por las reacciones de fisión.

Del primer grupo de isótopos se le dio seguimiento a los isótopos de U-235, U-238, Pu-239 y Pu-241.

Del segundo grupo se le dio seguimiento a los isótopos de Np-237, Np-239, Am-241 y Am-243.

Del tercer grupo se le dio seguimiento a los isótopos de Nd-148 Cs-137 y Xe-135.

3.4 Validación homogéneo-heterogéneo

Con el objetivo de simplificar los cálculos de quemado de combustible y disminuir el tiempo de cómputo, los cálculos de quemado se realizaron para un modelo homogéneo equivalente. La varilla de combustible, el huelgo, el encamisado y el refrigerante fueron mezclados en una composición homogénea. Se consideraron condiciones de frontera de medio infinito para un modelo de ensamble de combustible con altura activa de 71 cm. La validación de esta representación fue calificada mediante la comparación del factor de multiplicación infinita (k_{inf}) de dos modelos de ensamble, uno homogéneo y el otro heterogéneo, para un periodo de irradiación de 300 días divididos en 7 pasos de quemado para el modelo heterogéneo y 12 pasos de quemado para el modelo homogéneo. Los cálculos se realizaron con el código MCNPX-C90. En la **Figura 3.1** se muestran los resultados obtenidos para cada modelo de ensamble de combustible (heterogéneo y homogéneo).

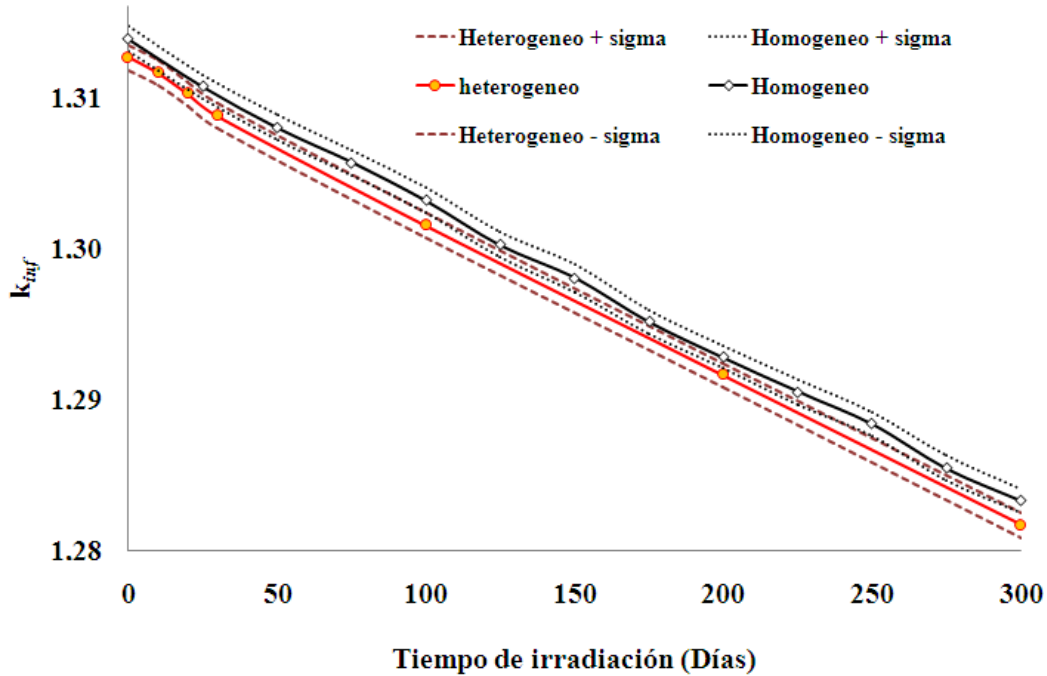


Figura 3.1 k_{inf} en función del tiempo de irradiación de los modelos heterogéneo y homogéneo de ensamble de combustible

Se observa que los factores de multiplicación infinita (k_{inf}) de los modelos heterogéneo y homogéneo son muy similares y que tienen una dependencia lineal con el tiempo de irradiación. Esto significa que los sistemas homogéneos y heterogéneos tienen un espectro muy similar a través de todo el rango de energía para la tasa de reacción “Sección eficaz x flujo” para los isótopos rastreados en los cálculos de evolución. Este resultado era esperado, porque los reactores rápidos tienen un espectro de energía de neutrones que tiene la misma forma que el espectro de energía de neutrones inmediatos. La trayectoria libre media es larga en reactores rápidos, y entonces las tasas de reacción son bastante similares en cálculos homogéneos y en heterogéneos.

3.5 MCNPX-C90 y TRIPOLI-4-D resultados de quemado de combustible

En la **Tabla 3.3** se muestran los resultados de la variación del factor de multiplicación en función del tiempo de irradiación, aplicando los tres métodos de cálculo y utilizando los códigos de cómputo MCNPX-C90 y TRIPOLI-4-D.

Tabla 3.3 k_{inf} como una función del tiempo de irradiación, modelo de ensamble de combustible en medio infinito

Paso	Tiempo irradiación (Días)	Quemado (MWd/MTU)	MCNPX-C90 CSADA		TRIPOLI-4-D CSADA		TRIPOLI-4-D EULER	
			k_{inf}	Sigma* (pcm)	k_{inf}	Sigma** (pcm)	k_{inf}	Sigma*** (pcm)
0	0	0	1.30882	83	1.31044	80	1.31044	80
1	25	1047	1.30569	81	1.30576	86	1.30531	84
2	50	2094	1.30295	83	1.30184	86	1.30104	89
3	75	3141	1.30064	83	1.29911	87	1.29886	80
4	100	4188	1.29813	83	1.29635	87	1.29611	90
5	125	5235	1.29520	83	1.29391	83	1.29423	87
6	150	6281	1.29299	88	1.29153	80	1.29167	81
7	175	7328	1.29012	78	1.28795	87	1.28926	83
8	200	8375	1.28778	75	1.28397	87	1.28649	81
9	225	9422	1.28546	86	1.28099	84	1.28170	83
10	250	10470	1.28335	81	1.27884	91	1.27930	77
11	275	11520	1.28044	81	1.27624	79	1.27735	83
12	300	12560	1.27829	78	1.27469	82	1.27519	82

* 99% de confianza

** 99.8% de confianza

*** 99.8% de confianza

Se observa que existe una diferencia de 162 pcm en los valores iniciales (a cero quemado), y una desviación estándar de 80 pcm en promedio. La diferencia entre los valores k_{inf} a cero quemado cae dentro del rango de error de los dos códigos y los tres métodos de cálculo. Después del tercer paso de quemado (50 días de irradiación) los valores de k_{inf} de TRIPOLI-4-D son menores que los valores de MCNPX-C90; ese perfil de comportamiento continúa el resto del tiempo de irradiación, lo que marca cierta diferencia en los valores de k_{inf} entre un código y otro. Según los resultados: TRIPOLI-4-D quema más rápido que MCNPX-C90. El mismo comportamiento se observa en TRIPOLI-4-D CSADA y TRIPOLI-4-D EULER. EL Código MCNPX-C90 varía linealmente con el tiempo de irradiación y con los valores de quemado, no es el caso de TRIPOLI-4-D. Ver la **Figura 3.2**

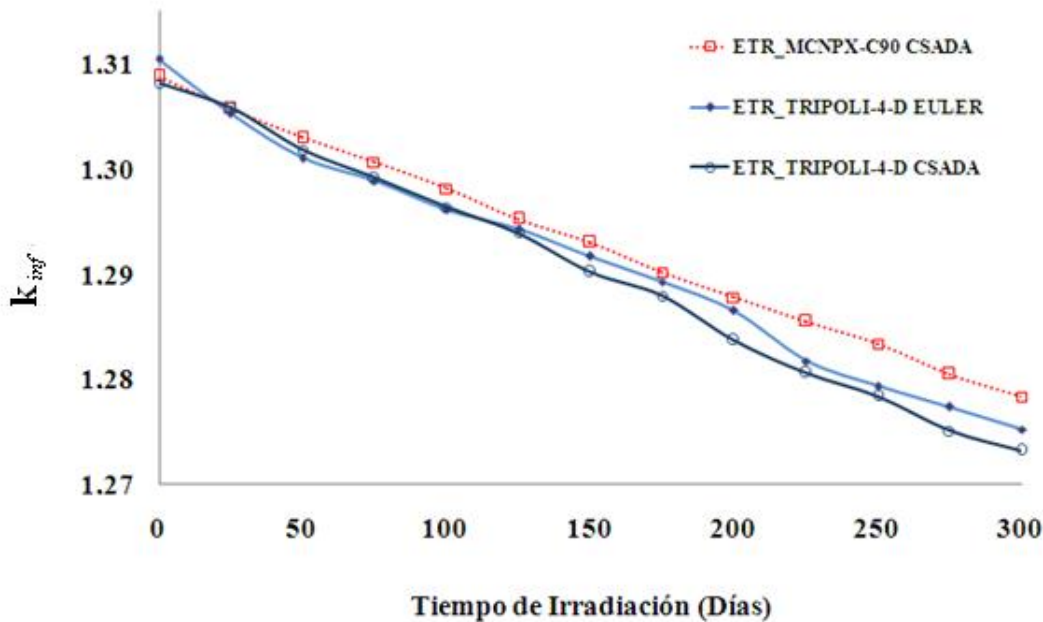


Figura 3.2 k_{inf} en función del tiempo de irradiación, modelo de ensamble de combustible en medio infinito

Las diferencias mayores se encuentran en los 100 últimos días de quemado. Dicha diferencia se puede deber a acumulación de error estadístico.

En lo que corresponde al tiempo de cálculo; MCNPX-C90 CSADA consume 160 horas en realizar los cálculos de quemado; mientras que TRIPOLI-4-D CSADA consume 140 horas y consume 70 horas empleando el método EULER.

TRIPOLI-4-D describe perfiles de comportamiento similares empleando los métodos de primer y segundo orden. Existe una diferencia apreciable en el tiempo de cálculo empleado por los dos métodos ya que se emplea la mitad de tiempo en realizar los cálculos de quemado del mismo modelo de combustible usando un método de primer orden (EULER). MCNPX-describe un comportamiento lineal de mayor regularidad que TRIPOLI-4-D. Desde el punto de vista de rapidez en la realización de los cálculos de quemado, TRIPOLI-4-D tiene ventaja sobre MCNPX-C90.

A continuación se presentan los resultados de la variación de las concentraciones isotópicas en el combustible en función del tiempo de irradiación. En párrafos anteriores se hizo una clasificación de los diferentes isótopos a los cuales se les dio seguimiento. Los primeros resultados son para los isótopos de combustible U-235, U-238, Pu-239 y Pu-241. Ver las **Figuras 3.3, 3.4, 3.5 y 3.6.**

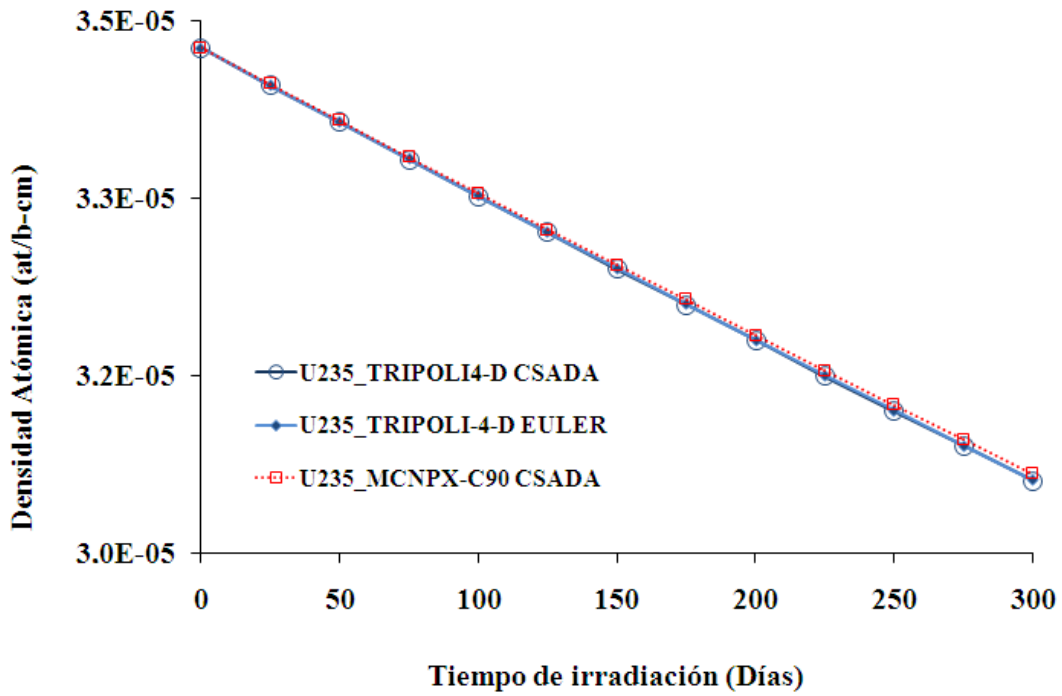


Figura 3.3 Variación de la densidad atómica del U-235 en función del tiempo de irradiación

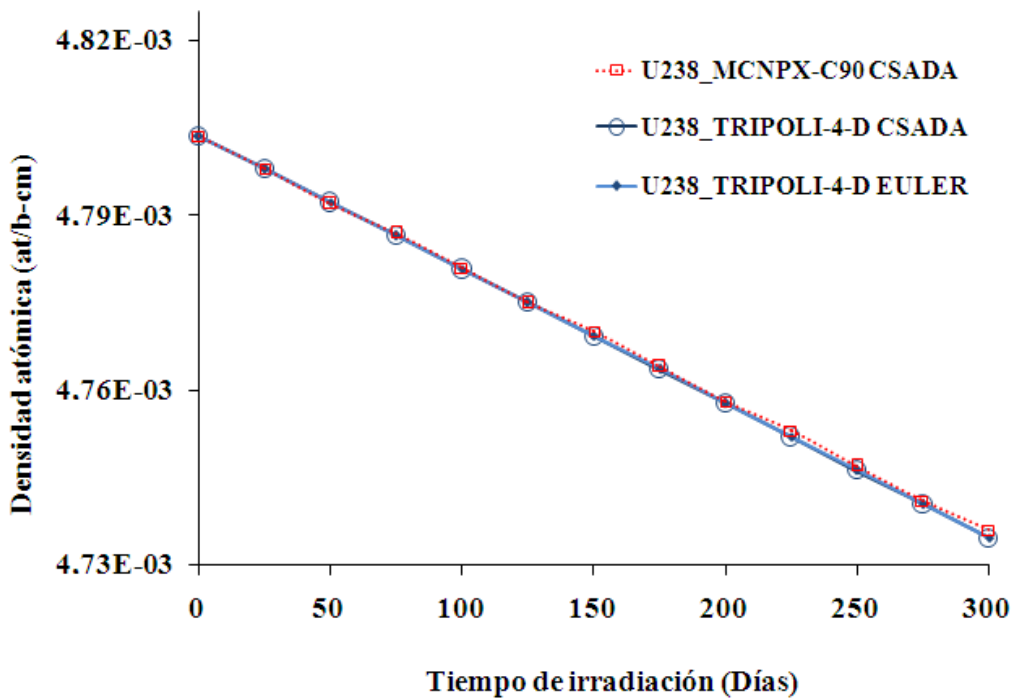


Figura 3.4 Variación de la densidad atómica del U-238 en función del tiempo de irradiación

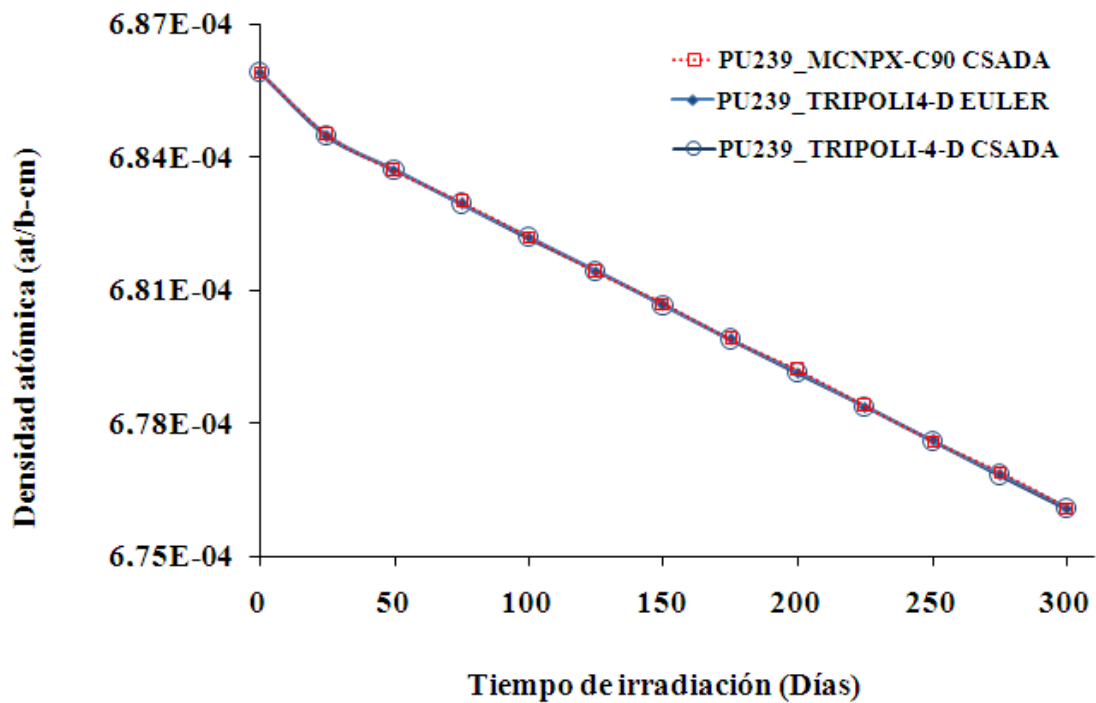


Figura 3.5 Variación de la densidad atómica del Pu-239 en función del tiempo de irradiación

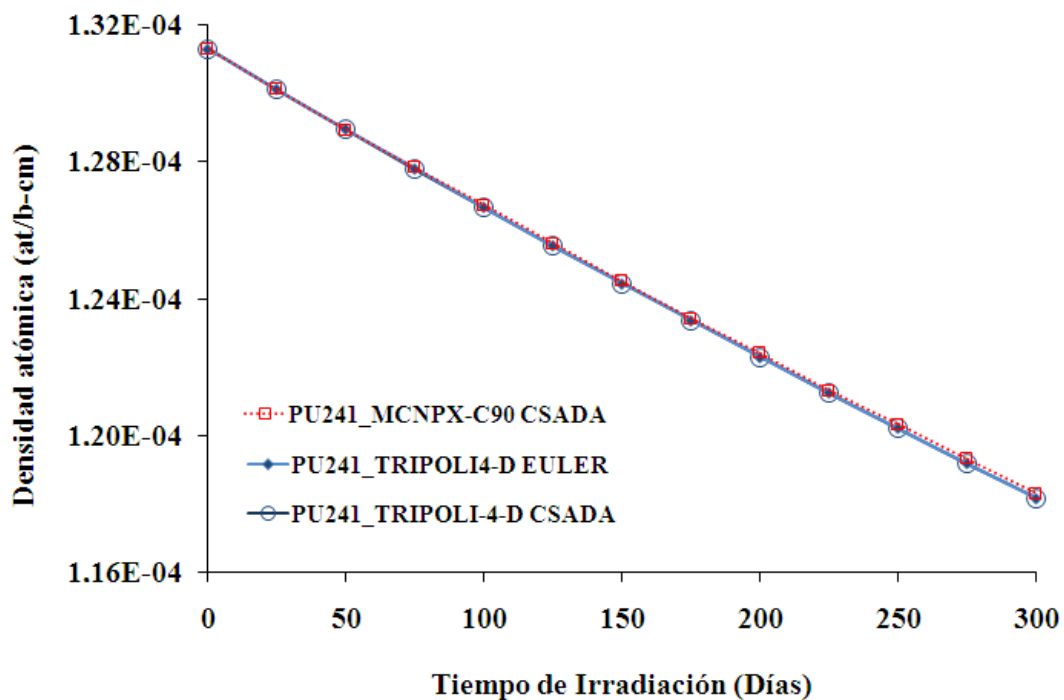


Figura 3.6 Variación de la densidad atómica del Pu-241 en función del tiempo de irradiación

Se observa que existe una concordancia muy buena en los perfiles de comportamiento de los tres métodos de cálculo utilizados (MCNPX-C90 CSADA; TRIPOLI-4-D CSADA y TRIPOLI-4-D EULER).

Según los resultados, se observa que los isótopos de combustible: físi les (U-235, Pu-239 y Pu-241), y fértil (U-238) se van consumiendo. La densidad atómica de cada uno de ellos fue disminuyendo con el transcurso del tiempo de irradiación. Se consumen más rápidamente los isótopos de U-238 y Pu-241. Debe considerarse que existe mayor masa de U-238; y que se está formando Pu-239 a partir de las reacciones del U-238. En la **Figura 3.7** se muestra la masa consumida de cada isótopo en 300 días de irradiación.

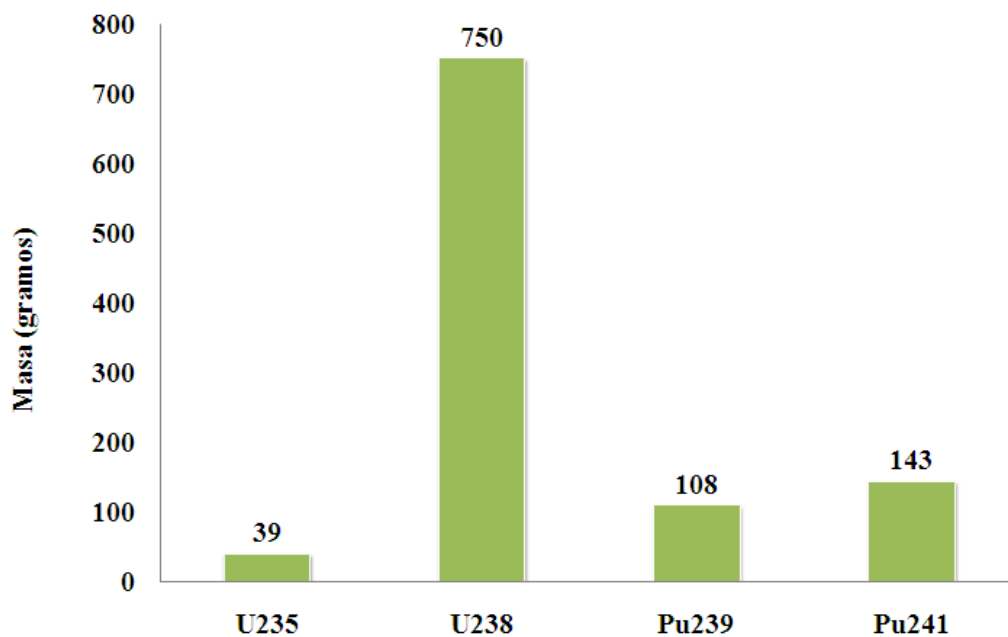


Figura 3.7 Inventario de masas consumidas en los isótopos de combustible en 300 días de irradiación

El isótopo que se consume más es U-238 y después el Pu-241 y después el Pu-239 y el que menos se consume es el U-235.

Los resultados de los actínidos (transuránicos), se muestran en las **Figuras 3.8, 3.9, 3.10 y 3.11**.

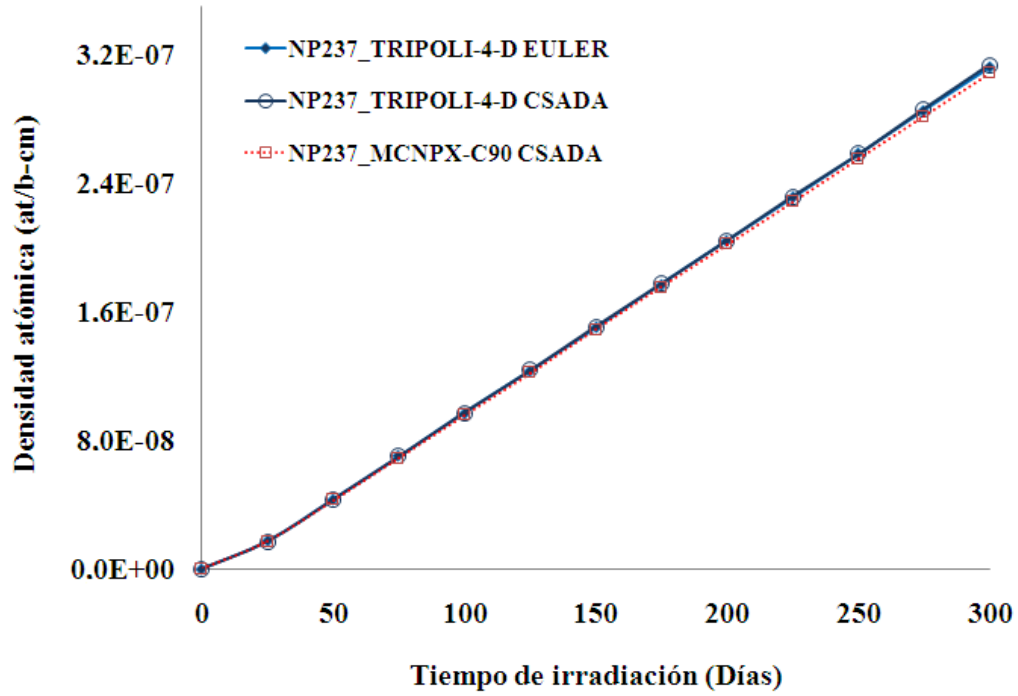


Figura 3.8 Variación de la densidad atómica del Np-237 en función del tiempo de irradiación

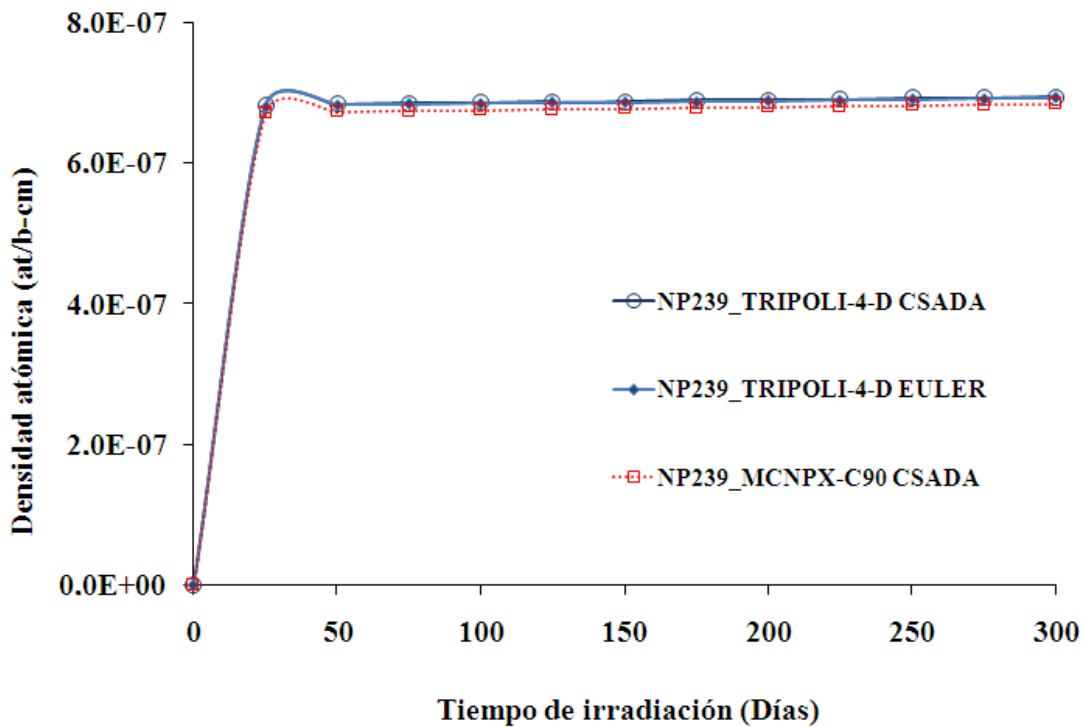


Figura 3.9 Variación de la densidad atómica del Np-239 en función del tiempo de irradiación

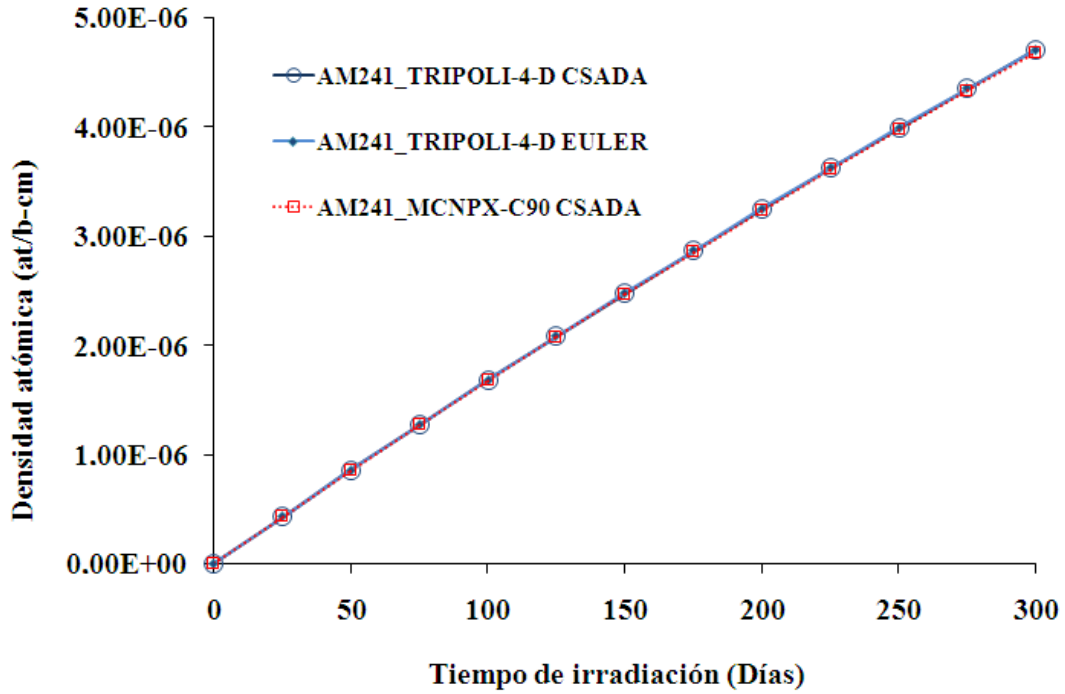


Figura 3.10 Variación de la densidad atómica del Am-241 en función del tiempo de irradiación

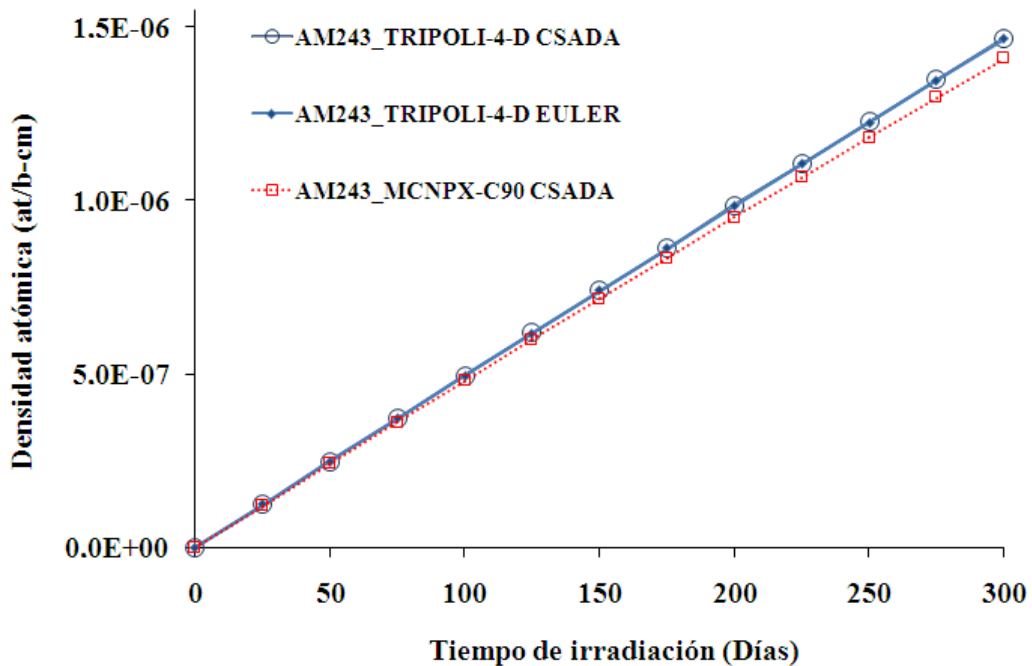


Figura 3.11 Variación de la densidad atómica del Am-243 en función del tiempo de irradiación

Igual que en el caso de los actínidos de combustible, no existen diferencias importantes en los perfiles de comportamiento calculados por los códigos de cómputo y los métodos de cálculo empleados en los cálculos de quemado para los transuránicos.

Según los resultados del seguimiento de los transuránicos, generados por las tasas de reacción que suceden entre el combustible y los neutrones, se observa que se forman en los primeros días de irradiación y que incrementan su concentración a medida que transcurre el tiempo. El Np-239 tiene un comportamiento particular ya que en los primeros 25 días de irradiación aumenta a un valor máximo, y después muestra un comportamiento constante de concentración en función del tiempo de irradiación.

En **Figura 3.12** se muestra la masa de los transuránicos formados en los 300 días de irradiación del combustible. El transuránico que más se forma es el Am-241; lo que no se desea ya que este isótopo tiene una alta sección eficaz de absorción.

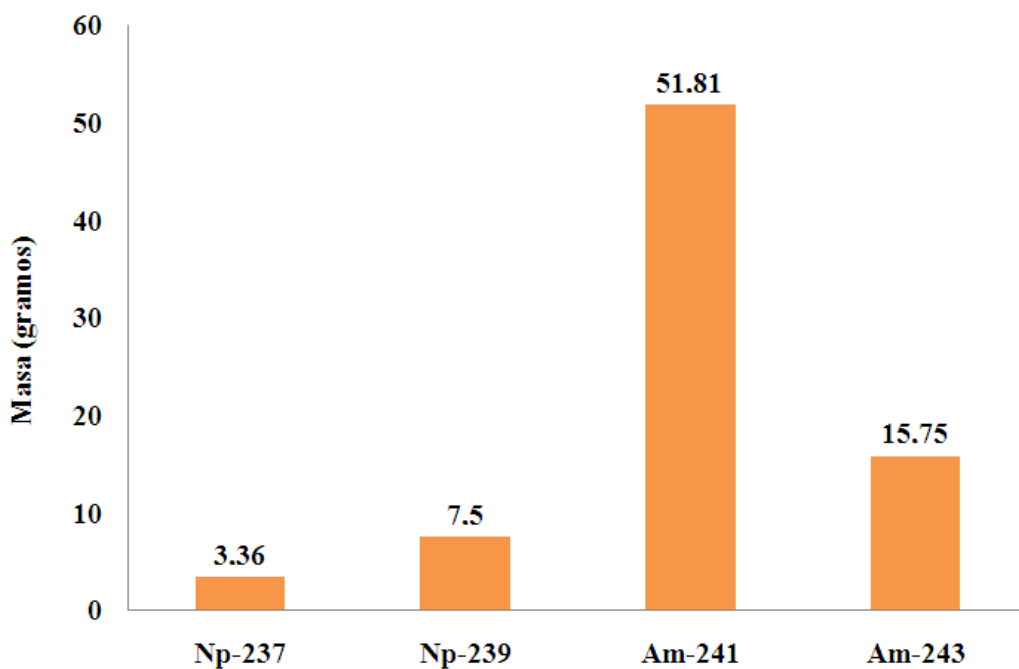


Figura 3.12 Inventario de masas de actínidos producidos

En las **Figuras 3.13, 3.14 y 3.15**, se presentan los resultados de la variación de la densidad atómica de los productos de fisión en función del tiempo de irradiación. Sólo se consideraron los isótopos de Cs-137, Nd-148 y Xe-135. En tales figuras se observa nuevamente una concordancia muy buena en los perfiles de comportamiento calculados por cada código.

Según los resultados; se observa que los tres isótopos analizados aumentan su concentración conforme transcurre el tiempo de irradiación. El Xe-135 sufre un aumento súbito de su concentración en los primeros días de irradiación para después mantener un comportamiento constante a lo largo de tiempo de irradiación.

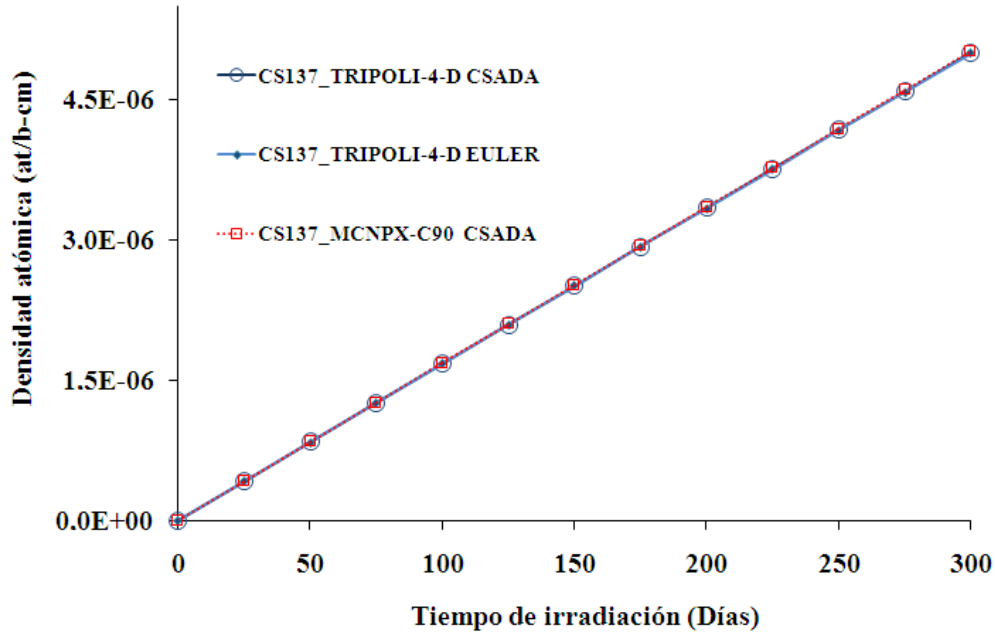


Figura 3.13 Variación de la densidad atómica del Cs-137 en función del tiempo de irradiación

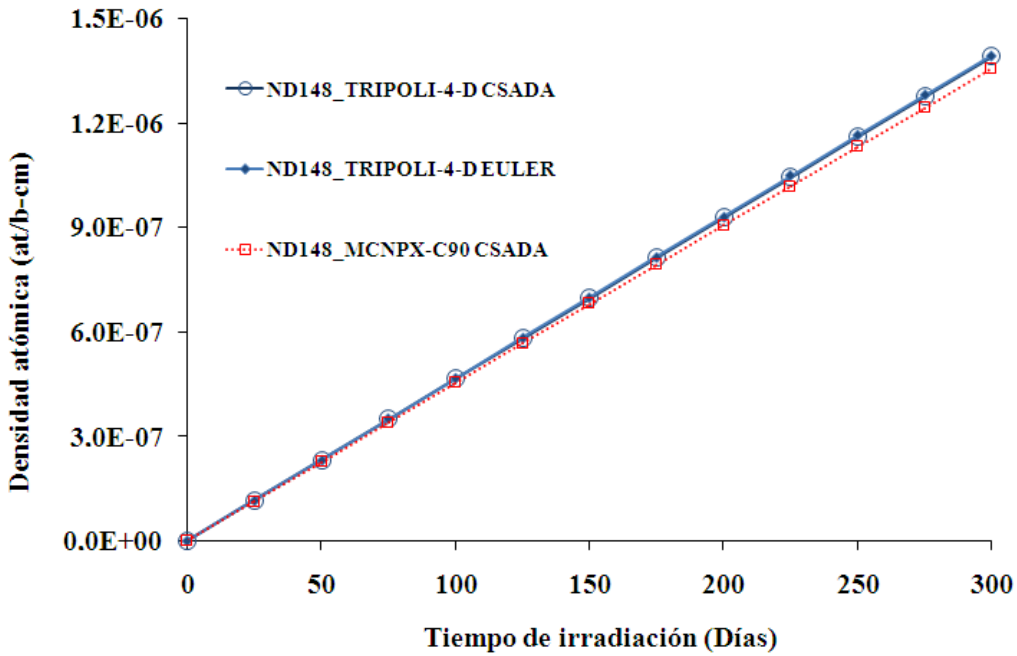


Figura 3.14 Variación de la densidad atómica del Nd-148 en función del tiempo de irradiación

La concentración del Xe-135 es muy pequeña en comparación con las concentraciones de los isótopos de Cs-137 y Nd-148. En la **Figura 3.16** se muestra el inventario de masas de los productos de fisión considerados en este análisis. El Cs-137 es el isótopo que más se forma.

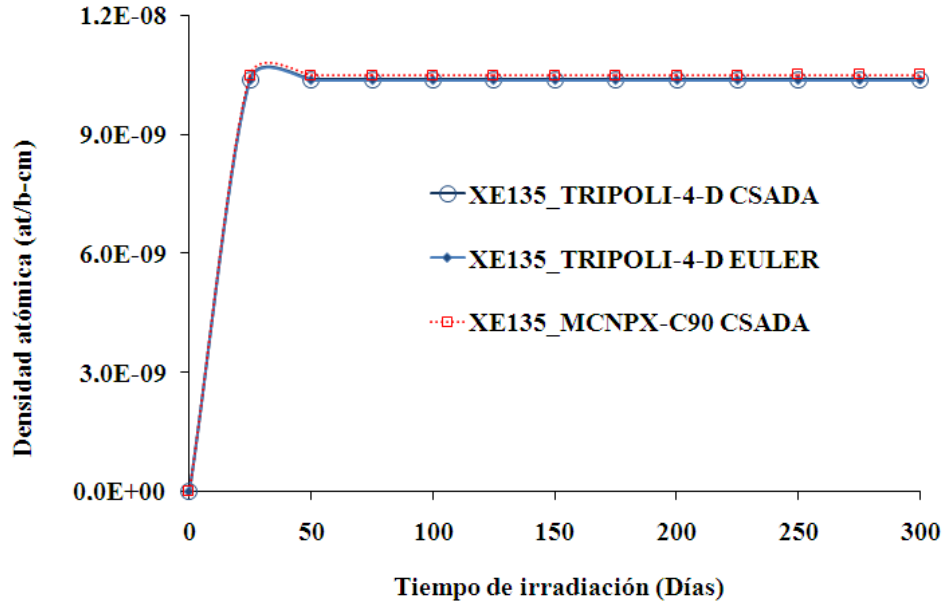


Figura 3.15 Variación de la densidad atómica del Xe-135 en función del tiempo de irradiación

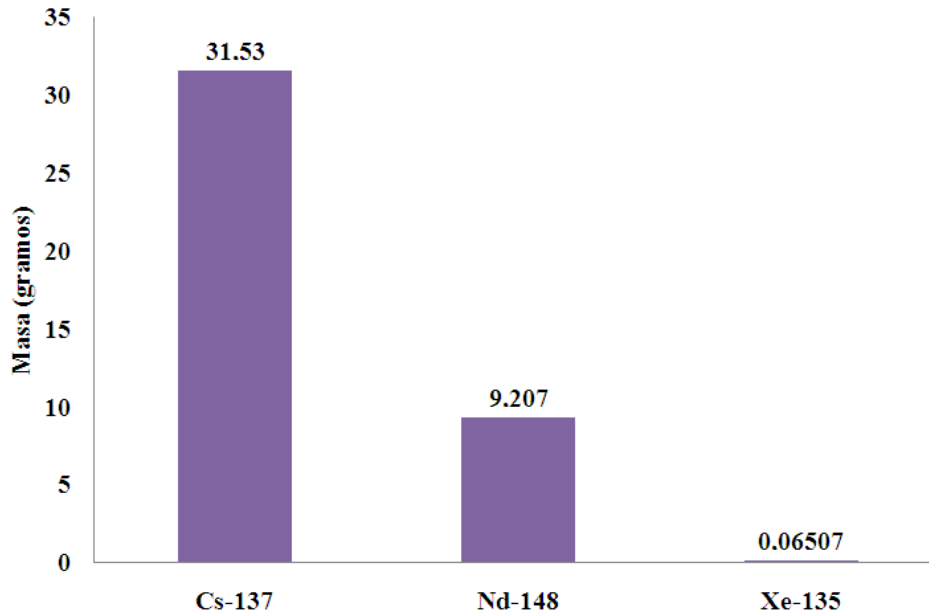


Figura 3.16 Inventario de masas de productos de fisión

Hasta aquí, se presentaron las variaciones de las densidades atómicas; y la diferencia de masa entre los estados inicial y final del periodo de irradiación. No se le dio seguimiento a la totalidad de isótopos que se forman en la mezcla de combustible, ya que ese análisis escapa al alcance de este trabajo. Sólo se realizaron cálculos comparativos de quemado de combustible realizados con los códigos y los métodos de cálculo antes señalados, con el objetivo de validar el código de cómputo TRIPOLI-4-D, desarrollado por el Comisariado de Energía Atómica de Saclay Francia.

4 MODELOS DE COMBUSTIBLE

El reactor nuclear GFR está concebido para operar en el espectro de energías de neutrones rápidos, por lo tanto no necesita moderador pues las principales reacciones suceden a altas energías. Por ser un concepto de alta eficiencia termodinámica (~50%) necesita operar a altas temperaturas: 850 °C en el refrigerante, 1600 °C en el combustible, por lo tanto los materiales a usarse en este tipo de reactor necesitan soportar altas temperaturas (> 2000 °C) y ambientes de alta irradiación. Para tal efecto se han propuesto materiales cerámicos los llamados carburos y nitruros. Otro factor a tomarse en cuenta en el diseño del combustible del reactor GFR es la densidad de potencia del reactor pues como meta de diseño se propuso que el quemado del combustible sea mayor a 5% FIMA; para que se cumpla la meta, se necesita que la densidad de la mezcla de metal pesado sea mayor a 5 g/cm³ y la densidad de potencia del GFR se encuentre dentro del intervalo de 50 a 100 MW/m³²⁷.

4.1 Modelos de ensamble de combustible

Existen varias propuestas de modelos de combustible para el GFR, un modelo innovador de placas de combustible, un modelo clásico de varillas, y modelos de dispersión de esferas como el de matriz inerte o lecho de esferas. En este trabajo seleccionamos el modelo de varillas y el modelo de matriz inerte con dispersión de esferas como modelos de ensamble de combustible.

Se consideró geometría hexagonal para ambos modelos de combustible, con las mismas dimensiones exteriores y malla hexagonal en ambos modelos. La misma fracción de refrigerante (~50%), los mismos materiales para el combustible y estructuras internas. La diferencia entre ambos modelos consiste en la configuración interna y las cantidades de materiales utilizadas en el combustible y estructuras internas. Aunque las celdas básicas tienen configuración diferente sus dimensiones son las mismas para ambos modelos.

4.2 Composición del combustible

Según las características que deben cumplir los materiales a usarse en el modelo de combustible del reactor GFR, se propone una mezcla de carburo de uranio más plutonio²⁸, ya que es un material cerámico que resiste altas temperaturas y ambientes de alta irradiación. Se trata de una mezcla de uranio natural y plutonio. En la **Tabla 4.1** se muestran los valores de la composición de cada elemento de la mezcla de combustible en lo que corresponde a: fracción peso, peso atómico, fracción atómica y densidad atómica.

²⁷ M. K. Meyer, R. Fielding, J. Gan; "Fuel development for gas cooled fast reactors", Journal of nuclear materials 371 (2007) 281-289.

²⁸ R. Jacqmin, "Gas-cooled Reactor Core Physics R&D Activities in France", Gen-IV Reactor Physics Workshop, p. 21, CEA, Chicago, April 30, (2004).

Tabla 4.1 Densidades de los isótopos de la mezcla de combustible

	Fracción peso	Peso Atómico	Fracción atómica	Densidad Atómica
	wf_i	A_i	af_i	N_i
Isótopo		g /mol		átomos / b-cm
U ₂₃₄	0.0003	234.04	0.000255	2.04E-06
U ₂₃₅	0.0069	235.04	0.007	5.60E-05
U ₂₃₈	0.9928	238.05	0.992745	7.94E-03
U_{mezcla}	1	238.03	1	0.008
Pu ₂₃₈	0.010	238.05	0.01	3.05E-05
Pu ₂₃₉	0.569	239.05	0.57	1.74E-03
Pu ₂₄₀	0.260	240.05	0.26	7.94E-04
Pu ₂₄₁	0.111	241.06	0.11	3.36E-04
Pu ₂₄₂	0.050	242.06	0.05	1.53E-04
Pu_{mezcla}	1	239.67	1	3.05E-03
C ₁₂	1	12.00	1	0.085
C_{mezcla}	1	12.01	1	0.085

4.3 Modelo 1: Arreglo de varillas de combustible

Este modelo de ensamble de combustible consta de un arreglo de varillas de combustible en forma de malla hexagonal. Una varilla forma parte de la celda básica de combustible, la cual está compuesta por los siguientes materiales:

1. Combustible, un volumen cilíndrico formado por la mezcla de combustible y centrado en la celda.
2. Huelgo, es un volumen de vacío en forma de cascaron cilíndrico que proporciona un volumen para el gas de fisión y para la dilatación de las partículas de combustible producida por la alta temperatura y la irradiación.
3. Encamisado, es un volumen en forma de cascarón cilíndrico compuesto de un material que tiene la función de contener el combustible y los productos de fisión.
4. Refrigerante, volumen en forma de prisma hexagonal por donde fluye el refrigerante.

En la **Tabla 4.2** se muestran las características de geometría y composición de los materiales que forman la celda básica.

Tabla 4.2 Características de la celda básica del Modelo 1

Característica	Combustible	Huelgo	Encamisado	Refrigerante
Material	(U+Pu)C	He	SiC	He
Composición (% en peso)	(52/20/28)	100	(50/50)	100
Densidad másica (g/cm ³)	7.5487	0.01	2.889	0.01
Densidad atómica (átomos / b - cm)	0.0909579	0.00150452	0.10340802	0.00150452
Geometría	Varilla Cilíndrica	Tubo cilíndrico	Tubo cilíndrico	Prisma Hexagonal
Lado (cm)				0.74412507
Apotema (cm)				0.64443121
Radio externo (cm)	0.4256	0.4285	0.4785	
Área transversal (cm ²)	0.56905	0.00778	0.14247	0.71948
Volumen ocupado * (cm ³)	56.91	0.78	14.28	72.09

*Para una altura de 100 cm de combustible activo.

En la **Figura 4.1** se muestra el **Modelo 1** de ensamble de combustible, dicha figura fue generada con MCNPX y se muestran:

- a) Celda básica con corte en el plano Z=0;
- b) Ensamble de combustible con corte en el plano Z=0;
- c) Ensamble de combustible con corte en el plano X=0.

Cabe notar que las varillas están espaciadas por un material estructural que no ha sido considerado en la modelación. Para las tres figuras los colores asociados son: verde para combustible, negro para huelgo, rojo para encamisado y azul para refrigerante. Tampoco se muestra la zona de reflector axial la cual se encuentra en los extremos axiales del ensamble. El material que se ha considerado como reflector es una mezcla de carburo de zirconio (ZrC) con composición (50/50% en peso).

Cabe señalar que estos dos modelos no son idénticos porque el hexágono del modelo en MCNPX tiene lados paralelos al eje X mientras que en TRIPOLI-4 se tienen lados paralelos al eje Y. Veremos en la sección de cálculos de criticidad la diferencia entre los resultados de estas simulaciones.

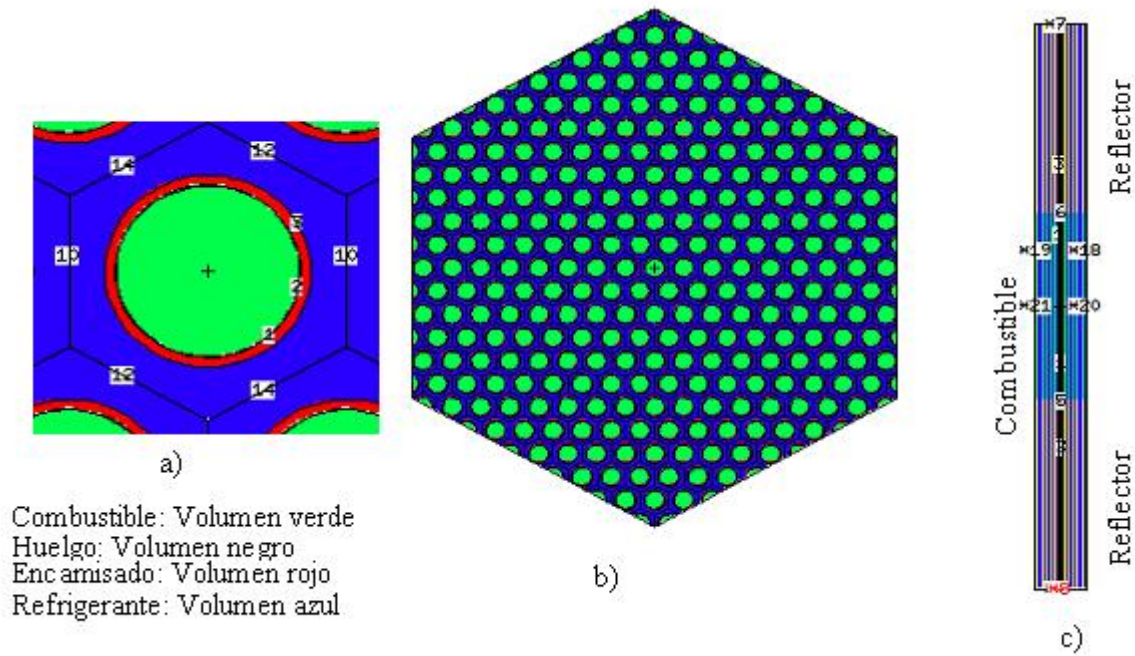


Figura 4.1 Descripción geométrica del Modelo 1 (MCNPX)

En la **Figura 4.2** se muestra la descripción geométrica del *Modelo 1* generado con TRIPOLI-4.

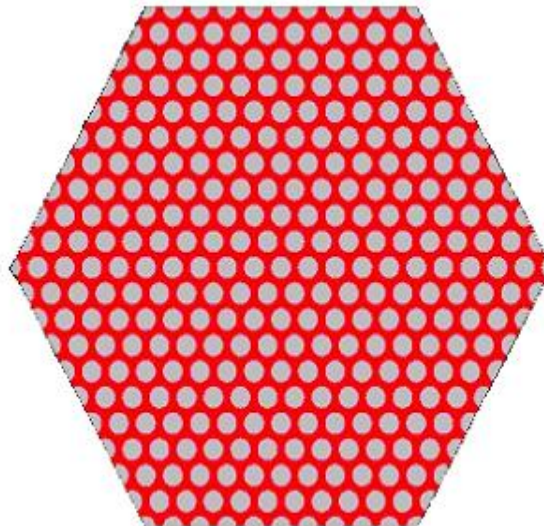


Figura 4.2 Descripción geométrica del Modelo 1 (TRIPOLI-4)

4.4 *Modelo 2: Ensamble de bloque hexagonal con dispersión de esferas*

Al modelo de ensamble basado en matriz inerte con dispersión de esferas de combustible, se le denominó **Modelo 2** de ensamble de combustible. Es un modelo con geometría hexagonal, compuesto por una matriz de material de carburo de silicio de alta densidad que contiene inmersos pequeños núcleos de combustible de forma esférica. En la matriz existe un arreglo de canales cilíndricos por donde fluye el refrigerante. En este modelo se definen dos tipos de celda:

- a) *Microcelda*
- b) Celda básica

La **Microcelda** está formada por cuatro componentes que a continuación se describen:

1. Combustible, un volumen esférico ocupado por el material combustible, donde suceden las reacciones nucleares.
2. Amortiguador, un volumen en forma de cascarón esférico ocupado por un material de baja densidad que proporciona un volumen para los gases de fisión y para la dilatación del combustible debido a la irradiación y a la temperatura.
3. Encamisado, un volumen en forma de cascarón esférico ocupado por un material de alta densidad cuya función es contener los productos de fisión.
4. Estructura de soporte, un material de alta densidad que sirve de estructura para el núcleo de combustible.

La **celda básica** está constituida por tres partes: el combustible, el refrigerante y el reflector:

- a. La celda de refrigerante, tiene forma cilíndrica y ocupa el volumen central de la celda básica.
- b. La celda de matriz de combustible, la cual se forma a partir del acomodo en forma de prisma hexagonal de un grupo de microceldas que contienen al combustible.
- c. La celda de reflector, que se coloca en los extremos axiales inferior y superior de la celda de combustible. El material reflector es una mezcla de carburo de zirconio (ZrC) con composición (50/50% en peso).

El **Modelo 2** se construyó a partir de un arreglo en malla hexagonal de celdas básicas. En la **Tabla 4.3** se muestran las dimensiones y materiales de los componentes de la Celda Básica y de la Microcelda.

Tabla 4.3 Características de la Microcelda y la celda básica del Modelo 2

Característica	Microcelda				Celda Básica		
	Combustible	Amortiguador	Encamisado	Estructura	Matriz de Combustible	Reflector	Refrigerante
Material	(U+Pu)C	SiC	SiC	SiC	celda básica	ZrC	He
Composición (% en peso)	(64/16/20)	(50/50)	(50/50)	(50/50)	celda básica	(50/50)	100
Densidad másica (g/cm ³)	7.5487	0.8025	2.7285	2.889	celda básica	6.51	0.01
Densidad atómica (átomos/b-cm)	0.090958	0.02872	0.09766	0.10341	celda básica	0.18470	0.00150452
Geometría	Esférica	Cascarón esférico	Cascarón esférico	Prisma Hexagonal	Prisma Hexagonal	Prisma Hexagonal	Cilíndrica
Lado (cm)				0.0982	0.7441	0.7441	
Apotema (cm)				0.074417	0.6444	0.6444	
Radio (cm)	0.061688	0.066792	0.07216				0.4785
Altura (cm)				0.1495	100	200	300
Área (cm ²)	0.0478	0.0082	0.0094	0.0192	1.43861	0.7193	0.7193
Volumen (cm ³)	0.00098	0.00026	0.00033	0.00129	144.15	72.07	72.07

En la **Figura 4.3** se muestra la representación del **Modelo 2** con MCNPX, en la que se muestra:

- La Microcelda con corte en el plano $Z=0$, los colores asociados son azul para combustible, azul claro para amortiguador, verde para encamisado y amarillo para estructura;
- La celda básica con un corte en el plano $Z=0$, en la que se asocia el color naranja al refrigerante.

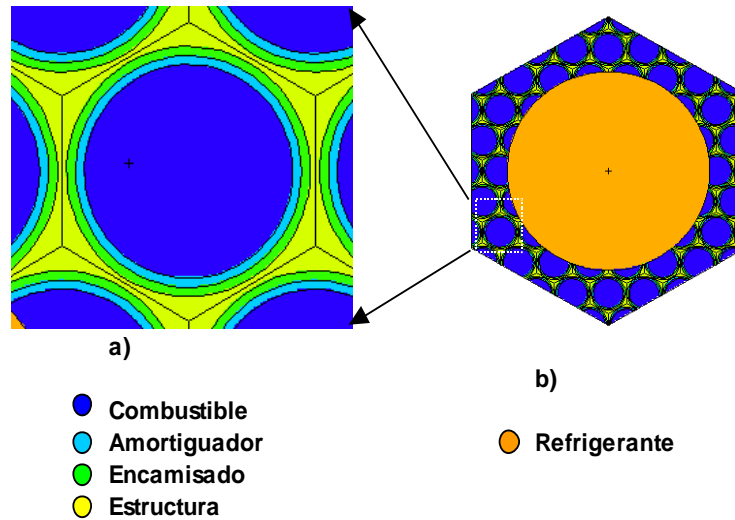


Figura 4.3 Descripción geométrica de la zona de combustible del Modelo 2 (MCNPX)

En las **Figuras 4.4** se muestra la disposición geométrica del ensamble de combustible **Modelo 2 de dispersión de esferas** generada con TRIPOLI-4, y la celda básica de combustible.

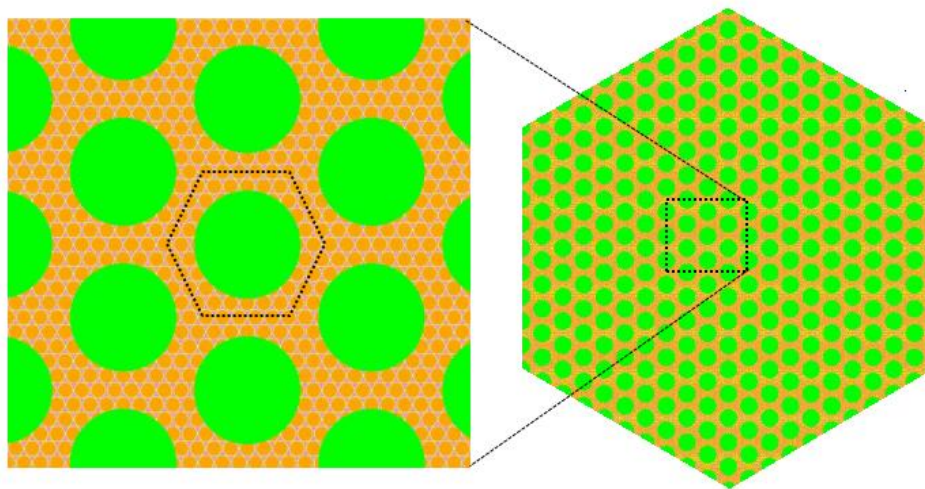


Figura 4.4 Vista frontal del ensamble de combustible Modelo 2 y celda básica de combustible (TRIPOLI-4)

Los cálculos neutrónicos de los modelos de ensamble de combustible se simularon con los códigos de cómputo MCNPX y TRIPOLI-4, se obtuvieron resultados muy semejantes.

4.5 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible

En la **Tabla 4.4** se muestra un inventario de volúmenes y masas de los materiales que integran cada modelo de ensamble. Se observa que la densidad de metal pesado por unidad de volumen de ensamble es 2.3 veces mayor en el **Modelo 1** que en el **Modelo 2**. Se muestran las fracciones de volumen y de peso de cada material en el ensamble para cada modelo, considerando únicamente la zona de combustible activo (100 cm de altura). En la **Figura 4.5** se muestran los inventarios de masa y volumen de cada modelo de ensamble.

Tabla 4.4 Inventario de volúmenes y masas de los diferentes componentes de los modelos de ensamble de combustible

Parámetro	Modelo 1	Modelo 2
Volumen de combustible (cm ³)	17073.72	7394.58
Volumen de estructuras (cm ³)	4274.67	14185.51
Volumen de refrigerante (cm ³)	21815.33	21583.63
Volumen del ensamble (cm ³)	43163.73	43163.73
Masa de combustible (g)	128884.43	55819.44
Masa de las estructuras (g)	12349.51	9374.92
Masa del refrigerante (g)	218.15	215.84
Masa de metal pesado (g)	103107.54	44655.55
Masa del ensamble (g)	141452.09	110065.75
Densidad de metal pesado en el volumen del ensamble (g/cm ³)	2.39	1.03
Fracción de volumen de combustible en el ensamble	0.40	0.17
Fracción de masa de combustible en el ensamble	0.91	0.51
Fracción masa de metal pesado en el ensamble	0.73	0.41

En la **Tabla 4.5** se muestran los valores del factor de multiplicación efectiva obtenidos con MCNPX y TRIPOLI-4 para cada uno de los modelos de ensamble de combustible, cálculos en frío (300 K) y en caliente (1200 K). Los resultados corresponden a una altura activa de combustible de 100 cm, y 100 cm de reflector en cada extremo axial; condición de flujo nulo en los extremos del reflector y condición de medio infinito en la dirección radial del ensamble (en las seis caras laterales del ensamble). Las sigmas están expresadas en pcm (por cien mil). En la

Figura 4.6 se muestran gráficamente estos resultados. La fuente de neutrones se colocó en el centro geométrico y se consideraron los siguientes parámetros de control de criticidad:

Número de neutrones por ciclo 1000
 Factor de multiplicación inicial estimado 1.0
 Número de ciclos inactivos 50
 Número total de ciclos simulados 1000

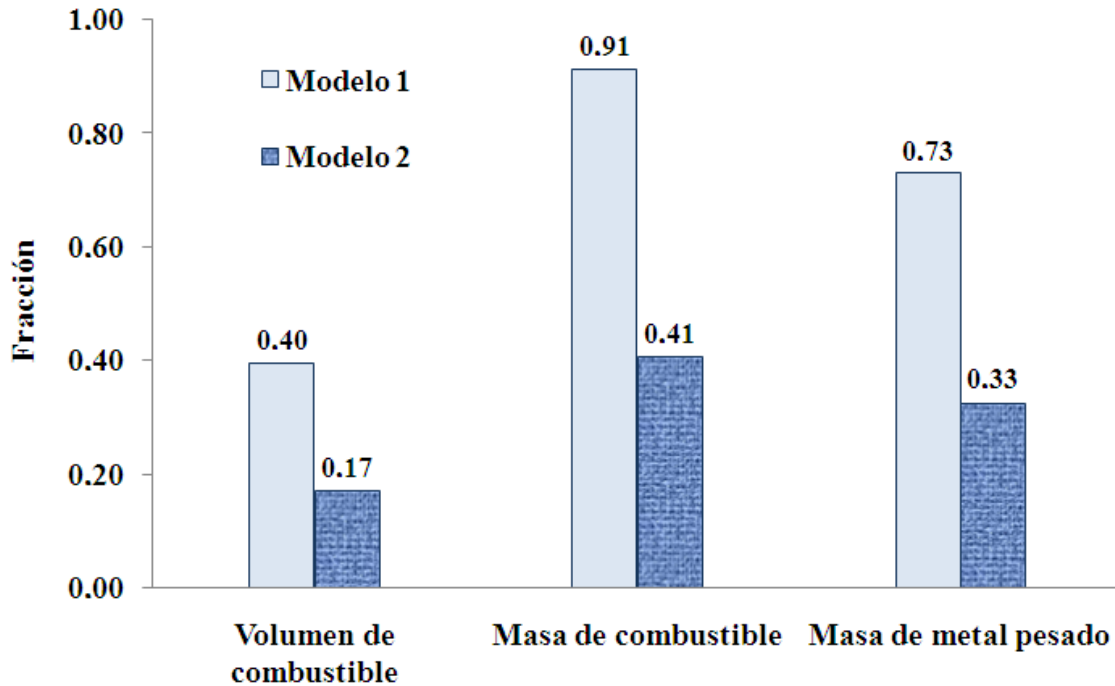


Figura 4.5 Fracciones de volumen y de masa en el ensamble

Tabla 4.5 Factor de multiplicación efectiva de los modelos de ensamble de combustible

Código	Temperatura (K)	Modelo 1		Tiempo de cálculo horas	Modelo 2		Tiempo de cálculo horas
		k_{eff}	Sigma* (pcm)		k_{eff}	Sigma* (pcm)	
TRIPOLI-4	300	1.25733	126	2	1.09275	102	15.6
MCNPX	300	1.25617	140	1	1.09802	138	3.6
TRIPOLI-4	1200	1.22413	112	2	1.05684	97	18.4
MCNPX	1200	1.21925	130	1	1.05065	133	3.8

* 99% de confianza para MCNPX y 99.8% de confianza para TRIPOLI-4

Se observa que MCNPX realiza los cálculos del Modelo 1 en la mitad de tiempo en comparación con TRIPOLI-4 y para los cálculos del Modelo 2 los realiza 6 veces más rápido; por lo tanto, MCNPX tiene ventaja sobre TRIPOLI-4.

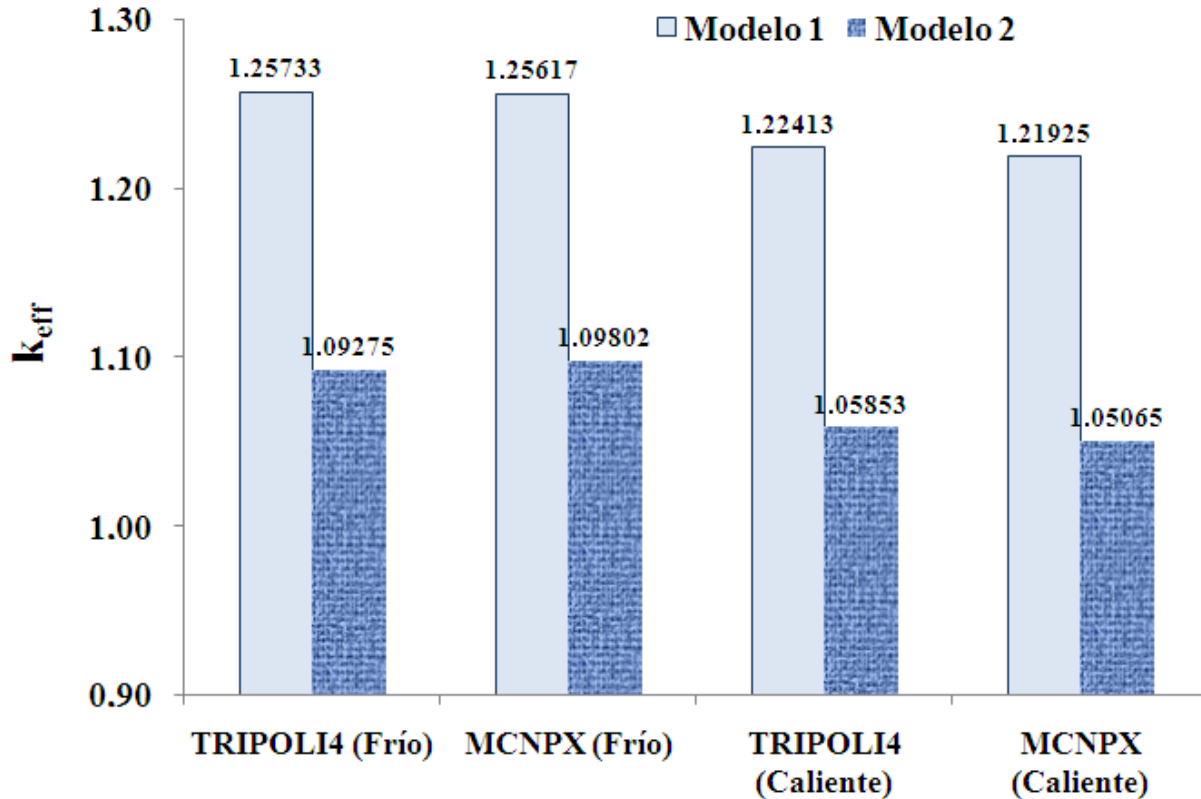


Figura 4.6. Factor de multiplicación efectiva en frío y en caliente para los dos modelos

Se observa que el *Modelo 1* tiene mayor reactividad que el *Modelo 2*, sin embargo este último tiene menor masa de material fisible en el ensamble. Para saber cuál de los dos tiene ventaja desde el punto de vista neutrónico en cuanto a uso de combustible fisible, se necesita tener un parámetro que exprese la reactividad por unidad de masa de metal pesado en el ensamble.

En la **Tabla 4.6** se muestra: el factor de multiplicación efectiva; el exceso de reactividad expresado en pcm y el exceso de reactividad por unidad de metal pesado de cada modelo. Los cálculos se realizaron en frío y en caliente con ambos códigos: MCNPX y TRIPOLI-4.

Tabla 4.6 Reactividad por unidad de masa del material físil en el ensamble

Parámetro	<i>Modelo 1</i>	<i>Modelo 2</i>
k_{eff} MCNPX (Frío)	1.25617	1.09802
k_{eff} TRIPOLI-4 (Frío)	1.25733	1.09275
k_{eff} MCNPX (Caliente)	1.21925	1.05065
k_{eff} TRIPOLI-4 (Caliente)	1.22413	1.05853
Masa de metal pesado (kg)	103	45
Exceso de reactividad (pcm) MCNPX (Frío)	25617	9802
Exceso de reactividad (pcm) TRIPOLI-4 (Frío)	25733	9275
Exceso de reactividad (pcm) MCNPX (Caliente)	21925	5065
Exceso de reactividad (pcm) TRIPOLI-4 (Caliente)	22413	5853
Exceso de reactividad por unidad de masa de metal pesado (pcm/kg) MCNPX (Frío)	248.48	219.50
Exceso de reactividad por unidad de masa de metal pesado (pcm/kg) TRIPOLI-4 (Frío)	249.61	207.70
Exceso de reactividad por unidad de masa de metal pesado (pcm/kg) MCNPX (Caliente)	212.67	113.42
Exceso de reactividad por unidad de masa de metal pesado (pcm/kg) TRIPOLI-4 (Caliente)	217.40	131.07

De acuerdo a los resultados de la **Tabla 4.6** y la **Figura 4.7**, el **Modelo 1** (varillas) de ensamble de combustible hace mejor uso del material físil con respecto al **Modelo 2** (matriz inerte con dispersión de esferas). En los cálculos en frío existe una diferencia de aproximadamente 30 pcm/kg de metal pesado y la diferencia es mayor en condiciones en caliente, aproximadamente 90 pcm/kg de metal pesado. Se observa el mismo comportamiento en condiciones en frío y en caliente y con ambos códigos de cómputo. En caliente existe una diferencia mayor en el uso del combustible entre los dos modelos. Según los resultados el modelo basado en arreglo de varillas es el que hace mejor uso del material físil y por lo tanto se selecciona este modelo de combustible para el diseño del núcleo del reactor.

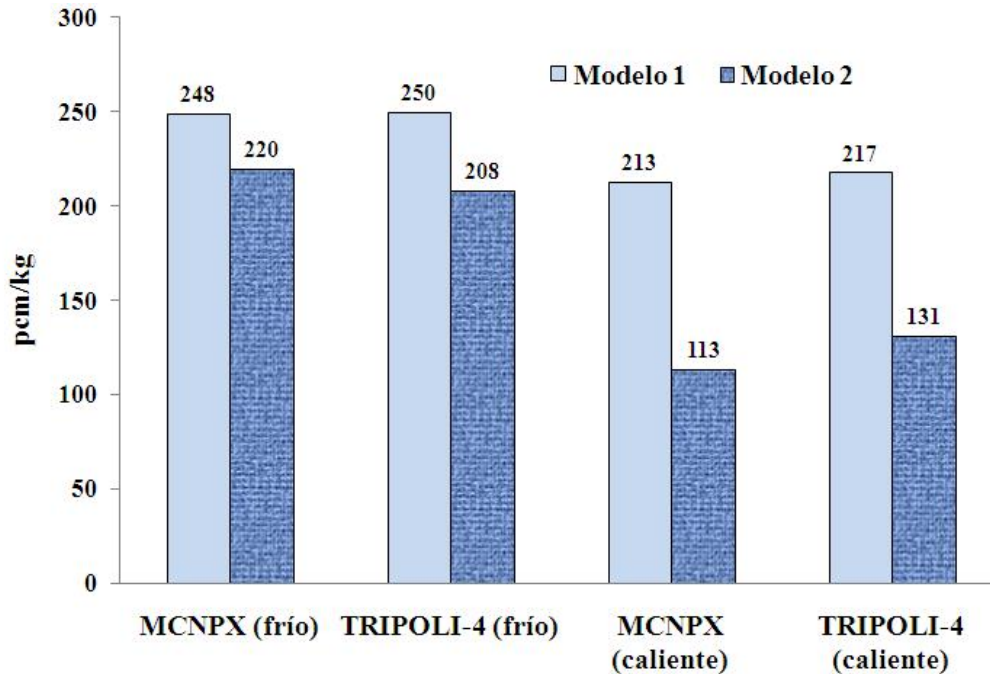


Figura 4.7 Exceso de reactividad por unidad de metal pesado

4.6 Parámetros de seguridad

En este trabajo, como parámetros de seguridad nos referiremos exclusivamente a los valores de los coeficientes de reactividad debido a la variación de temperatura del combustible, variación de densidad del refrigerante, y a la expansión térmica de los materiales por el incremento en la temperatura.

Se consideran entonces tres parámetros de seguridad desde el punto de vista neutrónico:

1. Coeficiente de reactividad por variación de temperatura del combustible.
2. Coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante.
3. Coeficiente de reactividad por expansión térmica de los materiales.

4.6.1 Coeficiente de reactividad por variación de la temperatura del combustible.

Este parámetro nos muestra cómo varía la reactividad en el sistema cuando existe un aumento de temperatura en el combustible *debido al efecto Doppler relacionado con el ensanchamiento de las resonancias cuando aumenta la temperatura en el combustible*. Los cálculos se realizaron únicamente para el *Modelo 1* de ensamble de combustible ya que fue seleccionado como modelo base para el diseño del núcleo del reactor. Los cálculos se realizaron con MCNPX. Se utilizaron bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI, sólo los isótopos de U-235, U-238 y Pu-239 se les varió la temperatura, los demás isótopos de la mezcla de combustible se consideraron a 300 K de temperatura.

El intervalo de temperatura considerado en los cálculos de criticidad realizados va de 300 a 1200 K dividido en 7 valores de temperatura: 300, 400, 500, 600, 800, 900 y 1200 K.

En la **Tabla 4.7** se puede observar la variación del factor de multiplicación efectiva en función de la variación de la temperatura en el combustible. Se tiene que el valor de k_{eff} disminuye a medida que aumenta la temperatura en el combustible, esto se puede observar en la **Figura 4.8**.

Tabla 4.7 Cálculo del coeficiente de reactividad por temperatura del combustible (efecto Doppler) para el Modelo 1 a diferentes temperaturas

Temperatura (K)	Modelo k_{eff}	$(\Delta k/k\Delta)/T$ (pcm/K)	ΔT (K)
300	1.26286 ± 0.00140		
400	1.25833 ± 0.00143	-3.6	100
500	1.25377 ± 0.00135	-3.6	100
600	1.24886 ± 0.00140	-3.9	100
800	1.24273 ± 0.00135	-2.5	200
900	1.24026 ± 0.00135	-2.0	100
1200	1.23371 ± 0.00135	-1.8	300

Modelo 1 de ensamble de combustible, con condición de reflexión en las 6 caras laterales y 100 cm de espesor de reflector axial en cada extremo. Resultados obtenidos con MCNPX y bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI.

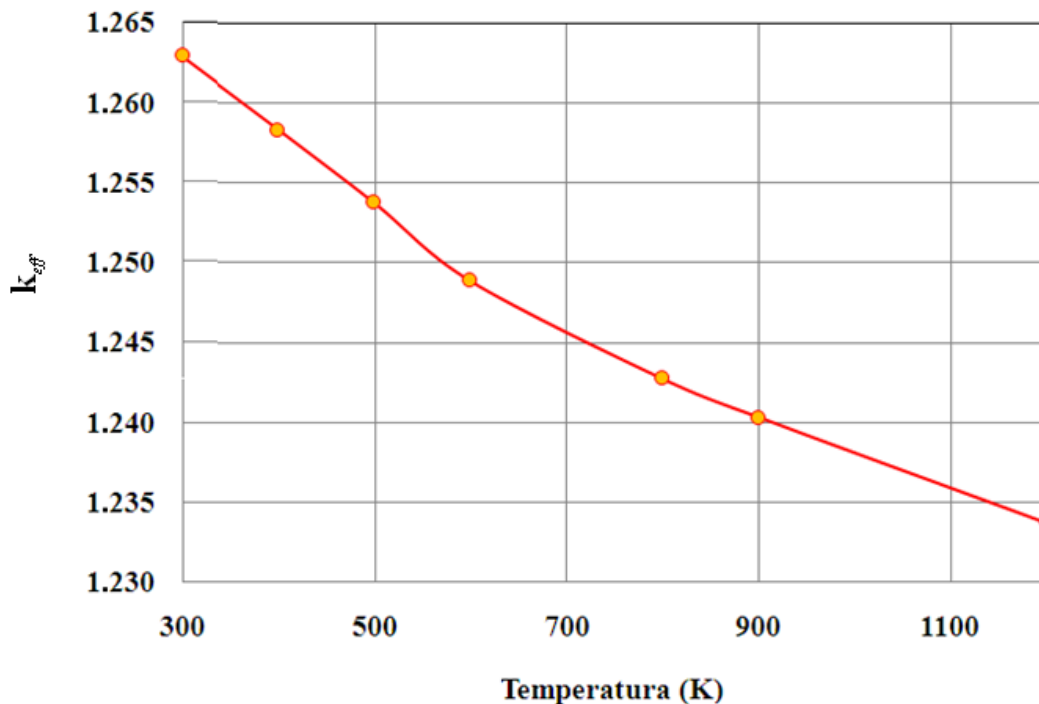


Figura 4.8 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible

Se observa que a medida que aumenta la temperatura en el combustible, disminuye la reactividad. Todos los valores de coeficiente de reactividad resultaron negativos. El aumento de temperatura en el combustible causa un efecto de disminución de la reactividad.

Se realizaron cálculos de criticidad para los dos modelos de ensamble de combustible de la sección 4.5 y se calcularon los coeficientes de reactividad por incremento de temperatura en el combustible cuyos valores se presentan en la **Tabla 4.8**. Se observa que el **Modelo 2** de ensamble de combustible tiene valores más negativos que el **Modelo 1**, lo que le da ventaja sobre este modelo de ensamble de combustible, sin embargo, los valores de coeficiente de reactividad son del mismo orden de magnitud. Se sigue considerando al **Modelo 1** como modelo base para el diseño del núcleo del reactor pues tiene la ventaja de tener mayor reactividad por unida de masa de combustible.

Tabla 4.8 Cálculo del coeficiente de reactividad por temperatura del combustible (efecto Doppler) para los modelos 1 y 2

Modelos	k_{eff} (300 K)	k_{eff} (1200 K)	Δk (pcm)	ΔT (K)	$\Delta k / \Delta T$ (pcm/K)	$\Delta k / k \Delta T$
Modelo 1	1.25617 ± 0.00140	1.21925 ± 0.00130	-3692	900	-4.08	-3.24
Modelo 2	1.09802 ± 0.00138	1.05065 ± 0.00133	-4737	900	-5.23	-4.76

4.6.2 Coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante

Este tipo de reactor nuclear no necesita material moderador, ya que no se desea moderar los neutrones debido a que sus reacciones con los isótopos del combustible se llevan a cabo a grandes energías ($E > 100$ keV). Como el material refrigerante es un gas, no existe cambio de fase con la variación de la temperatura, y por lo tanto, no se podría hablar de que se formen vacíos en el sistema, como en los reactores BWR, sin embargo se puede investigar qué sucede con el factor de multiplicación efectiva (k_{eff}) cuando se varía la densidad del refrigerante, suceso que generalmente ocurre cuando existe una caída de presión en el sistema, o alguna fuga de refrigerante.

En base a una analogía del coeficiente de reactividad por fracción de vacíos de los reactores BWR, se realizaron cálculos de criticidad en función de la variación de la densidad del refrigerante en el sistema GFR con el objetivo de calcular el coeficiente de reactividad por variación de densidad del refrigerante.

Estos cálculos fueron realizados para condiciones de temperatura en caliente (1200 K) para el **Modelo 1** y con el código de cómputo MCNPX con 5 millones de historias de neutrones; 5000 neutrones por ciclo y 1000 ciclos para disminuir la sigma.

En la **Tabla 4.9** y la **Figura 4.9** se observa que la reactividad aumenta cuando disminuye la densidad del refrigerante. Sin embargo, el efecto que se causa por incremento en la temperatura del combustible es 5 veces más grande que el efecto que causa una disminución en la densidad del refrigerante, por lo que el efecto combinado es negativo. Ver los resultados de la sección anterior.

Tabla 4.9 Cálculo del coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante en el sistema ensamble de combustible Modelo 1

ρ (g/cm ³)	k_{eff}	Σ (pcm)	$\Delta\rho$ (g/cm ³)	Δk	$(\Delta k/k) / \Delta\rho$ (g/cm ³) ⁻¹
0.01	1.23420	60			
0.005	1.23736	62	-0.00500	0.00316	-0.51
0.001	1.24014	60	-0.00400	0.00278	-0.56
0.0001	1.24067	60	-0.00090	0.00053	-0.47
0.00001	1.24094	60	-0.00009	0.00027	-2.42

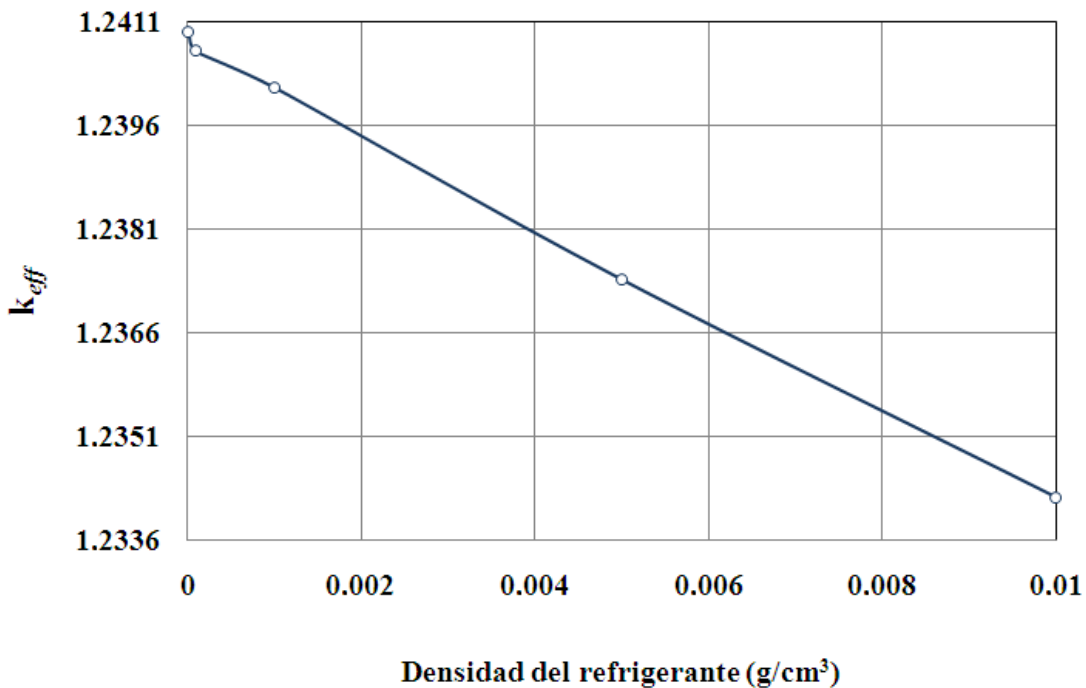


Figura 4.9 Variación de k_{eff} en función del cambio de la densidad del refrigerante

4.6.3 Coeficiente de reactividad por expansión térmica de los materiales

Otro parámetro que puede influir en la reactividad del sistema, es la expansión volumétrica de los materiales debida al incremento de la temperatura. Existe dilatación lineal en las direcciones axial y radial debido al incremento de temperatura del combustible y el encamisado.

Se pretende conocer en qué medida se afecta la reactividad del sistema por la expansión volumétrica de los materiales. Las pruebas que se realizaron se orientaron a la expansión volumétrica del combustible y el encamisado.

En la **Tabla 4.10** se muestran las dimensiones dilatadas utilizando un coeficiente de dilatación lineal²⁹ igual a $1 \times 10^{-5} \text{ cm}/^\circ\text{C}$.

Tabla 4.10 Dimensiones dilatadas del combustible

Temperatura (K)	longitud Axial (cm)	Longitud Radial (cm)	Volumen (cm ³)	Fracción axial	Fracción radial	Fracción volumen
300	99.20	0.42178	55.44	1	1	1.000
400	99.30	0.42221	55.61	1.001	1.001	1.003
500	99.40	0.42263	55.78	1.002	1.002	1.006
600	99.50	0.42305	55.95	1.003	1.003	1.009
800	99.60	0.42390	56.23	1.004	1.005	1.014
900	99.70	0.42432	56.39	1.005	1.006	1.017
1200	100.00	0.42560	56.91	1.008	1.009	1.026

Según los valores de la **Tabla 4.10** en el intervalo de temperaturas considerado (de 300 a 1200 K), existen dilataciones máximas de 0.8% en dirección axial y 0.9% en dirección radial y de 2.6 % de dilatación volumétrica, por lo tanto es factible realizar los cálculos de criticidad ya que los valores de dilatación se encuentran dentro del intervalo de valores recomendado por algunos autores el cual es <2% en dirección radial³⁰.

Aunque no se tienen bibliotecas de secciones eficaces para los elementos del encamisado también se calcularon sus dimensiones dilatadas a partir del valor del coeficiente de dilatación térmica del SiC para los valores de temperatura que se consideraron en la dilatación del combustible. El valor del coeficiente de dilatación térmica que se consideró para el carburo de silicio (SiC) es $\alpha_{\text{Si}} = 5.3 \times 10^{-6} \text{ cm}/^\circ\text{C}$ ²⁵. Sus dimensiones dilatadas se muestran en la **Tabla 4.11**.

²⁹ S. Glasstone, A. Sesonske, Ingeniería de reactores nucleares, Editorial Reverte, pp. 525, 1990.

³⁰ M. K. Meyer, "Report on the feasibility of GFR fuel for minor actinide management", Argonne National Laboratory, University of Chicago, (2004).

Tabla 4.11 Dimensiones dilatadas del encamisado

Temperatura (K)	Longitud Axial (cm)	Radio* externo (cm)	Volumen (cm ³)	Fracción axial	Fracción radial	Fracción Volumen
300	99.58	0.4762	13.51	1.000	1.000	1.000
400	99.63	0.4765	13.59	1.001	1.001	1.006
500	99.68	0.4767	13.67	1.001	1.001	1.012
600	99.74	0.4770	13.75	1.002	1.002	1.018
800	99.79	0.4775	13.91	1.002	1.003	1.030
900	99.84	0.4777	14.00	1.003	1.003	1.036
1200	100	0.4785	14.25	1.004	1.005	1.055

*Existe el espacio de huelgo entre el encamisado y el combustible con un radio externo constante de 0.4285 cm.

Según los valores de las dimensiones dilatadas del encamisado, se observa que tiene una expansión axial máxima del 0.4% y de espesor radial del 0.5%; valores que dan una expansión volumétrica del 5.5%.

Con los valores de volúmenes dilatados se realizaron cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible: los casos estudiados (Ver la **Figura 4.10**) son los siguientes:

Caso 1: modelo de ensamble donde existe dilatación térmica del combustible y el encamisado en función del incremento de temperatura del combustible (de 300 a 1200 K).

Caso 2: considera las dimensiones dilatadas en caliente (1200 K) del combustible como valores constantes.

Caso 3: Se consideran las dimensiones en frío (300 K) del combustible y del encamisado como constantes (no dilatadas) es decir no cambian en función del cambio de temperatura en el combustible.



Caso 1
Medidas en función de la temperatura del combustible



Caso 2
Medidas (1200 K) dilatadas



Caso 3
Medidas (300 K) sin dilatar

Figura 4.10 Casos calculados en los cuales se considera la expansión volumétrica del combustible

Los cálculos se realizaron con MCNPX para valores de temperatura desde 300 K hasta 1200 K, para los isótopos de combustible: U-235, U-238 y Pu-239. Se consideraron 1000 neutrones por ciclo y 1000 ciclos, una k_{eff} estimada de 1 y un brinco de 50 ciclos inactivos para la distribución de fuentes de neutrones. Los resultados se muestran en la **Tabla 4.12** y en la **Figura 4.11**.

Tabla 4.12 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible considerando dilatación térmica de los materiales

Temperatura (K)	Caso 1 k_{eff}	Sigma (pcm)	Caso 2 k_{eff}	Sigma (pcm)	Caso 3 k_{eff}	Sigma (pcm)
300	1.26173	138	1.26286	140	1.26173	140
400	1.25602	140	1.25623	143	1.25833	143
500	1.25199	135	1.25239	140	1.25377	135
600	1.24847	138	1.2477	140	1.24886	140
800	1.24287	138	1.24116	138	1.24273	135
900	1.23934	135	1.23772	138	1.24026	135
1200	1.23354	135	1.23354	138	1.23371	135

Según los cálculos de expansión volumétrica de los materiales, existe una dilatación en el combustible de 2.6% y de 5.5% en el encamisado. Según los resultados de factor de multiplicación en función de la temperatura, se observa que los perfiles de comportamiento de cada uno de los casos simulados describen perfiles de comportamiento similares.

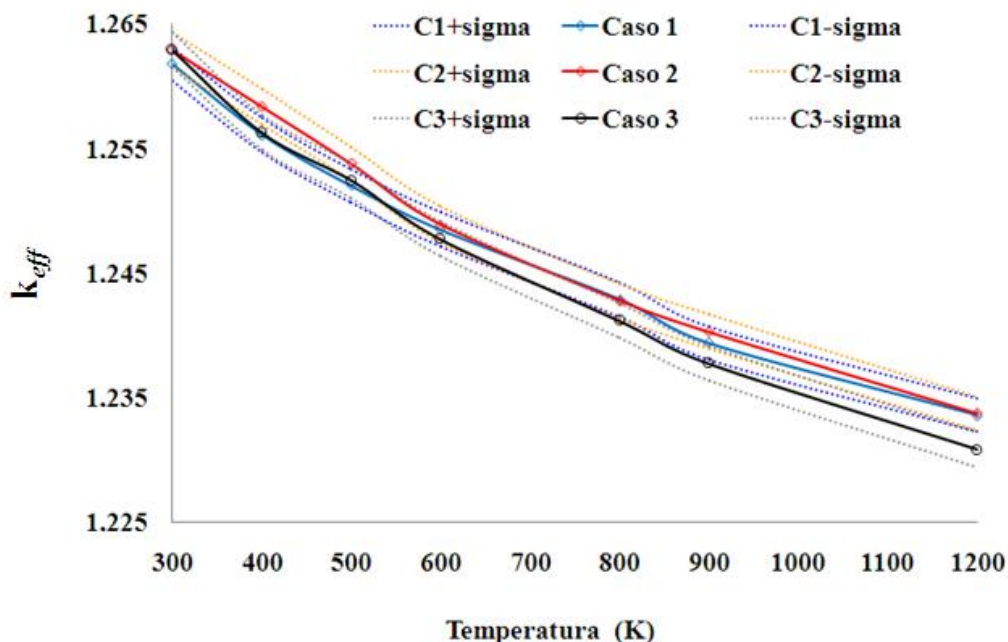


Figura 4.11 Variación de k_{eff} en función de la temperatura del combustible considerando dilatación térmica de los materiales

En los resultados de la **Tabla 4.12** y la **Figura 4.11**, se observa que los perfiles de comportamiento de los casos calculados describen el mismo comportamiento, es decir, la dilatación de los materiales no afecta de manera significativa a la reactividad del sistema y tal efecto queda anulado por el efecto que causa el incremento en la temperatura del combustible lo cual hace que disminuya la reactividad del sistema. Las diferencias más grandes en la reactividad se muestran para valores de temperatura de 300 K y dimensiones en frío sin dilatación y a 1200 K y máxima dilatación. Sin embargo, tales diferencias caen dentro del intervalo de error asociado a cada valor de factor de multiplicación, por lo tanto, quedan anuladas y se puede decir que el efecto en la reactividad producido por la dilatación térmica del combustible es despreciable con respecto al valor del coeficiente Doppler. Producido éste por el ensanchamiento de las resonancias de las secciones eficaces cuando aumenta la temperatura, que se presenta para los isótopos del combustible, lo que ocasiona que la reactividad del sistema disminuya.

Al principio de este capítulo se consideraron dos modelos de ensamble de combustible: 1. Basado en varillas de combustible y 2. Basado en matriz inerte con dispersión de esferas de combustible. A los cuales se les realizaron cálculos de criticidad y según los resultados comparativos de ambos modelos, se observó que el **Modelo 1** hace mejor uso del material fisil.

Se realizaron cálculos de criticidad utilizando los códigos de cómputo MCNPX y TRIPOLI-4 en condiciones de cálculo en frío y en caliente, se observó que los resultados fueron muy semejantes en ambos códigos. MCNPX realiza sus cálculos en menor tiempo que TRIPOLI-4, debido a esa razón los cálculos de los parámetros de seguridad del sistema (ensamble de combustible) se realizaron únicamente con el código MCNPX. Los cálculos de coeficientes de reactividad considerados son:

1. Coeficiente de reactividad por temperatura: se observó una disminución de la reactividad del sistema en función del incremento de temperatura del combustible debido al efecto Doppler.
2. Coeficiente de reactividad por variación de la densidad del refrigerante: se observó que existe un incremento en la reactividad del sistema cuando se tiene una caída de presión en el mismo y por lo tanto una disminución de la densidad, sin embargo de menor proporción que el efecto que causa en la reactividad el incremento de temperatura del combustible.
3. Coeficiente de reactividad por expansión térmica de los materiales: Se observó un efecto muy pequeño en la reactividad del sistema que se considera negativo es decir la reactividad del sistema se considera constante tendiendo al efecto neto negativo.

Basado en los resultados obtenidos en este capítulo se concluye lo siguiente:

1. El *Modelo 1* de ensamble de combustible hace mejor uso del material fisil, por lo tanto se selecciona este modelo de combustible como modelo base para el diseño del núcleo del reactor.
2. Aunque los resultados obtenidos con los códigos de cómputo son muy similares, existe una diferencia importante en el tiempo de cálculo empleado por cada código, teniendo ventaja el código MCNPX sobre el código TRIPOLI-4 pues este último se tarda el doble en realizar los cálculos del Modelo 1 y seis veces más en realizar los cálculos del modelo 2.
3. El efecto neto en la reactividad del sistema es un efecto negativo ya que el efecto negativo que causa el incremento en la temperatura del combustible es de mayor magnitud que los efectos de incremento de reactividad por variación de la densidad del refrigerante y por la expansión lineal de los materiales.

5 DISEÑO DEL NÚCLEO DEL REACTOR

Con base en los resultados obtenidos en el capítulo 4, se seleccionó el *Modelo 1* de ensamble de combustible de varillas para construir modelos del núcleo del reactor, y mediante una serie de pruebas, determinar sus dimensiones en lo referente a su tamaño horizontal y vertical; la medida adecuada de espesor del reflector y el material más adecuado de tres materiales candidatos. Las pruebas consistieron en simulaciones de modelos de núcleo, en los cuales se fueron variando sus dimensiones axiales y radiales.

La estrategia que se siguió se basó fundamentalmente en cuatro aspectos:

1. Determinación del tamaño axial de reflector
2. Selección del material reflector
3. Determinación del diámetro equivalente del núcleo del reactor
4. Determinación del espesor de reflector radial.

5.1 *Determinación del tamaño axial del reflector*

En cálculos previos se simularon modelos de combustible de 100 cm de altura de activa y 100 cm de espesor de reflector axial en cada extremo del ensamble. Se consideró que el espesor de reflector era grande y se valoró la posibilidad de reducir su tamaño hasta un espesor adecuado que contribuyera a la economía de neutrones y que no afectará en gran medida a la reactividad del sistema. Para tal efecto, se realizaron cálculos de criticidad de modelos con altura activa constante (100 cm) y variación axial del espesor de reflector.

En cálculos preliminares se utilizó una mezcla de carburo de zirconio como reflector, en estos cálculos también se considera este material, en la siguiente sección se presentan cálculos de modelos de ensamble considerando otros reflectores además del ZrC.

Estos cálculos se hicieron con MCNPX y TRIPOLI-4. Los parámetros de control de criticidad que se utilizaron son: 1000 ciclos, 1000 neutrones por ciclo, un brinco de 50 ciclos, un factor de multiplicación estimado de 1, con fuente puntual de neutrones colocada en el centro geométrico del ensamble y se consideraron condiciones de reflexión en la dirección radial del ensamble. Se utilizaron bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI a 300 K y a 1200 K. Los resultados se muestran en la **Tabla 5.1** y en la **Figura 5.1**.

Según los resultados, el intervalo de 50 a 60 cm de espesor axial de reflector en cada extremo de la varilla de combustible es una medida aceptable, ya que para valores mayores no existe una ganancia considerable de reactividad. Para reforzar la idea en la **Figura 5.2** se ha graficado la ganancia en reactividad que se tiene por cada cm adicional de reflector axial y se puede apreciar que ésta es mínima para reflectores mayores a 60 cm.

Tabla 5.1 Cálculos de criticidad para un ensamble de combustible variando el espesor axial de reflector

Espesor de reflector (cm)	TRIPOLI-4				MCNPX			
	k_{eff} 300 K	Sigma pcm	k_{eff} 1200 K	Sigma pcm	k_{eff} 300 K	Sigma pcm	k_{eff} 1200 K	Sigma pcm
25	1.21543	114	1.18007	107	1.21763	146	1.17940	138
50	1.24865	117	1.21556	112	1.24856	138	1.21236	133
60	1.25132	121	1.22150	111	1.25344	140	1.21566	130
75	1.25266	124	1.22367	109	1.25567	140	1.21728	133
100	1.25342	120	1.22516	112	1.25537	135	1.21802	130

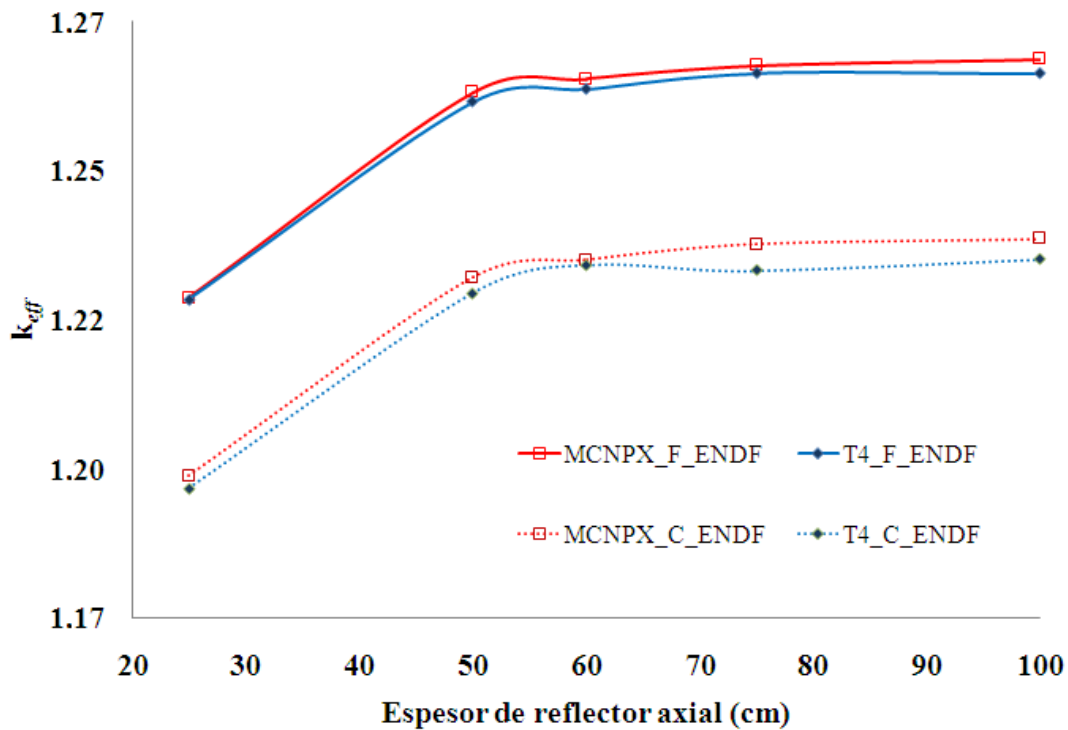


Figura 5.1 Factor de multiplicación efectivo k_{eff} en función del espesor axial del reflector para un ensamble de combustible con condición de reflexión lateral

En lo que corresponde a los perfiles de comportamiento de cada código (MCNPX y TRIPOLI-4) se observa que tienen comportamientos similares.

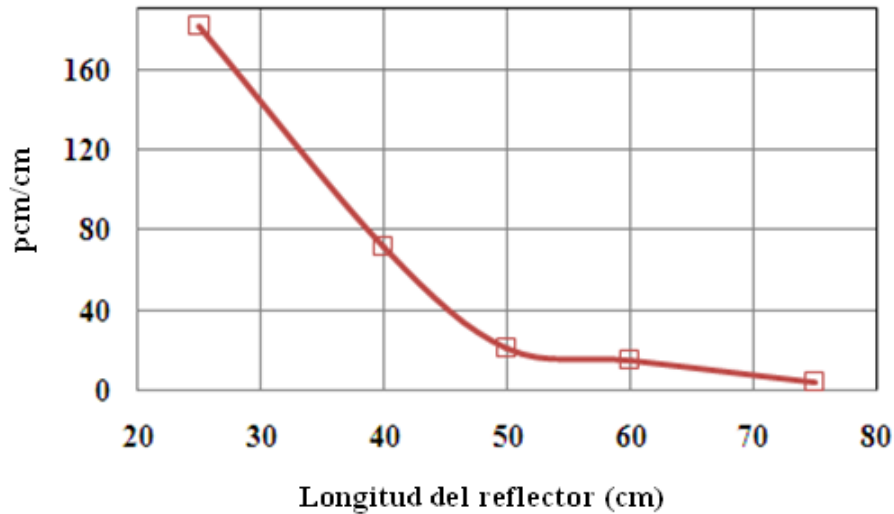


Figura 5.2 Ganancia de reactividad por cada cm adicional de reflector axial

5.2 Selección del material reflector

El reflector es utilizado con el objeto de regresar los neutrones que escapan del núcleo. Las características esenciales de un reflector son:

- Baja sección transversal macroscópica de absorción.
- Alta sección transversal de dispersión.
- Estabilidad térmica.
- Estabilidad ante la radiación.
- Alto decremento logarítmico de energía por colisión.

Se estudiaron tres materiales reflectores; carburo de zirconio (ZrC), carburo de silicio (SiC) y uranio natural (U_{nat}).

El carburo de zirconio es un material extremadamente refractario, es muy difícil de procesar debido a sus bajos coeficientes de difusión intrínseca a temperaturas de 2000 °C. Está formado a partir de estructuras cúbicas centradas en las caras; tiene un alto punto de fusión que se logra con una composición de 9.5% en peso de carbono. Como encamisado es eficiente en la retención de productos de fisión, especialmente a alta temperatura²⁵.

El carburo de silicio existe en fases alfa y beta, que corresponden al tipo estructural del carburo de silicio. La fase alfa tiene estructura romboédrica y la fase beta estructura cúbica. El SiC rápidamente forma una superficie de SiO_2 cuando se expone a aire a alta temperatura, esta capa de superficie es compacta y ofrece protección de oxidación posterior; por lo tanto el SiC tiene excelente resistencia a la oxidación. Su comportamiento de exposición a la irradiación está bien documentado. El procesamiento de SiC a escala industrial, se hace actualmente a un costo

razonable³¹. Existen varias combinaciones estequiométricas de compuestos de SiC desde 5% hasta el 20% de carbono. En los modelos que se calcularon se consideró una composición recomendada⁵ de 9.5% C y 90.5% Si.

La selección de reflectores tomó en cuenta los resultados de los experimentos de criticidad realizados en las instalaciones de MASURCA¹⁰, en los cuales se probaron diferentes materiales reflectores para reactores rápidos enfriados por gas, y se encontró que los materiales SiC y ZrC requieren de menor radio crítico, es decir funcionan como muy buenos reflectores.

El uranio natural, no se menciona como posible candidato para reflector, sin embargo, este material se ha usado como cobija/reflectores en los reactores rápidos para producir material fértil a partir de material fértil.

En las simulaciones neutrónicas se utilizó un espesor de reflector axial de 60 cm, resultado de las pruebas realizadas en la sección anterior, y una altura de combustible activo de 100 cm. Se consideraron condiciones de reflexión en las caras laterales del ensamble. Los parámetros de control de criticidad son los mismos que se han usado en simulaciones anteriores y los cálculos se realizaron a 1200 K, usando las bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI en ambos códigos de cómputo; MCNPX y TRIPOLI-4. Los resultados se muestran en la **Figura 5.3**. Se muestran también resultados para un reflector axial compuesto de uranio natural con el objetivo de comparar el efecto de reflexión.

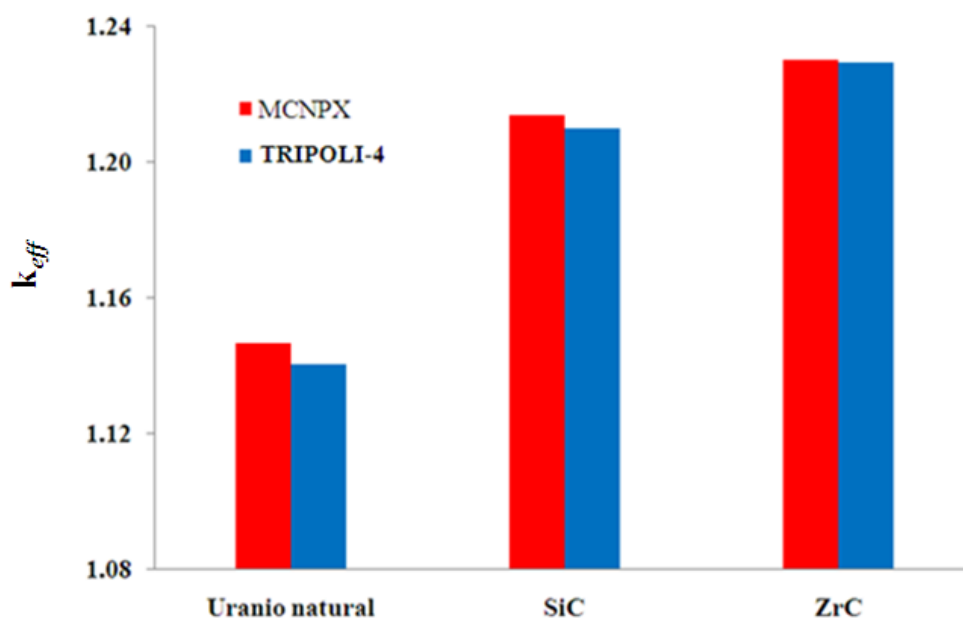


Figura 5.3 Cálculo de criticidad con diferente reflector axial

³¹ M. K. Meyer, "Report on the feasibility of GFR fuel for minor actinide management", Argonne National Laboratory, University of Chicago, (2004).

Según los resultados el ZrC tiene valores más altos de factor de multiplicación efectiva, este material ha sido usado en los cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible 1 y 2, por lo tanto no es necesario cambiar el reflector en tales modelos, sin embargo, se confirma que es el mejor material reflector de los tres propuestos y por lo tanto se seguirá usando en los modelos del núcleo del reactor.

5.3 *Diámetro equivalente del núcleo del reactor*

El siguiente paso para determinar las dimensiones del núcleo, es estimar su dimensión radial. Hasta el momento sólo se han realizado pruebas para modelos de un solo ensamble con condiciones de medio infinito en su dirección radial y con espesor axial. Las primeras pruebas realizadas para determinar el tamaño radial del núcleo consistieron en simulaciones de modelos de núcleo con tamaños diferentes, los cuales se construyeron con ensambles de combustible de 100 cm de altura acomodados en forma de malla hexagonal. Un arreglo hexagonal de ensambles no tiene forma cilíndrica por ello se calculó el diámetro equivalente del núcleo. El *diámetro equivalente del núcleo* es una medida del diámetro correspondiente al área transversal que resulta de la suma de las áreas de cada ensamble de combustible utilizado en la configuración del núcleo del reactor.

Los modelos del núcleo se construyeron en base al incremento de espesor radial el cual se realizó mediante el incremento paulatino del número de ensambles en la dirección radial. El tamaño radial del núcleo se calculó mediante modelos de núcleo con configuraciones basadas en arreglo hexagonal cuyo espesor radial quedó en función del incremento paulatino de capas de ensambles. Los modelos simulados presentan los siguientes tamaños: 1, 3, 5 y 8 capas de ensambles que corresponden a tamaños de núcleo de 1, 19, 61, 91 y 169 ensambles de combustible acomodados en forma de malla hexagonal. Cuyo diámetro equivalente va desde 22.68 cm hasta 305 cm. En estos cálculos se consideró condición de frontera de núcleo desnudo.

Estos modelos, además de ser simulados con MCNPX también se simularon con TRIPOLI-4 para condiciones en caliente (1200 K). Los parámetros de control de simulación en este caso son los mismos de los casos anteriores. En la **Tabla 5.2** y la **Figura 5.3** se muestran los resultados correspondientes a los cálculos de criticidad, reportando el factor de multiplicación efectivo (k_{eff}) debido a que se consideran fugas radiales y axiales.

Según los resultados, se observa que para valores de diámetro equivalente de 200 cm ya no hay incremento considerable de reactividad. A partir de los 174 cm de diámetro equivalente, el reactor se aproxima a la criticidad. Recuérdese que son valores para un modelo de núcleo desnudo, es decir, aún falta considerar los modelos de reactor con reflector. Según los resultados, se considera que una estimación aceptable del diámetro equivalente del núcleo puede estar dentro del intervalo de 174 a 213 cm, que corresponde a configuraciones de núcleo de 61 a 91 ensambles de combustible, ver la **Figura 5.4**.

Se realizó una prueba más en donde se construyeron los mismos modelos de configuración del núcleo pero ahora considerando reflector axial y radial. Basados en los resultados de las pruebas realizadas del espesor de reflector axial se considero un espesor de 60 cm para el reflector axial y

un espesor radial de aproximadamente 44 cm. El reflector radial es un bloque sólido con geometría hexagonal compuesto por una mezcla de carburo de zirconio (ZrC) es decir no presenta los huecos por donde fluye el refrigerante, por lo tanto se consideró que 2 capas de estos bloques de reflector en la periferia de la configuración de la zona activa del núcleo bastaban para obtener un buen efecto reflector en los cálculos que se realizaron.

Tabla 5.2 Resultados de criticidad para núcleo del reactor desnudo en MCNPX y TRIPOLI-4

# Ensamblajes de combustible	Apotema (cm)	Área transversal (cm ²)	Diámetro equivalente (cm)	MCNPX k_{eff}	Sigma pcm	TRIPOLI-4 k_{eff}	Sigma pcm
1	11.16	432	22.33	0.16119	39	0.16056	33
19	48.66	8201	102.19	0.67559	133	0.66899	69
61	87.18	26330	183.10	0.88660	156	0.88304	82
91	106.48	39279	223.63	0.93075	151	0.92695	86
169	145.11	72947	304.76	0.97823	153	0.97612	88

En la **Figura 5.5** se observa el efecto que se obtiene cuando se consideran modelos con reflector axial y radial. Los cálculos se realizaron con ambos códigos de cómputo (MCNPX y TRIPOLI-4 usando las bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI) y con condiciones de cálculo en caliente (1200 K, U-235, U-238 y Pu-239) para una altura de combustible activo de 100 cm.

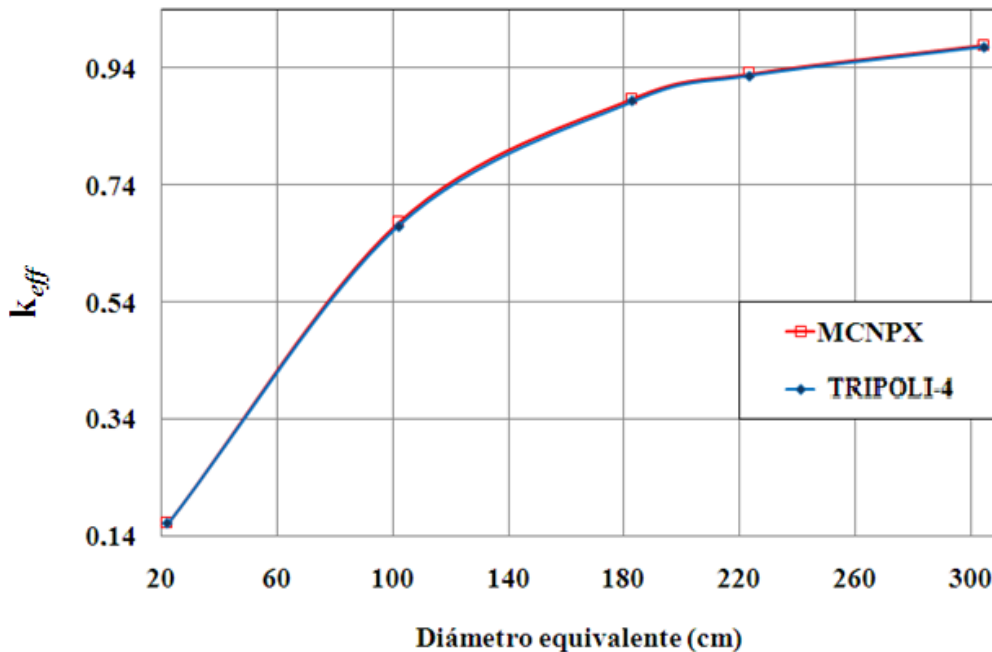


Figura 5.4 Cálculos de criticidad para modelos del núcleo desnudo, en función del diámetro equivalente

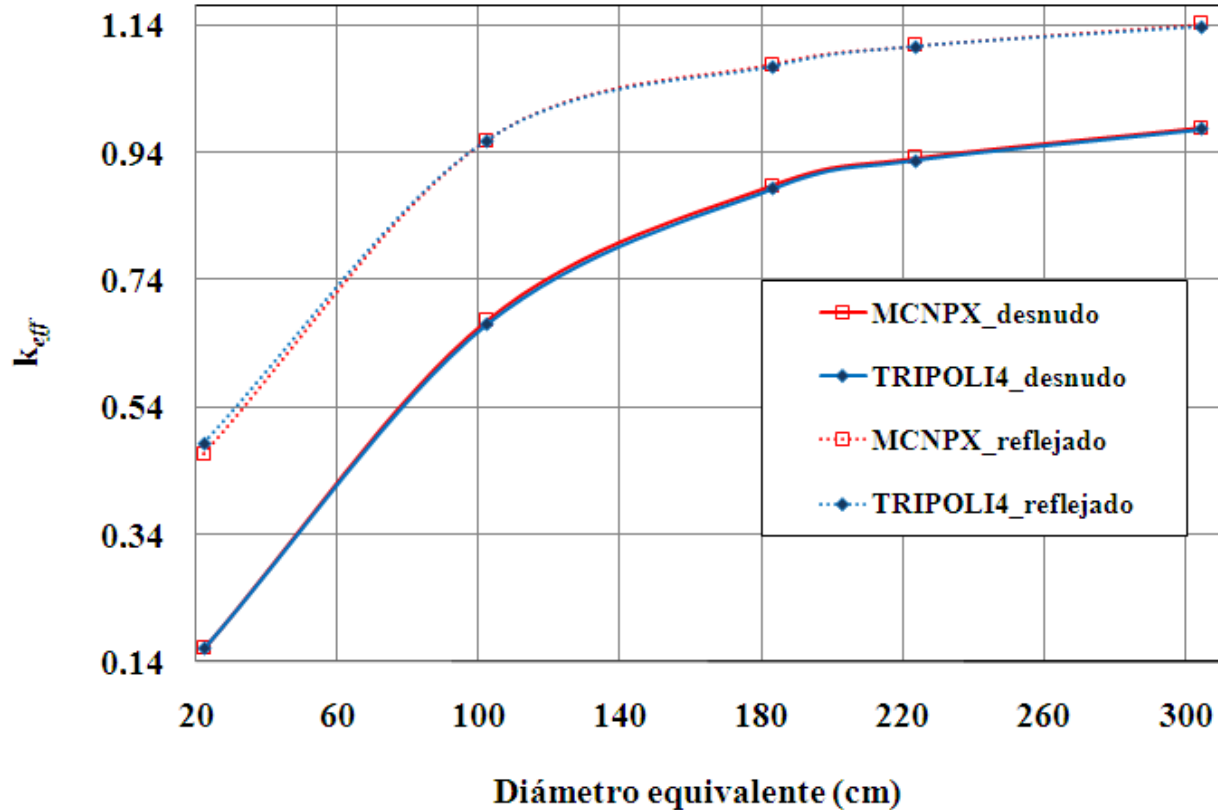


Figura 5.5 Cálculos de criticidad en función del diámetro equivalente, configuración de núcleo desnudo y con reflector

Según los resultados que se muestran en la **Figura 5.5** el incluir el reflector en el núcleo aumenta la reactividad del sistema. Se observa que para valores pequeños de diámetro equivalente, existen cambios más importantes en la reactividad y que a medida que aumenta el tamaño del núcleo, los cambios en la reactividad son menores, pues cuando se tiene un modelo pequeño se tiene una superficie mayor en comparación con el volumen activo y por lo tanto existen más fugas que con un modelo más grande ya que se reduce la superficie en relación al volumen activo, y por lo tanto las fugas de los neutrones son menores.

Se observa también que para valores mayores a 180 cm de diámetro equivalente las curvas se suavizan, a partir de este valor, la reactividad del sistema deja de tener incrementos importantes en función del incremento radial del núcleo. Se observa también que la pendiente de la curva es menor a medida que aumenta el tamaño del núcleo activo en su dirección radial. Se considera que un buen valor estimado del tamaño para el núcleo del reactor se encuentra dentro del rango de valores de 180 y 220 cm de diámetro equivalente, que equivalen a configuraciones del núcleo de 61 y 91 ensambles de combustible y de 66 y 78 ensambles de reflector.

Se observa que la reactividad toma valores altos en comparación con el exceso de reactividad que manejan los reactores térmicos (1500 pcm para un periodo de 1.5 años de irradiación del

combustible). El reactor GRF es un modelo que actualmente se encuentra en desarrollo tecnológico y por lo tanto se desconoce la longitud de tiempo de irradiación del ciclo de combustible, sin embargo, en algunos documentos publicados se manejan valores entre 1500 pcm para ciclos cerrados donde se considera mezcla de actínidos en el combustible; y ~6300 pcm³² para ciclos abiertos (uranio-plutonio). Como se está considerando una mezcla de combustible uranio-plutonio, el valor de exceso de reactividad que se seleccionó como valor de referencia para los cálculos del núcleo es el valor de 6300 pcm.

5.4 Altura activa del núcleo del reactor y ajuste de reflector axial

Los modelos que se construyeron para realizar los cálculos de la altura activa del núcleo, se dividieron en dos secciones:

1. Cálculos de modelos de ensamble de combustible con condiciones de frontera en medio infinito en sus 6 caras laterales, en los cuales se varió el espesor de reflector en sus extremos axiales, con el objetivo de ajustar el espesor axial de reflector a la nueva altura activa del núcleo. Se consideraron tamaños de altura de combustible activo de 50, 75, junto con los valores de 100 cm que ya se tienen.
2. En base a los resultados de los modelos correspondientes al diámetro equivalente del núcleo, se propuso la configuración radial del núcleo, la cual está compuesta de 78 ensambles de combustible, 7 ensambles de control y 84 ensambles de reflector radial. Tal configuración se usó para realizar los modelos del núcleo a diferentes alturas activas. Los valores de altura activa de combustible que se consideraron son: 50, 60, 70, 80, 90, y 100 cm, en tales modelos se utilizó el valor de espesor de reflector obtenido en los resultados de los modelos simulados en el punto 1.

Los cálculos fueron realizados con MCNPX y TRIPOLI-4 para los modelos de ensamble y las simulaciones del núcleo del reactor se realizaron únicamente con TRIPOLI-4. En los modelos de ensamble de combustible se usaron condiciones de medio infinito en su dirección radial y condición de escape en dirección axial y en los modelos del núcleo se usaron condiciones de escape. Se usaron los mismos parámetros de control de criticidad definidos en los modelos anteriores y para condiciones en caliente (1200 K). Los resultados de los cálculos del ensamble de combustible se muestran en la **Tabla 5.3** y en la **Figura 5.6**.

³² Pelloni S., Epiney A., “Neutronics Analyses of GEN-IV Gas Cooled Fast Reactors”, Laboratory for Reactor Physics and Systems Behaviour, Nuclear Energy and Safety Department, p. 9 LRS SAC Meeting (2006).

Tabla 5.3 Criticidad para modelos con variación de altura de combustible activo y espesor de reflector

Altura activa (cm)	Reflector espesor axial (cm)	k_{eff} MCNPX	Sigma pcm	k_{eff} TRIPOLI-4	Sigma pcm
50	10	0.91492	143	0.91554	82
50	15	0.97363	143	0.97116	91
50	30	1.01224	143	1.00935	90
50	50	1.04002	140	1.03707	95
50	60	1.05668	135	1.05661	97
50	75	1.07371	138	1.07423	97
75	10	1.05877	146	1.05771	96
75	15	1.09477	143	1.09363	99
75	30	1.12174	138	1.11828	101
75	50	1.13724	140	1.13515	104
75	60	1.14882	135	1.14687	102
75	75	1.15993	135	1.15612	109

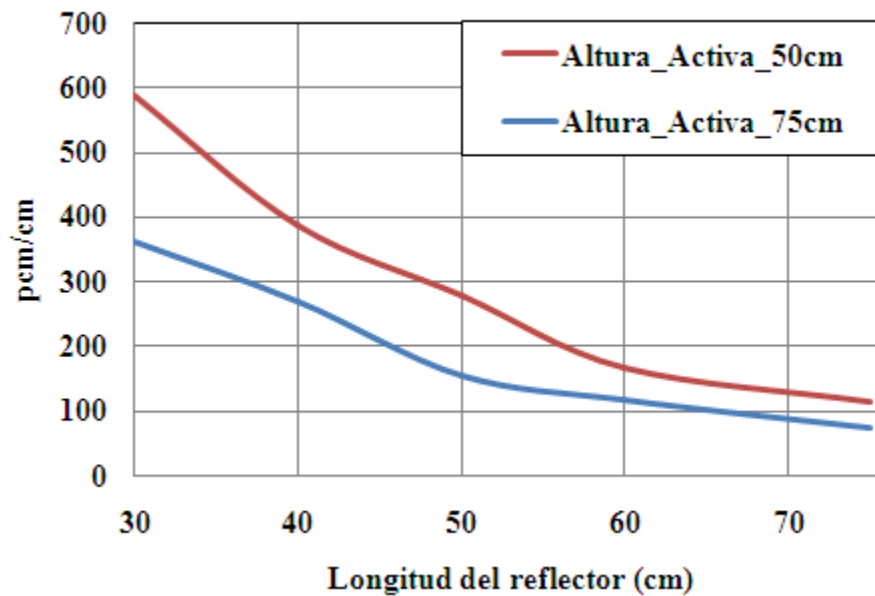


Figura 5.6 Ganancia de reactividad por cada cm adicional de reflector axial

A partir de 60 cm de espesor de reflector axial, ya no existe una ganancia importante en la reactividad del sistema por cada cm de reflector adicional. El mismo comportamiento se observa a 50 y a 75 cm de altura activa. En la **Figura 5.7** se muestra resultados del factor de multiplicación efectiva en función de la altura de combustible activo y del espesor de reflector axial.

En base a los resultados, se propone el valor de 60 cm de espesor de reflector axial para los cálculos del núcleo del reactor.

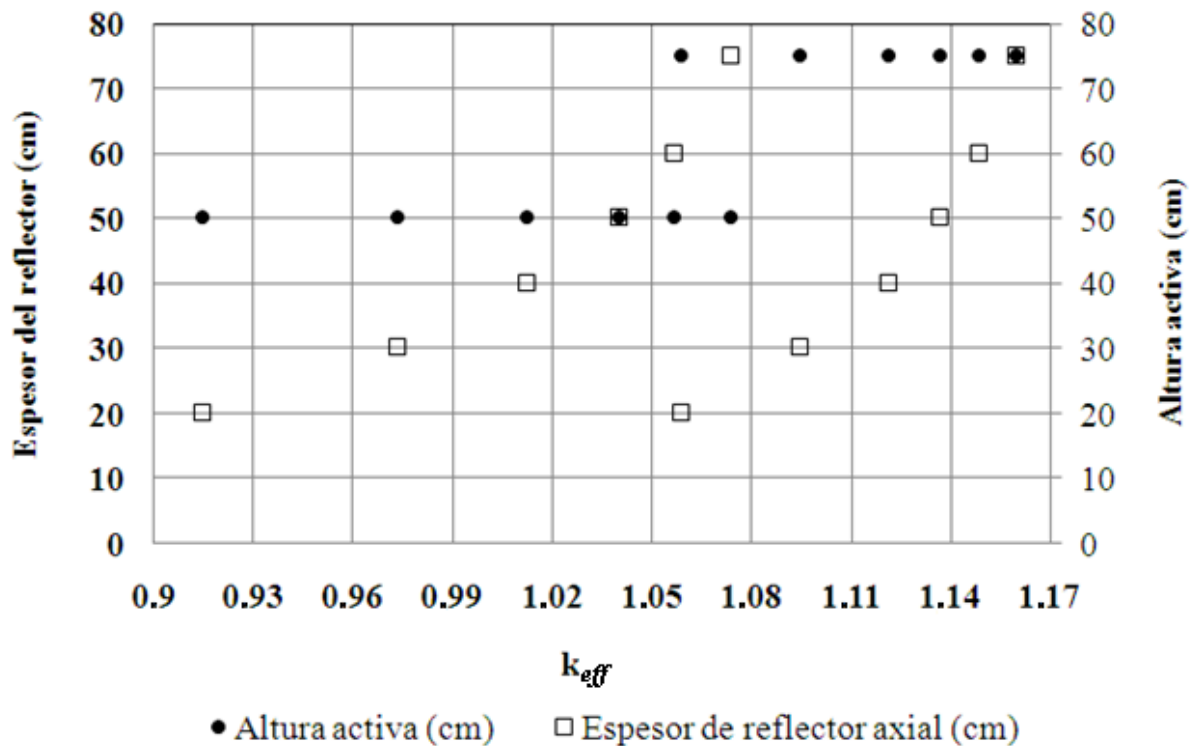


Figura 5.7 Factor de multiplicación efectiva para diferentes alturas activas y espesores de reflector

Los resultados de cálculos de criticidad del núcleo se presentan en la **Tabla 5.4**.

Tabla 5.4 Criticidad para modelos de núcleo con diferentes alturas de combustible activo

Altura activa (cm)	Diámetro equivalente (cm)	H/D	k_{eff} (TRIPOLI-4)	sigma
50	207	0.24	0.92998	88
60	207	0.29	0.97113	91
70	207	0.34	1.00451	97
80	207	0.39	1.03035	93
90	207	0.43	1.05181	98
100	207	0.48	1.07075	103

De acuerdo a los resultados que se presentan en la **Tabla 5.4**, el valor de criticidad que más se ajusta al valor de referencia (~6300 pcm), es el modelo 100 cm de altura de combustible activo; por lo tanto, se seleccionó 100 cm de altura de combustible activo ya que su valor de exceso de reactividad es el valor más cercano al valor de referencia.

5.5 Configuración del núcleo

Con los cálculos realizados y los resultados obtenidos en las secciones anteriores, se tienen suficientes elementos para proponer la configuración del núcleo del reactor. Recordando que este tipo de reactor se encuentra en etapa de desarrollo tecnológico y que existe una amplia variedad de propuestas en lo que corresponde al combustible, al tamaño y a la configuración del núcleo. Se propone un modelo de núcleo relativamente pequeño compuesto por 78 ensamblajes de combustible, 84 ensamblajes de reflector y 7 ensamblajes de control (en los modelos simulados se consideró que las barras de control estaban completamente extraídas, y por ese hecho el espacio de las barras de control fue llenado con helio) acomodados de tal forma que se cubra todo el espacio de combustible activo.

En resumen, el modelo de núcleo del reactor GFR que se propone presenta las características de diseño que se enumeran a continuación:

1. Basado en arreglo de varillas de combustible,
2. Geometría hexagonal de los ensamblajes de combustible,
3. Combustible de carburo de uranio más plutonio,
4. Gas helio como refrigerante,
5. Carburo de silicio como encamisado,
6. Carburo de zirconio como reflector,
7. 100 cm de altura activa,
8. 60 cm de espesor de reflector axial,
9. 44 cm de espesor de reflector radial,
10. 78 ensamblajes de combustible,
11. 7 barras de control,
12. 84 ensamblajes de reflector radial,
13. Volumen de combustible activo 3.04 m^3 ,
14. Diámetro equivalente 2.07 m,
15. Relación altura activa diámetro equivalente 0.48,
16. Densidad de potencia de 100 MWth/cm^3 ,
17. Potencia específica de 41.9 W/gramo de metal pesado,
18. Potencia de un ensamblaje 3.9 MWth ,
19. Potencia del Núcleo 304 MWth ,
20. Masa de metal pesado 7264 kg .

Como ya se ha mencionado, existen varias propuestas del núcleo del reactor GFR. Las características enumeradas anteriormente describen una propuesta más del GFR. Ya se ha dicho que este tipo de reactor está pensado principalmente para generar electricidad, sin embargo también puede ser usado para generar hidrógeno y para desalar agua de mar. Existen ventajas adicionales que involucran factores económicos, sustentables, de resistencia a la proliferación y de seguridad. Tales ventajas están relacionadas con el ciclo de combustible que se pretende implementar en este tipo de reactor, el cual es un ciclo cerrado es decir se pretende reprocesar el combustible agotado proveniente del mismo reactor o de otros reactores. El reprocesado consiste en extraer los productos de fisión del combustible irradiado después de un tiempo de enfriamiento, y reuniendo el combustible agotado junto con una fracción de uranio fresco que

corresponde a la fracción de productos de fisión extraídos y a las pérdidas, construir un nuevo ensamble de combustible para usarlo nuevamente.

La configuración del núcleo del reactor GFR se muestra en la **Figura 5.8** vista de la configuración radial del núcleo $PZ = 0$; **Figura 5.9** vista lateral de la configuración axial del núcleo del reactor combustible activo y reflector axial plano $PX=0$ y en la **Figura 5.10** se muestra la otra cara lateral de la configuración axial del núcleo del reactor $PY=0$.

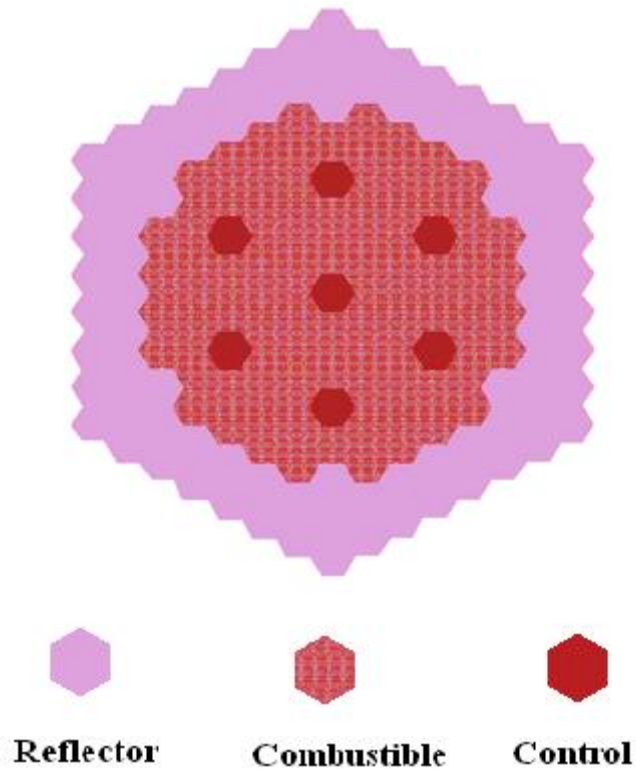


Figura 5.8 Configuración disposición radial del núcleo del reactor; $PZ=0$; TRIPOLI-4

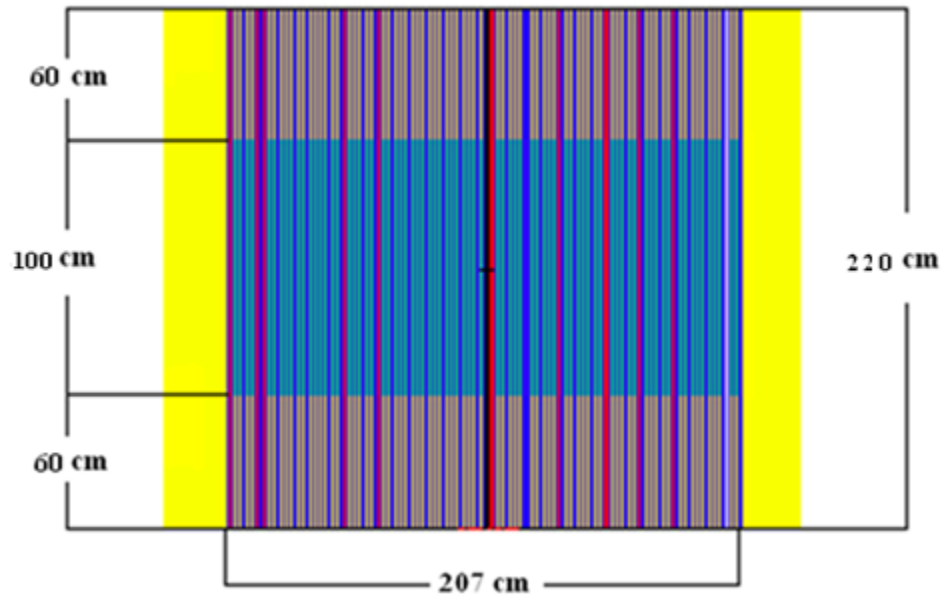


Figura 5.9 Vista lateral del núcleo del reactor; PX=0; MCNPX

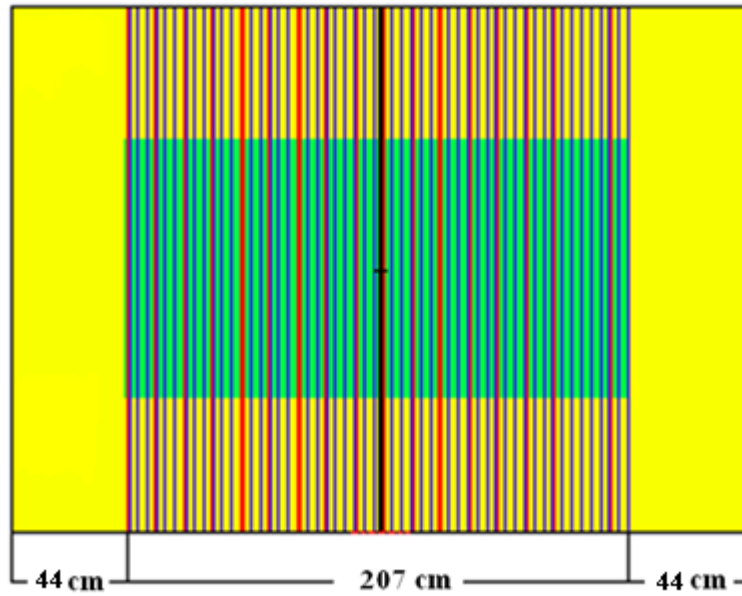


Figura 5.10 Vista lateral del núcleo; PY=0; MCNPX

6 MODELOS SIMPLIFICADOS DE ENSAMBLE DE COMBUSTIBLE Y NÚCLEO DEL REACTOR

6.1 *Mezcla homogénea de combustible*

Hasta este momento, se ha trabajado con un ensamble de combustible heterogéneo, el cual está compuesto por el combustible, el amortiguador, el encamisado y el refrigerante. Cada uno de estos materiales cumple una función determinada; el combustible mantiene la reacción en cadena, el amortiguador proporciona el volumen necesario para los gases de fisión y la expansión de los materiales debida al incremento en la temperatura. El encamisado tiene la función de barrera de contención que evita que los productos de fisión se transporten al refrigerante; y el refrigerante extrae el calor producido por las reacciones nucleares. Se utiliza un material reflector que sirve de barrera para evitar la fuga de neutrones y así contribuye a la economía de los mismos en el sistema.

Se tiene conocimiento que los cálculos de quemado de un sistema heterogéneo requieren una cantidad importante de tiempo. Para agilizar los cálculos de quemado, se construyeron modelos simplificados de ensamble de combustible y del núcleo del reactor. Se construyeron modelos simplificados mediante la homogeneización de los materiales de cada volumen de la celda básica del modelo heterogéneo. Debido a que las tasas de reacción suceden en el espectro de altas energías, el recorrido libre medio de los neutrones en un modelo heterogéneo es muy similar al de un modelo homogéneo.

La homogeneización se realizó para la zona activa de los modelos de ensamble y núcleo del reactor y para la zona de reflector. Dichas homogeneizaciones se realizaron mediante el mezclado de todos los materiales que componen el modelo heterogéneo para formar un material homogéneo. Para realizar los cálculos de los modelos homogéneos, se consideró que bastaba homogeneizar la celda básica de combustible para obtener la composición homogénea. Según los datos referentes a la fracción volumen que ocupa cada material en la composición heterogénea de la celda básica de combustible, se tiene que: el combustible ocupa el 0.39, el encamisado ocupa un 0.10 y el refrigerante ocupa un 0.51. Las mismas proporciones se conservan en la zona de reflector. En base a tales proporciones se calcularon los valores de las densidades atómicas de cada isótopo que constituye la mezcla homogénea de combustible y reflector. En la **Tabla 6.1** se muestran los valores de las composiciones homogéneas del combustible y del reflector.

Tabla 6.1 Composición de los modelos homogéneos de combustible y reflector

Combustible	Densidad atómica (átomos/b-cm)	Reflector	Densidad atómica (átomos/b-cm)
HE3	0.00000000131	HE3	1.31203E-09
HE4	0.00076048968	HE4	7.60490E-04
U234	0.00000125371	C	1.36274E-02
U235	0.00003426863	ZR90	7.91411E-03
U238	0.00479861362	ZR91	1.72588E-03
PU238	0.00001208427	ZR92	2.63804E-03
PU239	0.00068591435	ZR94	2.67342E-03
PU240	0.00031156771	ZR96	4.30700E-04
PU241	0.00013126862	Si	5.55225E-03
PU242	0.00005942059		
C	0.03711227479		
Si	0.00306754324		
Mezcla	0.046974700503	Mezcla	3.53223E-02

6.2 Modelos de ensamble de combustible

Los valores que se muestran en la **Tabla 6.1** se utilizaron para realizar los cálculos de los modelos homogéneos de ensamble y núcleo. Los modelos que se simularon se describen a continuación:

1. Lo primero que se realizó fue el cálculo de criticidad del modelo heterogéneo refinado, es decir, aquel que únicamente considera 271 varillas de combustible y no presenta los pedazos de celdas cortadas, ya que en los cálculos de los modelos homogéneos únicamente se considerará el volumen ocupado por 271 celdas de combustible.
2. Modelo homogéneo de ensamble de combustible en medio infinito;
3. Modelo homogéneo de ensamble de combustible con 60 cm de reflector axial condiciones de medio infinito en sus caras laterales.

Los cálculos sólo se realizaron en caliente (1200 K) y los parámetros de control de criticidad que se utilizaron fueron: 4000 neutrones por ciclo, 500 ciclos, un brinco de 30 ciclos inactivos para la distribución de fuentes, una k estimada de 1 y la fuente de neutrones colocada en el centro geométrico. Las bibliotecas de secciones eficaces que se utilizaron fueron las ENDF-VI, las cuales sólo consideran en caliente a los isótopos de U-235, U-238 y Pu-239, los fueron realizados con TRIPOLI-4 y MCNPX.

6.2.1 Resultados ensamble de combustible en medio infinito

En la **Tabla 6.2** se muestran los resultados de factor de multiplicación infinito de los modelos de ensamble de combustible heterogéneo y homogéneo en medio infinito. En la **Figura 6.1** se muestran los modelos heterogéneo y homogéneo de ensamble de combustible.

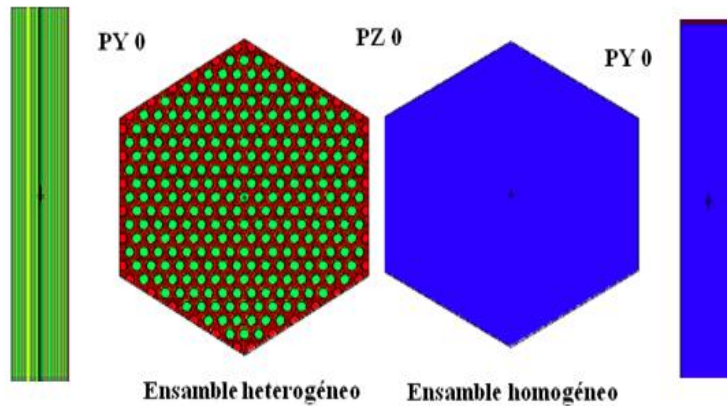


Figura 6.1 Modelos heterogéneo y homogéneo de ensamblaje de combustible; MCNPX

Tabla 6.2 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamblaje de combustible en medio infinito

Código	Homogéneo		Heterogéneo		Diferencia (pcm)
	K_{inf}	Sigma (pcm)	K_{inf}	Sigma (pcm)	
TRIPOLI-4	1.33927	89	1.33683	87	244
MCNPX	1.34292	88	1.34044	88	248

Según los resultados, existe una diferencia de aproximadamente 250 pcm entre el modelo heterogéneo y el modelo homogéneo; y de aproximadamente 300 pcm entre ambos códigos; por lo tanto es factible utilizar el modelo homogéneo para realizar cálculos de criticidad y quemado de combustible.

En lo que se refiere al tiempo de cálculo, TRIPOLI-4 ocupó 22 minutos en realizar los cálculos del modelo homogéneo y 139 minutos en realizar los cálculos del modelo heterogéneo. MCNPX ocupó 19 minutos en realizar los cálculos del modelo homogéneo y 55 minutos en realizar los cálculos del modelo heterogéneo. MCNPX sigue teniendo ventaja sobre TRIPOLI-4 en lo que corresponde al tiempo de cómputo.

6.2.2 Resultados ensamblaje de combustible con reflector axial

Los resultados del modelo de ensamblaje de combustible con condiciones de reflexión en sus 6 caras laterales y con 60 cm de material reflector en sus extremos axiales se presentan en la **Tabla 6.3**.

Tabla 6.3 Cálculos de criticidad de los modelos de ensamble de combustible con reflector axial

Código	Homogéneo		Heterogéneo		Diferencia (pcm)
	k_{eff}	Sigma (pcm)	k_{eff}	Sigma (pcm)	
TRIPOLI-4	1.20408	83	1.17291	111	3117
MCNPX	1.20793	94	1.17415	99	3378

Se observa que existe una diferencia importante entre los valores del factor de multiplicación en los modelos de ensamble de combustible que contienen reflector axial, la diferencia es de aproximadamente de 3248 pcm. El modelo heterogéneo tiene los valores más bajos, lo que hace suponer que existe una gran cantidad de fugas de neutrones en la dirección axial, posiblemente los huecos por donde fluye el refrigerante sea el factor que contribuye a la fuga de neutrones. Debido a tales diferencias, se calculó el flujo y la corriente de neutrones en las caras axiales del ensamble para saber si tales diferencias se deben a la fuga axial de neutrones.

En la **Tabla 6.4** se muestran los valores de flujo y corriente de neutrones en las caras axiales de los modelos de ensamble. Estos modelos de prueba sólo se simularon con MCNPX con condiciones de cálculo en caliente y para los mismos parámetros de control de criticidad que se utilizaron en los modelos anteriores y se utilizaron las bibliotecas de secciones eficaces ENDF-VI.

En la **Figura 6.2** se muestran las superficies en las cuales se calculó el flujo y la corriente de neutrones.

Tabla 6.4 Cálculos de flujo y corriente de neutrones de los modelos de ensamble de combustible con reflector axial, homogéneo y heterogéneo

Superficie	Modelo Heterogéneo				Modelo Homogéneo			
	Flujo n/cm^2 -seg	Sigma	Corriente n/cm^2 -seg	Sigma	Flujo n/cm^2 -seg	Sigma	Corriente n/cm^2 -seg	Sigma
1	5.68E-01	0.0022	3.21E-01	0.0018	3.88E-03	0.0019	7.52E-01	0.0016
2	5.65E-01	0.0022	3.21E-01	0.0018	3.88E-03	0.0019	7.53E-01	0.0016
3	4.03E-02	0.0051	2.69E-02	0.0037	2.27E-04	0.0036	5.13E-02	0.0026
4	4.02E-02	0.0053	2.66E-02	0.0038	2.28E-04	0.0036	5.14E-02	0.0026

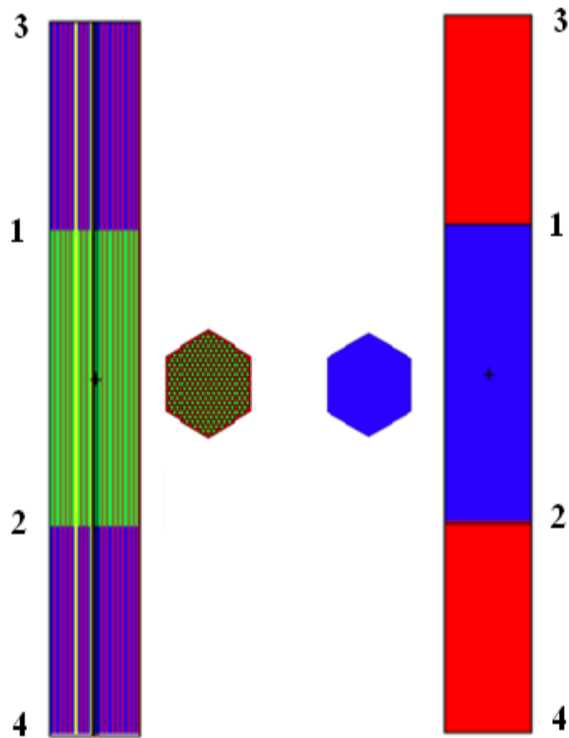


Figura 6.2 Modelos de ensamblaje de combustible homogéneo y heterogéneo con reflector axial superficies de flujo y corriente; MCNPX

Existe una diferencia importante en los valores de flujo y corriente de neutrones en los modelos heterogéneo y homogéneo. Existen valores más grandes de flujo en el modelo homogéneo y valores más grandes de corriente en el modelo heterogéneo. Según los resultados, el modelo heterogéneo presenta más fugas de neutrones que el modelo homogéneo. Los modelos con reflector axial heterogéneo tienen mayores fugas de neutrones y factor de multiplicación efectivo menor. Conviene considerar otro tipo de estructura en el reflector por ejemplo en zigzag o helicoidal de tal forma que existan barreras transversales que eviten la fuga de neutrones del sistema.

6.3 Modelos simplificados del núcleo

Se realizaron cálculos de criticidad de modelos simplificados del núcleo del reactor. Se realizaron cálculos para 5 modelos de núcleo, los cuales a continuación se enumeran:

1. Modelo heterogéneo del núcleo.

2. El modelo simplificado con sólo una región de combustible con 20% de contenido de plutonio, este modelo se considerará como modelo BASE para hacer las comparaciones con los modelos combinados.
3. Modelo combinado anular con 3 regiones de combustible, la primera en la región central del núcleo con 18% Pu; la segunda en la región intermedia con 20% Pu y la tercera en la región más externa con 22% Pu.
4. Modelo combinado anular con 3 regiones de combustible, la primera en la región central del núcleo con 18% Pu; la segunda en la región intermedia con 22% Pu y la tercera en la región más externa con 20% Pu.
5. Modelo simplificado en arreglo triangular, se diseñó con tres composiciones de combustible: 18% Pu, 20% Pu y 22% Pu acomodados de forma triangular.

En las **Figuras 6.3, 6.4 y 6.5**, se muestran las configuraciones de los modelos simplificados de núcleo del reactor.

Los cálculos se realizaron con TRIPOLI-4 a 1200 K. Los parámetros de control de criticidad que se utilizaron fueron: 1000 neutrones por ciclo, 1000 ciclos, un brinco de 30 ciclos inactivos para la distribución de fuentes, una k estimada de 1 y la fuente de neutrones colocada en el centro geométrico. Las bibliotecas de secciones eficaces que se utilizaron fueron las ENDF-VI, las cuales sólo consideran en caliente a los isótopos de U-235, U-238 y Pu-239.

En la **Tabla 6.5** se presentan resultados de factor de multiplicación efectivo de los modelos del núcleo. Los modelos diseñaron pensando en cálculos futuros donde se consideren estrategias de recarga de combustible.

Tabla 6.5 Cálculos de criticidad para modelos simplificados de núcleo del reactor GFR; TRIPOLI-4

No	Modelo	k_{eff}	sigma (pcm)
1	Heterogéneo	1.07075	103
2	Homogéneo	1.07731	100
3	ANULAR 1	1.06506	101
4	ANULAR 2	1.06771	103
5	TRIANGULAR	1.07391	104

Según los resultados de la **Tabla 6.5**, existe una diferencia de 656 pcm entre el modelo homogéneo y heterogéneo, siendo mayor el exceso de reactividad en el modelo homogéneo. Todos los modelos homogéneos presentan valores más altos de factor de multiplicación que el modelo heterogéneo.

En lo que se refiere los resultados de los modelos combinados, el modelo ANULAR1 tiene un valor del factor de multiplicación menor que el del modelo de referencia donde se tiene una sola composición de combustible. El modelo ANULAR2 muestra un valor más alto de factor de multiplicación; se obtuvo una ganancia en reactividad de 270 pcm sólo por haber dejado en la parte más externa el combustible con concentración promedio (20%). El modelo TRIANGULAR

tiene un factor de multiplicación más alto que el de los modelos ANULARES y muy cercano al modelo de referencia modelo simplificado con una región de combustible.

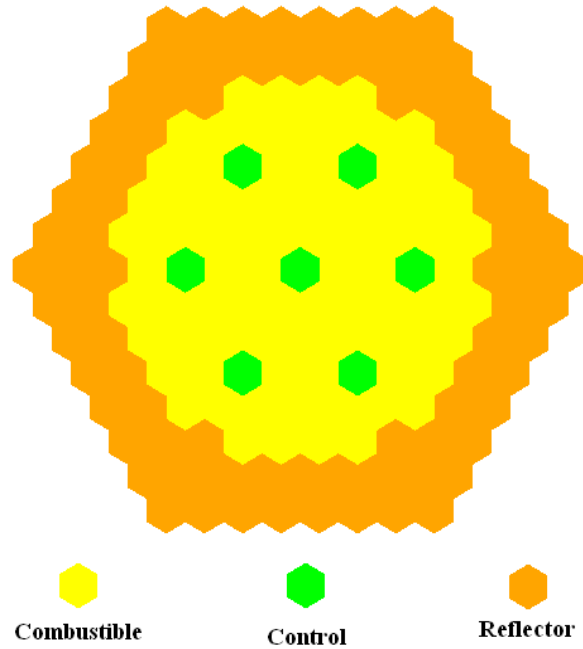


Figura 6.3 Modelo simplificado del núcleo del reactor con una composición de combustible 20% Pu en la mezcla de metal pesado; PZ=0; TRIPOLI-4

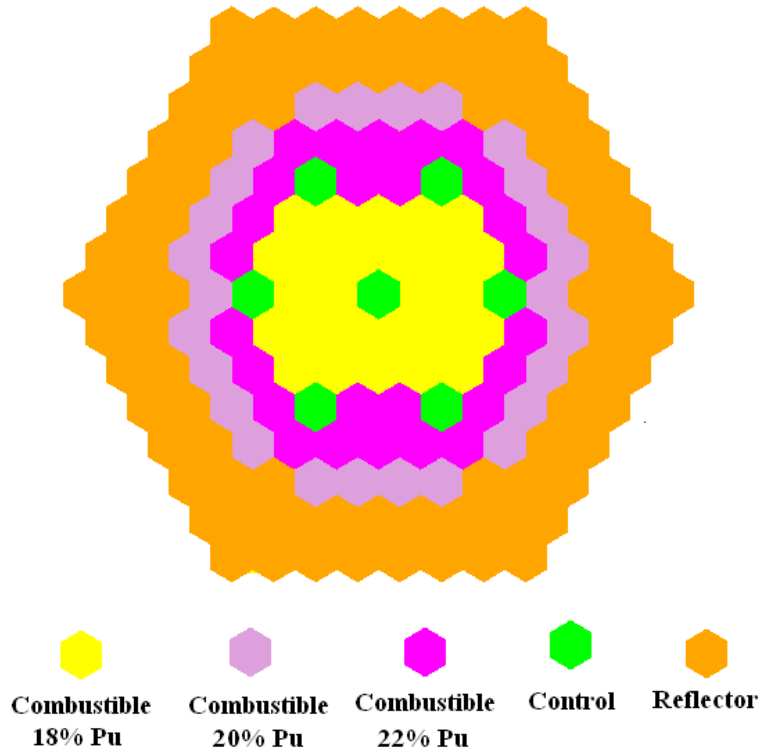


Figura 6.4 Modelo combinado simplificado del núcleo del reactor tipo ANULAR

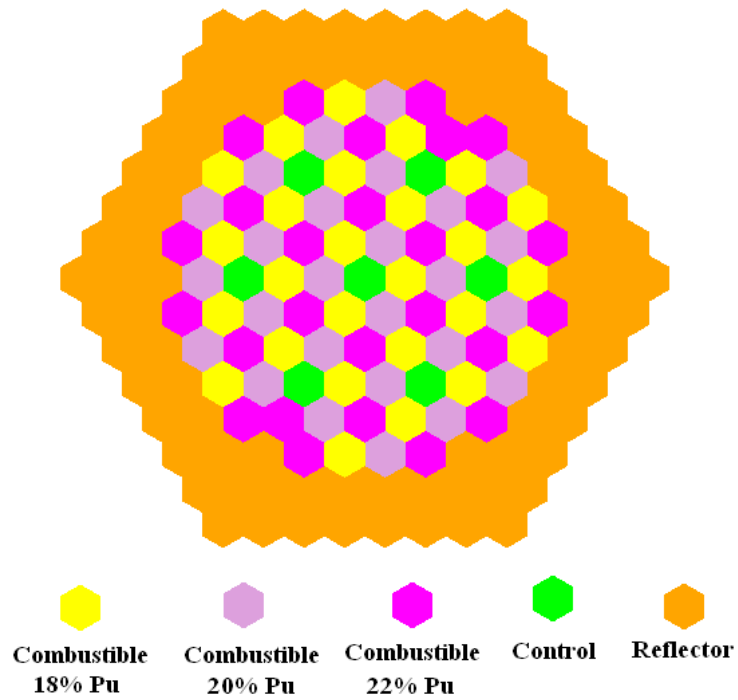


Figura 6.5 Modelo combinado simplificado del núcleo del reactor tipo TRIANGULAR; PZ=0; TRIPOLI-4

CONCLUSIONES

Se trabajó con el diseño del combustible y del núcleo del reactor GFR. Se utilizaron los códigos de cómputo MCNPX y TRIPOLI-4 para realizar los cálculos de criticidad de los diferentes modelos que se simularon con el objetivo de diseñar el modelo de combustible y del núcleo desde el punto de vista neutrónico. Se concluye lo siguiente:

Se utilizaron los códigos de cómputo MCNPX-C90 y TRIPOLI-4-D y tres métodos de cálculo MCNPX CSADA, TRIPOLI-4-D CSADA y TRIPOLI-4 ELUER para realizar cálculos de quemado de un modelo homogéneo de ensamble de combustible en medio infinito. Se observó que los resultados no presentan grandes diferencias y que TRIPOLI-4-D quema más rápido que MCNPX-C90. Existe una concordancia perfecta en la evolución de los materiales en función del tiempo de irradiación. TRIPOLI-4-D EULER ocupa la mitad de tiempo en realizar los cálculos de quemado sin diferencias significativas en los resultados, por lo tanto es factible ocupar un método de primer orden para realizar los cálculos de quemado.

Se propusieron dos modelos de ensamble de combustible, uno basado en arreglo de varillas y el otro en matriz inerte con dispersión de esferas. De acuerdo a los resultados, se verificó que el modelo basado en varillas de combustible hace mejor uso del material fisil, por lo tanto se seleccionó este modelo para el diseño del núcleo del reactor.

De acuerdo con los resultados obtenidos de los parámetros de control de criticidad, se observó lo siguiente:

1. El coeficiente de reactividad por aumento de temperatura del combustible es negativo;
2. El coeficiente de reactividad por disminución de la densidad del refrigerante produce un efecto positivo en la reactividad, pero en menor magnitud que el coeficiente de reactividad por cambio de temperatura del combustible.
3. El coeficiente de reactividad por expansión térmica del combustible produce un efecto negativo muy pequeño en la reactividad del sistema.
4. El efecto global de aumento de temperatura, disminución de densidad de refrigerante y dilatación volumétrica de los materiales es negativo.

Se realizaron pruebas de criticidad de tres materiales reflectores (SiC, ZrC y U_{nat}) y de acuerdo con los resultados, se encontró que el carburo de zirconio es el mejor reflector.

En base a los resultados obtenidos de los cálculos realizados a diferentes modelos de combustible y del núcleo del reactor; se propone la siguiente configuración del núcleo: 78 ensambles de combustible, 84 ensambles de reflector y 7 ensambles de control, cuyas dimensiones son: 100 cm de altura de combustible activo, 60 cm de espesor de reflector axial, 44 cm de espesor de reflector radial, un diámetro equivalente de 207 cm.

Se realizaron cálculos de criticidad de modelos compuestos por una mezcla homogénea de combustible. De acuerdo a los resultados, no existen diferencias considerables en los resultados de modelos homogéneos y heterogéneos. Es factible hacer cálculos de quemado de combustible

de modelos homogéneos para este tipo de reactor, debido a que las trayectorias libres medias de un modelo heterogéneo y las de un modelo homogéneo son similares debido a que la mayoría de las reacciones se llevan a cabo en el espectro de altas energías.

Como trabajo a futuro se tiene contemplado lo siguiente:

1. Realizar cálculos de quemado del núcleo, considerando el ciclo de combustible uranio-plutonio como ciclo abierto.
2. Realizar cálculos de modelos simplificados del núcleo considerando mezcla de actínidos en el combustible como ciclo cerrado.
3. Hacer cálculos de quemado de modelos combinados del núcleo también como ciclos cerrados de combustible.

ANEXO A

MCNPX-CINDER90

MCNPX evolución es un proceso encadenado que involucra cálculos de flujo en estado estable realizados con MCNPX, y cálculos de evolución de los núclidos realizados con CINDER90. MCNPX realiza cálculos en estado estable para determinar los valores propios del flujo, las tasas de reacción, la multiplicidad de fisión (γ), y la energía recuperada por fisión, de 63 grupos de energía. CINDER90 entonces toma esos valores generados y realiza los cálculos de quemado para generar los nuevos valores de las densidades del siguiente paso de tiempo. MCNPX toma ese nuevo número de densidades y genera otro grupo de flujos y tasas de reacción. El proceso se repite hasta el paso final de tiempo especificado por el usuario.

MCNPX calcula parámetros sólo para aquellos materiales enumerados en las tarjetas de material de MCNPX, aquellos producidos por el algoritmo generador de isótopos, o seleccionados por la serie de productos de fisión. Cuando la información no ha sido especificada en MCNPX, CINDER90 rastrea las reacciones dependientes del tiempo de 3400 isótopos, usando datos de decaimiento y de secciones eficaces intrínsecas, inherentes al código CINDER90. MCNPX solo es capaz de dar seguimiento a tasas de reacción de energía integrada de aquellos isótopos que contienen secciones eficaces de transporte. Para aquellos isótopos que no contienen tal información, MCNPX calcula flujos de 63 grupos de energía que es enviado a CINDER90, información que coincide con un grupo de secciones eficaces de los 63 grupos de energía inherentes en CINDER90, con tal información se generan las tasas de reacción de 63 grupos de energía. Esas tasas de reacción integradas a la energía para determinar las reacciones totales que ocurren en el sistema.

Para que MCNPX realice los cálculos de quemado de los materiales correctamente, el usuario debe poner el archivo de la biblioteca CINDER.dat. Este archivo contiene datos de secciones eficaces de 63 grupos de energía y rendimientos de fisión, no calculados por MCNPX. CINDER90.dat puede ser accedido correctamente por el código si el archivo es colocado en el directorio de trabajo en el cual el usuario está ejecutando MCNPX. Si MCNPX no encuentra el archivo CINDER90.dat, aparecerá un mensaje de error fatal y el cálculo se detendrá.

Cálculos del inventario de núclidos en el tiempo, alcance CINDER90.

CINDER90 utiliza probabilidades de tasas de reacción de energía integrada y decaimiento junto con información de rendimiento de fisión para calcular la acumulación de núclidos y su agotamiento en el tiempo. La biblioteca de datos en CINDER90, reside en el archivo CINDER.dat, incluye datos de decaimiento de isótopos y datos de probabilidad de interacción para 3400 isótopos, incluyendo 30 grupos de rendimiento de fisión, y datos de rendimiento para 1325 productos de fisión.

La ecuación de quemado para un isótopo especificado es:

$$\frac{dN_m}{dt} = -N_m(t)\beta_m + \bar{Y}_m + \sum N_k(t)\gamma_{k \rightarrow m} \quad (\text{A1})$$

Donde:

β_m = a la probabilidad de transmutación total del isótopo m,

$\gamma_{k \rightarrow m}$ = la probabilidad de transmutación del isótopo k, por decaimiento o absorción, en el isótopo m,

Y_m = La tasa de producción,

$N_m(t)$ = La densidad atómica dependiente del tiempo del isótopo m.

Esta ecuación es no lineal porque las probabilidades de transmutación dependen del flujo integrado en el tiempo, el cual también depende de las densidades que dependen del tiempo. Para linearizar el proceso, las probabilidades de transmutación son consideradas como constantes a través del paso de tiempo. El grupo de ecuaciones diferenciales usado para resolver la acumulación o el agotamiento de un núclido en el tiempo de un sistema isótopos es acoplado tal que cada ecuación contiene información de la densidad del isótopo dependiente del tiempo de otros núclidos. En lugar de tratar de resolver una gran matriz dispersa de ecuaciones usando el método de la matriz exponencial, el grupo de ecuaciones acopladas en CINDER90 es reducido a un grupo de ecuaciones diferenciales lineales usando el método de Markov³³. Las cadenas lineales son creadas para la trayectoria de transmutación de cada isótopo, comenzando de las concentraciones de los isótopos especificados al inicio, generando las siguientes ecuaciones:

$$\frac{dN_i}{dt} = Y_i + N_{i-1}(t)\gamma_{i-1} - N_i(t)\beta_{i-1} \quad (A2)$$

Donde las cantidades son ahora indexadas por el orden en el cual aparecen dentro de una secuencia dada, y γ_{i-1} es la probabilidad de transmutación de que se forme el núclido del elemento N_i . Las soluciones de cada cadena lineal determinan una densidad parcial del núclido N_i , y se calcula por la siguiente ecuación:

$$N_n(t) = \prod_{k=1}^{n-1} \gamma_k \left\{ \bar{Y}_m \left[\frac{1}{\prod_{l=1}^n \beta_l} - \sum_{j=1}^n \frac{e^{-\beta_j t}}{\prod_{i=1, \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] + N_1^0 \sum_{j=1}^n \frac{e^{-\beta_j t}}{\prod_{i=1, \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right\} \quad (A3)$$

Cada densidad parcial del núclido calculado, N_i , calculada de la cadena lineal, se suma entonces para obtener el inventario total del núclido N_m . La ecuación diferencial que gobierna el cálculo de $N(t)$ no está acoplada a ningún elemento anterior en la secuencia que conduce al i-ésimo elemento.

³³ Fensin M. L. et al., 2008. Monte Carlo Burnup Interactive Tutorial. Los Alamos National Laboratory. American Nuclear Society. Summer Meeting. pp. 17-61. Anaheim. CA.

MCNPX calcula tasas de reacción de energía continua integrada para todos los isótopos que contienen información de sección eficaz de transporte, las tasas de reacción son las siguientes:

- | | |
|------------------------|------------------------|
| 1. Neutrón-gamma | 4. Neutrón-3 neutrones |
| 2. Neutrón-fisión | 5. Neutrón-alfa |
| 3. Neutrón-2 neutrones | 6. Neutrón-protón |

CINDER90 debe usar los flujos de 63 grupos de energía calculados con MCNPX para determinar el resto de las tasas de interacción que se acumulan en el proceso de transmutación, así como determinar la información de las tasas de reacción de los isótopos que no se tiene información de sección eficaz.

Método de promediado de sección eficaz para la aceleración del quemado CSADA (The Cross-Section Averaging for Depletion Acceleration Method, CSADA)

Las ecuaciones de quemado usan flujos, densidades de los núclidos y secciones eficaces para determinar el inventario de núclidos que dependen del tiempo.

MCNPX hace una aproximación del comportamiento del flujo promedio mediante el uso de la técnica *CSADA*. Esta técnica involucra los siguientes procesos multi-paso:

1. Un cálculo de quemado es realizado en CINDER90 hasta la mitad del paso [$t(i) \rightarrow t(i+1/2)$], (paso predictor).
2. Los flujos y las densidades de colisión son re-calculados en estado estable con MCNPX a la mitad del paso.
3. Los flujos re-calculados y las densidades de colisión se usan entonces para realizar el cálculo de quemado del paso completo [$t(i) \rightarrow t(i+1)$] (paso corrector).

Los flujos y las densidades de colisión re-calculados a la mitad del paso de tiempo se asume que son los flujos y las densidades de colisión promedio encontrados durante el paso de tiempo completo. Esta aproximación es verdadera sólo si la forma del flujo cambia linealmente entre 2 pasos de tiempo; esta técnica es una aproximación aceptable. Implementando esta técnica permite al usuario obtener el quemado de un sistema usando pocos pasos de quemado.

Tarjetas de quemado

Para realizar los cálculos de quemado se deben escribir en la sección de tarjetas de datos del archivo de entrada MCNPX, los datos correspondientes a las tarjetas de quemado, mismos que a continuación se describen:

BURN: Tarjeta de quemado, se escribe al inicio de la sección de parámetros de quemado.

TIME: con esta tarjeta se especifican los pasos de quemado o el tiempo de irradiación en días.

PFRAC: Se especifica la fracción de potencia para cada paso de quemado, es igual a 1 por omisión.

POWER: Nivel de potencia térmica (MW), 1 MW por omisión.

BOPT: Especifica, el valor del multiplicador Q (se explicará más adelante), la serie de productos de fisión (tier) y el orden salida del inventario de materiales.

MAT: Lista del número de materiales a los cuales se les realizará cálculos de quemado.

OMIT: Esta opción se utiliza para omitir el rastreo de algunos isótopos que se consideren de poca o nula importancia en los cálculos de inventario de los materiales. Con el objetivo de hacer más rápido el cálculo de quemado.

AFMIN: Especifica el intervalo de valores en el cual tiene sentido realizar los cálculos de evolución de los materiales, y se especifica en base a dos parámetros: 1) El valor mínimo de fracción atómica debajo del cual la fracción atómica de cada isótopo es considerada como cero. 2) Criterio de convergencia de la cadena de quemado en CINDER90, el valor por omisión de este parámetro es de $1e-10$, si se aumenta este valor a $1e-4$, provoca que CINDER90 corra más rápido pero con poca precisión en el seguimiento de la cadena de decaimiento.

MATVOL: Especifica el volumen total de todas las celdas que contienen material a ser quemado.

MATMOD: Se utiliza esta opción si se desea cambiar manualmente la concentración de algún núclido en cualquier paso de tiempo.

Parámetros de normalización de flujo

MCNPX genera densidades de colisión para los cálculos de quemado de CINDER90. Esas densidades de colisión son normalizadas por fuente de neutrones. CINDER90 requiere un flujo total para quemar el sistema correctamente. El siguiente multiplicador de flujo transforma el flujo normalizado de MCNPX en un flujo total para los cálculos de quemado en CINDER90.

$$\phi_{total} = \phi_{MCNPX} \times \text{Multiplicador de Flujo} \Rightarrow \text{Multiplicador de Flujo} = \frac{\text{Nivel de Potencia} \times v}{Q \times k_{eff}} \quad (A4)$$

MCNPX calcula los valores de energía liberada por fisión Q y por neutrones promedio producidos por fisión v . El nivel de potencia usado para los cálculos de multiplicador de flujo es la potencia de entrada, es el valor que se le asigna a la tarjeta POWER de la sección de datos del archivo de entrada. El valor Q usado en los cálculos es un estimado de la energía recuperable por evento de fisión. Actualmente, MCNPX toma la energía recuperable inmediata por evento de fisión y multiplica ese valor por un factor de normalización constante (1.111) que fue calculado por la división de 200 MeV por la energía liberada en un evento de fisión inmediata del U-235. El factor de normalización constante 1.111 es un estimado de la contribución de la energía de fisión retardada y la contribución de la energía captura-gamma.

La contribución de energía captura-gamma es altamente dependiente de la geometría del sistema, y además, la constante puede o no puede estimar el valor Q correctamente. Si se subestima Q conduce a una sobrestimación de los flujos y las densidades de colisión. Debido a que la ecuación de quemado de los núclidos es:

$$\frac{dN(r,t)}{dt} \approx - \sum_i^E \phi_i(r,t) \Sigma_i(r,t) N_i(r,t) \quad (A5)$$

Es altamente dependiente de las densidades de colisión, si se incrementan las densidades de colisión conduce a una sobrestimación del quemado del material. En la capacidad de evolución actual, se utilizan tres métodos para corregir esta sobrestimación:

1. Ajustando el multiplicador **Q** (primer valor de BOPT, 1 por omisión)
2. Modificando la energía recuperable del sistema térmico total por el ajuste del nivel de potencia, comando POWER en el archivo de entrada.
3. Alterando la potencia del sistema con la opción PFRAC que regula la fracción de potencia en el sistema.

Proceso de selección de rendimiento de fisión automática

El código CINDER90 ofrece un rendimiento de fisión en los espectros de energía alta, rápida y térmica, para cada isótopo fisible contenido en la biblioteca CINDER.dat. Se usa el rendimiento correcto de fisión para un problema específico.

MCNPX determina qué rendimiento de fisión se usará para un problema específico por el cálculo de la tasa de fisión para los límites de energía definidos (térmico, rápido y alta energía), determinando qué intervalo de energía contiene la mayoría de las fisiones y entonces selecciona el rendimiento de fisión apropiado para el intervalo de energía que contiene la mayoría de fisiones en cada paso de tiempo. Este cálculo se completa en forma separada para cada material quemado.

Toneladas métricas de uranio (Metric Tonnes of Uranium, MTU)

MCNPX enumera el quemado en unidades de GWd/MTU. El término MTU calculado en MCNPX es actualmente la suma de las masas de los isótopos que contienen más de 90 protones. Además el torio y el plutonio contribuyen a los cálculos de MTU.

Algoritmo Generador de Isótopos

Capturando cada uno de los productos de la cadena de decaimiento de cada uno de los isótopos parientes iniciales para transporte en MCNPX podría ser un proceso que utilizaría gran cantidad de memoria. Aunque CINDER90 rastrea datos de sección eficaz, quemado y decaimiento para 3400 isótopos, muchos de esos isótopos no contienen información de transporte útil para MCNPX. Para ahorrar tiempo de cálculo y reducir el flujo de información no importante si un isótopo es especificado sobre una tarjeta de material, sólo los productos hijos inmediatos son rastreados en MCNPX para cálculos de transporte de partículas. CINDER90 rastrea todas las reacciones de decaimiento para 3400 isótopos, además las concentraciones isotópicas totales enumeradas en MCNPX son las concentraciones verdaderas del proceso de quemado. Sin embargo en los cálculos en estado estable, el modelo de transporte de partículas incluye sólo aquellos isótopos enumerados en las tarjetas de material, seleccionados por la serie de productos de fisión y producidos por el algoritmo generador de isótopos.

En la Figura A1 se muestran los isótopos generados por un isótopo que tiene $Z > 4$. La localización de cada isótopo generado corresponde a la posición de ese isótopo tal como éste podría aparecer en la carta de núclidos.

			${}^3\text{He}_{\text{entrada}}$	α_{entrada}
	β^-_{salida}	p_{entrada}	d_{entrada}	t_{entrada}
	n_{salida}	Núcleo original	n_{entrada}	
t_{salida}	d_{salida}	p_{salida}	β^+_{salida} ϵ	
α_{salida}	${}^3\text{He}_{\text{salida}}$			

n = neutrón α = partícula alfa
 p = protón β^- = beta menos (electrón)
 d = deuterón β^+ = beta más (positrón)
 t = Tritón ϵ = Captura electrónica

Figura A1 Posiciones relativas de los productos de varios procesos nucleares en la carta de núclidos

TRIPOLI-4-DEPLETION

TRIPOLI-4-D Funciona a partir de códigos de acoplamiento escritos en programas en lenguaje C++, los cuales involucran cálculos de criticidad en estado estable y cálculos de quemado. (Realiza cálculos de criticidad en TRIPOLI-4 y cálculos de quemado en MENDEL).

Los cálculos de quemado de cualquier modelo se hacen considerando algunos aspectos del modelo a calcular. Se necesita conocer el volumen en evolución, la cadena de evolución, la composición inicial del material en evolución, los pasos de quemado, y valores correspondientes a los parámetros de control de criticidad y quemado de combustible. Cada uno de los elementos antes mencionados quedan determinados por archivos de entrada que se encuentran en directorios contenidos en un directorio de cálculo puesto que este directorio contiene la mayor parte de la información del modelo a calcular.

Para realizar los cálculos de la evolución del combustible en el tiempo, es necesario tener en cuenta los siguientes requisitos:

- El volumen de la zona compuesta por combustible.
- La densidad de potencia del combustible en W/g de actínidos.
- La potencia del sistema, (en este caso la potencia del ensamble)
- La densidad en gramos de metal pesado por unidad de volumen.

Con esos datos, se necesita crear un directorio que contenga los siguientes archivos:

1. El archivo de entrada del modelo a calcular: Tiene que estar modificado con respecto al modelo de cálculos a cero quemado, para que el código de evolución lo reconozca.

2. Crear un archivo que contenga únicamente la sección de la composición del archivo que realiza los cálculos estacionarios (el nombre de este archivo debe ser “*composini.jdd*”).
3. Crear un archivo de entrada que contenga la magnitud de los distintos volúmenes a los cuales se les realizará el cálculo de la evolución de combustible. Tantos volúmenes según las distintas regiones consideradas en los cálculos de quemado.
4. Crear un archivo de entrada que contenga los pasos de quemado en (MW/TMU).
5. Crear un archivo en blanco con los nombres « *reponses.jdd* ». Es donde se escribirán las funciones de respuesta y los valores de quemado (k-col en función del quemado).
6. Crear un archivo en blanco con el nombre « *scores.jdd* ». Es donde el código escribirá los marcadores.
7. También se necesita crear un archivo que contenga la cadena de evolución de los distintos isótopos a los que se desee obtener información en cuanto a su evolución en el tiempo, junto con sus principales tasas de reacción [(n, 2n), (n, γ), fisión y reacción total].
8. Se necesita introducir una malla de energía en un archivo de entrada, las mallas de energía que se ocupan en los cálculos de las tasas de reacción están divididas en tres grupos: a) Altas energías (20 MeV a 0.4 eV) y b) Energías térmicas (0.4 eV a 1e-11 eV). Y una malla de energía de 281 grupos para los cálculos del flujo de neutrones.
9. Crear un archivo que contenga las energías de fisión y captura de cada isótopo considerado en la cadena de evolución (ver el punto 7). Este archivo junto con el de la cadena de evolución fue proporcionado por los investigadores que están desarrollando TRIPOLI-4-D.
10. Crear un archivo que dé seguimiento a los distintos isótopos producto de las tasas de reacción en el combustible y la evolución del mismo. El nombre del archivo es isótopos-tier y hace seguimiento de 162 isótopos. Si se desea restringir el número de resultados a un grupo en especial en tal archivo sólo se escribe el símbolo de los tales isótopos y si se desea dar seguimiento a la totalidad de los 162 isótopos se escribe; “All”, para que se incluya la totalidad de los isótopos en los archivos de salida de cada paso de quemado. La Tabla A1 muestra la tier (serie) de los isótopos a los cuales se les da seguimiento con el código TRIPOLI-4-D.

TABLA A1 Serie de isótopos a los que le da seguimiento TRIPOLI-4-D

NO.	Datos por isótopo	Isótopo	NO.	Datos por isótopo	Isótopo	NO.	Datos por isótopo	isótopo
1	1	RB85	55	1	U236	109	2	SM153
2	2	NB95	56	1	AM241	110	2	EU154
3	2	MO96	57	1	AM242M	111	2	EU155
4	2	MO95	58	1	AM243	112	2	EU156
5	2	TC99	59	1	U237	113	2	EU157
6	2	RU100	60	1	U238	114	2	GD160
7	2	RH103	61	1	NP238	115	2	TB160
8	2	RH105	62	1	NP239	116	2	DY165
9	2	PD105	63	1	PU240	117	1	U233
10	2	CD110	64	1	PU241	118	1	PU236
11	2	TE125	65	1	PU242	119	1	CM242
12	2	I127	66	2	SE79	120	1	CM243

13	2	II29	67	2	KR85	121	1	CM244
14	1	XE130	68	2	RB87	122	1	CM245
15	2	II31	69	2	SR90	123	1	CM246
16	2	XE131	70	2	ZR93	124	1	CM247
17	2	XE135	71	2	ZR94	125	1	CM248
18	2	CS133	72	2	ZR95	126	2	BR81
19	2	BA134	73	2	ZR96	127	2	KR83
20	2	CS135	74	2	MO98	128	2	KR84
21	1	BA136	75	2	MO99	129	2	KR86
22	2	XE134	76	2	MO100	130	2	SR88
23	2	BA135	77	2	RU103	131	2	Y89
24	1	BA137	78	2	RU105	132	2	ZR91
25	2	CE140	79	2	RU106	133	2	ZR92
26	2	PR141	80	2	PD107	134	2	MO97
27	2	ND142	81	2	PD110	135	2	RU101
28	2	ND143	82	2	AG110M	136	2	RU102
29	2	PM147	83	2	CD113	137	2	RU104
30	2	SM148	84	2	CD114	138	2	PD104
31	2	SM150	85	2	IN115	139	2	PD106
32	2	SM147	86	2	SB125	140	2	PD108
33	2	PM148	87	2	TE127M	141	2	AG109
34	2	SM149	88	2	TE128	142	2	CD111
35	2	SM151	89	2	TE129M	143	2	CD112
36	2	ND144	90	2	TE130	144	2	SB121
37	2	ND145	91	2	TE131M	145	2	SB123
38	2	EU151	92	2	II35	146	2	XE132
39	2	EU153	93	2	XE133	147	2	BA138
40	1	GD152	94	2	XE136	148	2	LA139
41	1	GD153	95	2	CS134	149	2	ND146
42	2	GD154	96	2	CS136	150	2	SM152
43	2	SM154	97	2	CS137	151	2	GD158
44	2	GD155	98	2	LA140	152	2	TB159
45	2	GD156	99	2	CE141	153	2	DY161
46	2	GD157	100	2	CE142	154	2	DY162
47	2	DY160	101	2	CE144	155	2	DY163
48	2	HO165	102	2	PR143	156	2	DY164
49	1	NP137	103	2	ND147	157	1	ER166
50	1	PU238	104	2	ND148	158	1	O17
51	1	PU239	105	2	ND150	159	1	O16
52	1	U232	106	2	PM148M	160	1	HE3
53	1	U234	107	2	PM149	161	1	H3
54	1	U235	108	2	PM151	162	1	LI6

Es necesario conocer bien la ruta del directorio que contiene todos los archivos especificados en los puntos anteriores, ya que se escribirá en un archivo de acoplamiento de TRIPOLI-4 y el código de quemado.

En el directorio /Trident está el acoplamiento, aquí existen algunos directorios a considerar:

/Trident

Examples

/Trident/examples

Tales parámetros de quemado se introducen en archivos de entrada que se colocan en diversos directorios contenidos en un directorio principal. A continuación se describen tales directorios:

1. **T4jdd**: Contiene el archivo de entrada principal del modelo a calcular; el archivo que contiene la magnitud del volumen o volúmenes en evolución y el archivo de la composición o composiciones iniciales de los materiales en evolución.
2. **Evolmacros**: es el escrito de acoplamiento, aquí se colocan las diferentes rutas de las cuales, el programa de acoplamiento tomará los archivos que requiere para realizar los cálculos de evolución. En el archivo de acoplamiento se necesita verificar las rutas de las siguientes líneas de comando, puesto que el código tomará los distintos datos de las rutas que se señalen en el archivo de acoplamiento.
directory; ruta del directorio donde estamos
chema; directorio de acoplamiento,
t4_input_file; ruta del directorio donde se encuentran los archivos TRIPOLI-4i,
t4jdd; están todos los datos que se refieren a TRIPOLI-4,
t4_nuclear_data; en tripoli4 normal es la ruta o la dirección de las bibliotecas de las secciones eficaces (la sección -c en la línea de comandos para correr TRIPOLI-4 normal).
t4-xs format; la opción -s en la línea de comandos en TRIPOLI-4 normal, usar NJOY o TABPROB,
t4-output-file; nombre del archivo de salida de cada paso de quemado,
t4_graph: Paralelismo, se necesita construir un archivo de entrada.

Es necesario verificar que los siguientes directorios contengan unos archivos necesarios para la correcta ejecución del código:

1. /results: Aquí se ponen los resultados de salida TRIPOLI-4.
 - compos.jdd: archivo de la composición del modelo.
 - reponses.jdd: archivo de las respuestas al principio vacío.
 - scores.jdd: archivo de los marcadores al inicio vacío.
2. /t4jdd: Archivos de entrada TRIPOLI-4
 - Archivo de entrada TRIPOLI-4 modificado.
 - Archivo de composición inicial.
 - Archivo de las mallas de energía.
 - Archivo de volúmenes.
3. /xdata:

- Archivo de la cadena de evolución.
- Archivo de los pasos de quemado.
- Archivo de las energías de fisión y captura de cada isótopo considerado en la cadena de evolución.

Si se desea correr un modelo desde el inicio, se necesita cambiar de directorio, se debe abrir el archivo « launchTrident.C para cambiar la línea de código.

Escribir en el archivo de entrada, las rutas para los archivos scores.jdd, reponses.jdd, mallas de energía y composición (compos,jdd).

En la sección de evolución especificar bien la ruta.

En el archivo de entrada se pone el comando con las instrucciones y valores del modelo para la evolución del combustible.

La sección donde se escriben tales parámetros se detalla a continuación:

EVOLUTION

EVOLREPERTOY Ruta del directorio donde están todos los archivos para la evolución.

BURNUPFILE nombre del archivo de los pasos de quemado.

EVOLCHAIN nombre del archivo de la cadena de evolución.

ENERGYFILE nombre del archivo de las energías.

FUELPOWERDENSITY valor de la densidad de potencia en [MW/TMU].

FUELDENSITY valor de la densidad de metal pesado en [gramos/cm³].

EVOLCOMPOLIST lista de nombres de las composiciones que evolucionan.

FIN_COMPOLIST

RESULTFILE nombre del archivo de salida para la evolución; el código lo coloca en la carpeta **results**.

FIXEDSORCE *no* cuando se conoce su intensidad se puede poner *yes*, si ese fuera el caso, no es necesario poner criticidad y especificar mejor la fuente, cuando se pone *no* es necesario poner criticidad.

COMPUTEENERGY *no* es el archivo de las energías, si es *yes* entonces se utiliza TRIPOLI-4.

RANDOM *no* se utiliza.

Con la información anterior y los archivos requeridos, es posible calcular modelos quemado de combustible y la evolución de los materiales.

BIBLIOGRAFIA

1. Ch. D. Harmon, II, R. D. Busch, J. F. Briesmeister, R. A. Foster, “Criticality Calculations with MCNP; A Primer”, Los Alamos National Laboratory, New Mexico.
2. J. P. Both, A. Mazzolo, Y. Pénéliou, O. Petit, B. Roesslinger, “User manual for Version 4.3 of the TRIPOLI-4 Monte-Carlo method particle transport computer code”, DEN/DM2S/SERMA/LEPP/CEA/Saclay 91191 Gif-sur-Yvette CEDEX FRANCE.
3. Ricardo Reyes-Ramírez, Cecilia Martín-del-Campo, Juan Luis Francois, Emeric Brun, Erick Dumonteil, Fausto Malvagi, “Comparison of MCNPX-C90 and TRIPOLI-4-D for fuel depletion calculations of a Gas-cooled Fast Reactor”, *Annals of Nuclear Energy*, 37, 2010.
4. U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee and The Generation IV International Forum, “A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems”, December (2002).
5. Meyer, M.K., 2004. Report on the Feasibility of GFR Fuel for Minor Actinide Management. Rev. 0, 8/30/04. Argonne National Laboratory, USA.
6. Khalil, H., 2004. The Gas-Cooled Fast Reactor System. America's Nuclear Energy Symposium 2004, Miami Beach, Florida, U.S.A.
7. Akira OMOTO, “Nuclear Power”, DIR-NENP, IAEA, 2007.
8. Yutai Katoh, Thak-Sang Byun and Randy K. Nanstad, “Materials Fabricated For Futurix-Mi Experiment, Gen IV Nuclear Energy Systems, U.S. DEPARTMENT OF ENERGY, ORNL May, (2005).
9. F. Carre, “Gas Cooled Fast Reactor (GFR)”, Generation IV R&D Scope Meeting Boston, Massachusetts, USA, June 25, (2002).
10. K. D. Weaver, E. E. Feldman, J. Gan, W. F. Gale, M. J. Driscoll, K. Czerwinski, “Gas-Cooled Fast Reactor (GFR) FY04 Annual Report”, GENIV Nuclear Energy Systems, September 30 (2004).
11. Cathy J. Barnard, Technical integrator, “Generation IV Nuclear Energy Systems Program”, External Release Idaho National Laboratory, September 2007.
12. R. Jacqmin, “Gas-cooled Reactor Core Physics R&D Activities in France”, Gen-IV Reactor Physics Workshop, p. 21, CEA, Chicago, April 30, (2004).
13. P. Hejzlar, V. Dostal, M.J. Driscoll, P. Dumaz, G. Poullennec and N. Alpy. “Assessment of Gas Cooled Fast Reactor with Indirect Supercritical CO₂ Cycle”, *Nuclear Engineering and Technology ICAPP 2005*, Vol. 38, p. 110, 112 (2005).
14. Martin, M. Tourasse, N. Chauvin, Ph. Brossard, D. Warin, “Progress in Fuels for Fast Reactors”, OECD/NEA, IEMPT-9, september 26-29, 2006, Nîmes, France.
15. K. D. Weaver (INEEL), T. Y. C. Wei (ANL), E. E. Feldman (ANL), M. J. Driscoll (MIT), H. Ludewig (BNL), T. Marshall (INEEL), “Generation IV Nuclear Energy Systems – The Gas-Cooled Fast Reactor (GFR), Report on Safety System, Design for Decay Heat Removal, September (2003)
16. Ricardo Reyes R., Cecilia Martín-del-Campo M., Juan Luis Francois L. “Estudio de Ensamblajes de Combustible para el Reactor Nuclear GFR”, XIX Congreso Anual de la SNM, Mérida Yucatán, México, del 6 al 9 de Julio 2008.
17. H. Khalil, “The Gas-Cooled Fast Reactor System”, Argonne National Laboratory, United States (2005).

18. P. Dumaz, P. All`egre, C. Bassi, T. Cadiou, A. Conti, J.C. Garnier, J.Y. Malo, A. Tosello, “Gas cooled fast reactors – Status of CEA preliminary design studies”, *Direct Nuclear Engineering and Design*, March 2007.
19. Ricardo Reyes R., Cecilia Martín-del-Campo M., “Simulador del Ciclo de Potencia del Reactor Nuclear Rápido Refrigerado por Gas”, *Simposio LAS/ANS 2007, XVIII Congreso Anual de la SNM, XXV Reunión Anual de la SMSR, Copatrocinado por la AMEE*, Cancún, Quintana Roo, MÉXICO, del 1 al 5 de Julio 2007.
20. F.J. Ceballos, *Visual Basic Versión 5 Curso de Programación*, Editorial RA-MA, Madrid, España (1997).
21. J.Y. Malo, T. Mizuno, T.Y.C. Wei, C. Mitchell, P. Coddington, “GIF GFR end-of-exploratory phase design and safety studies”, *International Conference on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”*, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
22. Fensin M. L. et al., 2008. Monte Carlo Burnup Interactive Tutorial. Los Alamos National Laboratory. American Nuclear Society. Summer Meeting. pp. 17-61. Anaheim. CA.
23. Petit O. et al., 2008. TRIPOLI-4 Version 6 User Guide. SERMA/LTSD/RT/09-4742/A CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France.
24. Hendricks, J.S., et al., 2008. MCNPX 2.6.0 Extensions. Los Alamos National Security, LLC.
25. Tsilanizara, A., Lahaye, S., Brun, E., 2009. Etat du solveur Evolution et les premières vérifications, SERMA/LLPR/RT/09-4640/A, CEA Saclay 91191Gif-sur-Yvette 292, Cedex, France.
26. M. K. Meyer, R. Fielding, J. Gan; “Fuel development for gas cooled fast reactors”, *Journal of nuclear materials* 371 (2007) 281-289.
27. S. Glasstone, A. Sesonske, *Ingenieria de reactores nucleares*, Editorial Reverte, pp. 525, 1990.
28. Pelloni S., Epiney A., “Neutronics Analyses of GEN-IV Gas Cooled Fast Reactors”, *Laboratory for Reactor Physics and Systems Behaviour, Nuclear Energy and Safety Department*, p. 9 LRS SAC Meeting (2006).