

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

ESTUDIO DE LA UTILIZACIÓN DE TORIO EN REACTORES RÁPIDOS ENFRIADOS CON GAS

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

> PRESENTA: YROBEL LIMA REINALDO

TUTOR PRINCIPAL: **DR. JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE** FACULTAD DE INGENIERÍA

CIUDAD DE MÉXICO, SEPTIEMBRE, 2018



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

Presidente:	DR. ESPINOSA PAREDES GILBERTO
Secretario:	DRA. MARTÍN DEL CAMPO MÁRQUEZ CECILIA
1 ^{er} Vocal:	DR. FRANCOIS LACOUTURE JUAN LUIS
2 ^{do} Vocal:	DR. NUÑEZ CARRERA ALEJANDRO
3 ^{er} Vocal:	DR. LÓPEZ SOLIS ROBERTO CARLOS

Lugar donde se realizó la tesis: Facultad de Ingeniería-UNAM, Ciudad de México.

TUTOR DE TESIS:

JUAN LUIS FRANCOIS LACOUTURE

FIRMA

Dedicatoria

A mi abuelo, siempre en mi memoria. A mi familia... en especial a mi abuela.

Agradecimientos.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico brindado mediante la beca otorgada, permitiendo así la realización de este trabajo.

A la UNAM, en especial a la Facultad de Ingeniería por permitirme ser parte del Programa de Maestría y Doctorado en Ingeniería.

A la UNAM por su apoyo a través del proyecto PAPIIT-IN115517 y facilitar el uso de la supercomputadora MIZTLI en el marco del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-253.

A mi tutor el Dr. Juan Luis Francois Lacouture, un agradecimiento especial, por su apoyo incondicional, dedicación y valores inculcados durante estos años.

A todos mis profesores.

A todos mis amigos, gracias por su apoyo.

A mi familia, aunque lejos todo este tiempo, siempre cuento con su apoyo.

A México.

"Al fin y al cabo, somos lo que hacemos para cambiar lo que somos".

Eduardo Galeano.

Contenido

Lista	de Figur	as	VIII
Lista	de Tabla	IS	X
Resu	men.		XII
Absti	ract.		XIII
Intro	ducción.		14
	Problem	na científico	15
	Objetiv	o General	
	Objetiv	os específicos	
	Alcance	e del estudio	
	Estruct	ura de la Tesis	16
Capít	tulo 1: M	arco Teórico.	17
1.1.	Código	Monte Carlo Serpent.	17
	1.1.1.	Cálculo de criticidad	
	1.1.2.	Estimación de los resultados.	
	1.1.3.	Estadística de las estimaciones	
	1.1.4.	Geometría y trayectoria de las partículas.	
	1.1.5.	Interacciones	
	1.1.6.	Cálculo de quemado	
	1.1.7.	Simulación Multifísica.	
	1.1.8.	Resultados, archivo de salida y paralelización de los cálculos	
1.2.	Uso de	Torio en el Ciclo de Combustible Nuclear.	28
	1.2.1.	Aspectos generales.	
	1.2.2.	Razón de conversión	

	100	Description de Tradici	21
	1.2.3.		31
	1.2.4.	Combustibles basados en dióxido de Torio	32
	1.2.5.	Manejo de los desechos	32
	1.2.6.	Aspectos de no proliferación	33
	1.2.7.	Implementación	33
	1.2.8.	Retos asociados al uso de Torio como combustible	35
1.3.	Reacto	r Rápido enfriado con Gas de Generación IV.	36
	1.3.1.	Espectro de neutrones rápidos	37
	1.3.2.	Utilización de Helio como refrigerante	38
	1.3.3.	Retos tecnológicos	39
	1.3.4.	Materiales	39
	1.3.5.	Concepto de referencia para el reactor GFR.	40
	1.3.6.	Reactor Experimental	44
Capí	tulo 2: M	ateriales y Métodos.	45
2.1.	Descri	oción del modelo del núcleo del reactor GFR2400.	45
2.1.	Descrip 2.1.1.	oción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible.	45 45
2.1.	Descrip 2.1.1. 2.1.2.	p ción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor.	45 45 50
2.1.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control.	45 45 50 51
2.1.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo.	45 45 50 51 54
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela	 pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. 	45 45 50 51 54 57
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. ación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input.	45 45 50 51 54 57 57
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1. 2.2.2.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. ación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input. Definición de la geometría.	45 50 51 54 57 57 58
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1. 2.2.2. 2.2.3.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. nción en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input. Definición de la geometría. Definición de los materiales.	45 50 51 54 57 57 58 64
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1. 2.2.2. 2.2.3. 2.2.4.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. ación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input. Definición de la geometría. Definición de los materiales. Parámetros de cálculo definidos.	45 50 51 54 57 57 58 64 68
2.1.2.2.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1. 2.2.2. 2.2.3. 2.2.4. 2.2.5.	pción del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. ación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input. Definición de la geometría. Parámetros de cálculo definidos. Detectores.	45 50 51 54 57 57 58 64 68 70
2.1.	Descrip 2.1.1. 2.1.2. 2.1.3. 2.1.4. Modela 2.2.1. 2.2.2. 2.2.3. 2.2.4. 2.2.5. 2.2.6.	brion del modelo del núcleo del reactor GFR2400. Ensambles de combustible. Diseño del núcleo del reactor. Diseño del sistema de barras de control. Inventario de combustible en el núcleo. ación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400. Input. Definición de la geometría. Definición de los materiales. Parámetros de cálculo definidos. Detectores. Parámetros definidos para el cálculo de quemado.	45 50 51 54 57 57 58 64 68 70 73

Capítulo 3: Resultados y Discusión.

3.1.	Factor	de multiplicación efectivo ($k_{\rm eff}$).	75
3.2.	Espect	ro neutrónico.	76
3.3.	Distrib	oución radial de flujo neutrónico.	78
3.4.	Distrib	oución radial y axial de potencia.	81
3.5.	Evalua	ción de parámetros de seguridad.	85
	3.5.1.	Efecto Doppler	
	3.5.2.	Efecto de despresurización	
	3.5.3.	Valor de las barras de control y Margen de apagado.	
3.6.	Detern	ninación de parámetros cinéticos.	98
3.7.	Cálcul	o de quemado.	100
	3.7.1.	Evolución de k _{eff}	100
	3.7.2.	Evolución del combustible	
Conc	lusiones.		110
Refe	rencias.		112

Lista de Figuras

Figura	1.1: Sección eficaz de captura radiativa del ²³² Th y ²³³ Pa	6
Figura	1.2: Sistema de conversión de potencia del reactor GFR2400 4	2
Figura	1.3: Representación esquemática del diseño de los componentes del sistema primari	0
	(izquierda) y edificio de la contención (derecha) del reactor GFR2400. 1- Sistema RLP (1
	lazo); 2- Sistema RHP (3 lazos); 3- IHX; 4- Vasija del reactor	3
Figura	2.1: Vista de la sección transversal del pin de combustible del reactor GFR24004	6
Figura	2.2: Vista de la sección transversal del ensamble de combustible del reactor GFR2400 4	7
Figura	2.3: Vista de la sección transversal del pin (izquierda) y el ensamble (derecha) de combustibl	e
	del reactor GFR2400 modelado en Serpent	8
Figura	2.4: Disposición de los ensambles de combustible (izquierda) y vista axial (derecha) de	ł
	núcleo del reactor GFR2400	1
Figura	2.5: Vista de la sección transversal del diseño heterogéneo del ensamble de la barra de contro	1.
		4
Figura	2.6: Representación esquemática de las superficies utilizadas en Serpent para la construcció	n
	del modelo	1
Figura	2.7: Planos axiales definidos para la construcción del núcleo del reactor en Serpent 6	2
Figura	2.8: Representación esquemática de la metodología para la construcción del ensamble e	n
	Serpent	3
Figura	3.1: Espectro neutrónico en las regiones IC y OC para ambos modelos	7
Figura	3.2: Espectro neutrónico en el núcleo completo y el RR para ambos modelos	8
Figura	3.3: Distribución radial de flujo neutrónico para ambos modelos	9
Figura	3.4: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY del núcleo del reactor para e	ł
	modelo (U,Pu)C	0
Figura	3.5: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY del núcleo del reactor para o	el
	modelo (Th,Pu)C	1
Figura	3.6: Distribución radial de potencia para el modelo (U,Pu)C8	2
Figura	3.7: Distribución radial de potencia para el modelo (Th,Pu)C	3
Figura	3.8 : Pico de potencia radial para ambos modelos	4

Figura 3.9: Distribución axial de potencia para ambos modelos
Figura 3.10: Ensanchamiento Doppler de una resonancia de captura radiativa del ²⁴⁰ Pu
Figura 3.11: Sección eficaz de captura radiativa del ²³⁸ U y ²³² Th
Figura 3.12: Variación de k _{eff} con el aumento de la temperatura del combustible
Figura 3.13: Distribución de los sistemas de barras de control en el núcleo del reactor
Figura 3.14: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción
de barras de control ALL DOWN para ambos modelos de combustible
Figura 3.15: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción
de barras de control All CSD para ambos modelos de combustible
Figura 3.16: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción
de barras de control All DSD para ambos modelos de combustible
Figura 3.17: Diagrama de inserción del sistema CSD en el núcleo del reactor
Figura 3.18: Curva integral del valor de las barras (sistema CSD) para ambos modelos
Figura 3.19: Valor de keff en función del tiempo de operación, modelo (Th,Pu)C 101
Figura 3.20: Evolución de la masa de los isótopos de Pu en ambos modelos102
Figura 3.21: Evolución de la masa de U en el modelo (U,Pu)C 103
Figura 3.22: Evolución de la masa de ²³² Th, ²³³ U y ²³³ Pa en el modelo (Th,Pu)C 104
Figura 3.23: Sección eficaz de fisión del ²³³ U, ²³⁹ Pu y ²⁴¹ Pu
Figura 3.24: Evolución de la masa de los principales isótopos MA.
Figura 3.25: Distribución radial de potencia al final del ciclo de combustible (1450 EFPD) 109

Lista de Tablas

Tabla 1.1: Vida media de los principales actínidos menores del ciclo de combustible ²³⁸ U/ ²	³⁹ Pu y
²³² Th/ ²³³ U	33
Tabla 1.2: Parámetros básicos del diseño del reactor GFR2400.	41
Tabla 2.1: Descripción geométrica del núcleo del reactor GFR2400 a temperatura ambiente (2)	20°C).
	46
Tabla 2.2: Composición del combustible (U,Pu)C	49
Tabla 2.3: Composición del combustible (Th,Pu)C.	49
Tabla 2.4: Disposición axial del núcleo del reactor GFR2400	50
Tabla 2.5: Composición del material del diseño homogéneo de la barra de control	53
Tabla 2.6: Descripción geométrica del diseño heterogéneo de la barra de control.	53
Tabla 2.7: Inventario de combustible (U,Pu)C en el núcleo del reactor GFR2400	56
Tabla 2.8: Inventario de combustible (Th,Pu)C en núcleo del reactor GFR2400.	57
Tabla 2.9: Unidades de medida usadas en Serpent	58
Tabla 2.10: Composición de los materiales del núcleo del reactor GFR2400 definidos en Serp	ent.66
Tabla 2.11: Parámetros de cálculo definidos en Serpent	68
Tabla 2.12: Descripción de los detectores utilizados en Serpent.	70
Tabla 2.13: Parámetros definidos para el cálculo de quemado en Serpent.	73
Tabla 3.1: Parámetros de corrida en Serpent al BOL.	75
Tabla 3.2: Resultados de k _{eff} para ambos modelos de combustible	76
Tabla 3.3: Constante Doppler calculada para ambos modelos.	87
Tabla 3.4: Cambio de k _{eff} calculado para ambos modelos.	88
Tabla 3.5: Efecto de despresurización para ambos modelos.	90
Tabla 3.6: Valor de keff y reactividad del núcleo con barras de control en condición ALL UP	92
Tabla 3.7: Resultados del valor de las barras de control para diferentes combinaciones de inse	erción,
modelo (U,Pu)C.	93
Tabla 3.8: Resultados del valor de las barras de control para diferentes combinaciones de inse	erción,
modelo (Th,Pu)C	93
Tabla 3.9: Margen de apagado del reactor calculado para ambos modelos.	96

Tabla 3.10: Fracción efectiva de neutrones diferidos y tiempo de generación de neutrones	99
Tabla 3.11: Fracción efectiva de neutrones diferidos de los principales nucleidos	99
Tabla 3.12: Parámetros de corridas en Serpent para el cálculo de quemado	. 100
Tabla 3.13: Inventario relativo de combustible a inicio y final del ciclo para ambos modelos	. 107

Resumen.

En este trabajo se investiga la factibilidad del uso del Torio como combustible en el Reactor Rápido enfriado con Gas. El estudio corresponde al concepto de referencia propuesto por la Comisión de Energía Atómica y Energías Alternativas de Francia (CEA: Commisariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives), con una potencia térmica de 2400 MWth (GFR2400). Se utiliza el código Monte Carlo Serpent, versión 2.1.29, y la librería de secciones eficaces JEFF-3.1 para el diseño del modelo 3D heterogéneo del núcleo del reactor GFR2400. Los cálculos se realizaron para el combustible de referencia, Carburo de Uranio y Plutonio (U,Pu)C, y el propuesto, Carburo de Torio y Plutonio (Th,Pu)C. Se calculó el factor de multiplicación efectivo (k_{eff}) para ambos modelos al inicio de la vida del núcleo, así como una caracterización del espectro neutrónico y determinación de las distribuciones de flujo neutrónico y potencia. Se realizó una evaluación de parámetros de seguridad como la constante Doppler, el efecto de reactividad por despresurización, el valor de las barras de control y el margen de apagado del reactor. También se determinaron parámetros cinéticos como la fracción efectiva de neutrones diferidos (β_{eff}) y el tiempo de generación de neutrones. La variación de k_{eff} y la evolución del combustible fueron analizados durante un tiempo de operación de 1450 días efectivos a plena potencia.

Palabras claves.

GFR, GFR2400, Uranio, Torio, Plutonio, Serpent.

Abstract.

In this work the feasibility of using Thorium as fuel in the Gas Cooled Fast Reactor is investigated. The study corresponds to the reference concept proposed by the French Alternative Energies and Atomic Energy Commission (CEA: *Commisariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives*), with a thermal power of 2400 MWth (GFR2400). The Monte Carlo Serpent code, version 2.1.29, and the JEFF-3.1 cross section library were used to design a 3D heterogeneous model of the GFR2400 reactor core. The calculations were performed for the reference fuel, Uranium Plutonium Carbide (U,Pu)C, and the proposed, Thorium Plutonium Carbide (Th,Pu)C. The effective multiplication factor (k_{eff}) for both models was calculated at the beginning of life, as well as a neutron spectrum characterization and the determination of neutron flux and power distributions. A safety parameters assessment such as the Doppler constant, the depressurization reactivity effect, the reactor shutdown margin and the control rods worth were also performed. Kinetic parameters such as the effective delayed neutron fraction (β_{eff}) and the neutron generation time were also determined. The k_{eff} variation and the fuel evolution were analyzed for 1450 effective full power days.

Keywords.

GFR, GFR2400, Uranium, Thorium, Plutonium, Serpent.

Introducción.

Actualmente, los combustibles basados en Uranio son los materiales básicos considerados en reactores nucleares, sin embargo, existen reservas limitadas de este elemento. Para satisfacer la creciente demanda global de energía es importante evaluar recursos alternativos como el Torio, el cual es de tres a cuatro veces más abundante que el Uranio (IAEA, 2005) y presenta una serie de propiedades nucleares y químicas intrínsecas que hacen interesante su uso como combustible nuclear. A diferencia del Uranio natural, que contiene aproximadamente 0.72% del isótopo ²³⁵U físil, el Torio natural está compuesto únicamente por el isótopo ²³²Th fértil. El Torio es transformado en material físil ²³³U tanto en reactores térmicos como rápidos, ampliando así los recursos materiales físiles. No se ha demostrado completamente la factibilidad del uso del Torio como combustible en reactores de espectro rápido. Por lo tanto, en el presente estudio se investiga la factibilidad del uso del Torio como combustible en el Reactor Rápido enfriado por Gas (GFR, por sus siglas en inglés).

El reactor GFR es uno de los seis conceptos avanzados de reactores de Generación IV seleccionados por el Foro Internacional de reactores de Generación IV (GIF); una cooperación internacional dirigida a la investigación y el desarrollo de los futuros sistemas de energía nuclear. El sistema GFR es un reactor de espectro rápido, refrigerado por Helio, de alta temperatura y con un ciclo de combustible cerrado. Combina las ventajas de los sistemas de espectro rápido (sostenibilidad a largo plazo de los recursos de Uranio y minimización del volumen y radiotoxicidad de los desechos) con las de los sistemas de alta temperatura (alta eficiencia de ciclo térmico y uso industrial del calor generado). El concepto de referencia para el GFR actualmente corresponde al reactor a gran escala, con una potencia térmica de 2400 MWth (GFR2400), propuesto por la Comisión de Energía Atómica y Energías Alternativas de Francia (CEA: *Commisariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives*) (Bertrand et al., 2012; Stainsby et al., 2011).

Problema científico.

El problema científico que se deriva de lo expuesto anteriormente es demostrar la factibilidad del uso del Torio como combustible en reactores de espectro rápido, en específico el refrigerado con gas.

Objetivo General.

Analizar el uso de Torio como combustible en el Reactor Rápido enfriado con Gas.

Objetivos específicos.

- 1- Diseñar un modelo 3D heterogéneo, utilizando el código Monte Carlo Serpent, del núcleo del reactor de referencia GFR2400.
- 2- Diseñar un modelo 3D heterogéneo, utilizando el código Monte Carlo Serpent, del núcleo del reactor GFR2400 considerando Torio como combustible.

Alcance del estudio.

El estudio abarca la modelación neutrónica del núcleo del reactor GFR2400 para diferentes estados, al inicio de la vida del núcleo (BOL, por sus siglas en inglés) y durante el quemado, utilizando dos tipos de combustibles: el (U,Pu)C como referencia, y el propuesto (Th,Pu)C. En los cálculos se utiliza el código Monte Carlo Serpent, versión 2.1.29, y la librería de secciones eficaces JEFF-3.1.

Estructura de la Tesis.

La Tesis está divida en tres capítulos. El Capítulo 1, Marco Teórico, comprende tres Secciones 1.1, 1.2 y 1.3 que describen: el código Monte Carlo Serpent utilizado en la modelación, el uso del Torio en el ciclo de combustible nuclear y las características generales del Reactor Rápido enfriado con Gas, respectivamente. El Capítulo 2, Materiales y Métodos, presenta, en la Sección 2.1, los parámetros básicos de diseño, descripción geométrica y composición del combustible para los modelos del núcleo del reactor GFR2400 (considerando los dos combustibles (U,Pu)C y (Th,Pu)C). La metodología utilizada para su diseño en Serpent se describe en la Sección 2.2. Los resultados obtenidos se presentan en el Capítulo 3, Resultados y Discusión. En una primera parte se describen los principales parámetros neutrónicos más importantes al BOL, que incluyen: el cálculo del factor de multiplicación efectivo (k_{eff}); la determinación de las distribuciones de flujo neutrónico y potencia; una evaluación de parámetros de seguridad (efecto Doppler, efecto de despresurización, valor de las barras de control y margen de apagado) y la determinación de parámetros cinéticos (fracción efectiva de neutrones diferidos (β_{eff}) y tiempo de generación de neutrones). También se presenta un análisis de la variación de k_{eff} y la evolución del combustible durante un tiempo de operación de 1450 días efectivos a plena potencia. Al final del documento se proporcionan las Conclusiones del estudio y las Referencias bibliográficas.

Capítulo 1: Marco Teórico.

1.1. Código Monte Carlo Serpent.

En la práctica existen dos maneras fundamentales de realizar el cálculo del transporte neutrónico, o bien se resuelven un conjunto de ecuaciones analíticamente o por iteración mediante un código determinista basados en métodos como: el método de las Características, el método de Probabilidad de Colisión, el método de las Ordenadas discretas y el método de los Armónicos Esféricos; o bien se utilizan métodos probabilistas basados en simular las interacciones de un gran número de partículas (neutrones) con el llamado método de Monte Carlo.

Para la realización de este trabajo fue seleccionado Serpent, un código Monte Carlo de transporte de partículas, de energía continua, tridimensional, desarrollado en el Centro de Investigación Técnica VTT de Finlandia, Ltd. (Leppänen et al., 2015). El desarrollo comenzó en 2004, y el código ha sido distribuido públicamente por OECD/NEA (*Organisation for Economic Cooperation and Development/ Nuclear Energy Agency*) y RSICC (*Radiation Safety Information Computational Center*) desde 2009. El código está escrito utilizando el lenguaje de programación estándar ANSI-C y desarrollado en el sistema operativo Linux. Serpent comenzó como un código de física de reactor simplificado, pero las capacidades de la versión de desarrollo actual, Serpent 2, se extienden mucho más allá del modelado de reactores. Las aplicaciones se pueden dividir en tres categorías principales:

- a) Aplicaciones tradicionales de la física de reactores, incluida la homogeneización espacial, cálculos de criticidad, estudios del ciclo de combustible, modelado de reactores de investigación, validación de códigos de transporte deterministas, etc.
- b) Simulación Multifísica, es decir, cálculos acoplados con Termohidráulica, CFD (Computational Fluid Dynamics) y códigos para desempeño de combustible.
- c) Simulaciones de transporte de neutrones y fotones, para cálculos de tasa de dosis de radiación, blindaje, investigación de fusión y Física Médica.

1.1.1. Cálculo de criticidad.

En Serpent, para cálculos de criticidad, el método de cálculo predeterminado es el método keigenvalor, utilizado para simular una reacción en cadena de fisión autosostenible estacionaria. Se usa para calcular una estimación del factor de multiplicación efectivo $k_{\rm eff}$, que determina la criticidad del sistema estudiado. Cuando $k_{\rm eff}$ está por debajo de la unidad, el sistema es subcrítico, lo que significa que el número de fisiones disminuye de generación en generación. Cuando $k_{\rm eff}$ está por encima de la unidad, el número de fisiones aumenta, y se dice que el sistema es supercrítico. Si k_{eff} es igual a la unidad, el sistema es crítico, lo que significa que el número de fisiones es una constante. El método k-eigenvalor también se usa para calcular estimaciones de diferentes tasas de reacción. Una simulación k-eigenvalor procede en ciclos que consisten en historias de neutrones. El tamaño de la fuente generalmente cambia de ciclo a ciclo debido a la aleatoriedad o la naturaleza de la simulación. Para evitar que el tamaño de la fuente aumente o disminuya, los neutrones se eliminan o se agregan a la fuente después de cada ciclo. Al comienzo de la simulación, la fuente puede estar lejos de la distribución convergente estacionaria. Por lo tanto, se debe omitir un número adecuado de ciclos antes de poder iniciar la recopilación de estadísticas. Los ciclos omitidos se denominan ciclos inactivos (o generaciones inactivas), mientras que los ciclos utilizados para registrar las estadísticas se denominan ciclos activos (o generaciones activas). Los ciclos activos continúan hasta que se obtiene un nivel de exactitud deseado. Una detallada descripción del método de cálculo se puede encontrar en la referencia (Leppänen, 2007).

1.1.2. Estimación de los resultados.

En los cálculos de transporte de neutrones, el método de Monte Carlo se usa generalmente para estimar las tasas de reacción de tipo (Kaltiaisenaho, 2014; Leppänen, 2015):

$$R = \frac{1}{V} \int_{V} \int_{E_{i+1}}^{E_{i}} f(\mathbf{r}, \mathbf{E}) \phi(\mathbf{r}, E) d^{3}r dE$$
(1.1)

Donde V es un elemento de volumen, E es un dominio de energía, f(r, E) es una función de respuesta que representa algún parámetro físico (por ejemplo: una sección eficaz macroscópica de reacción) y $\phi(r, E)$ es un flujo escalar de neutrones.

En el método de Monte Carlo, las tasas de reacción se obtienen formando estimaciones (o estimadores) de los conteos (*scores*) que se registran durante la simulación en el volumen dado y el intervalo de energía. Los estimadores se pueden categorizar en estimadores análogos e implícitos. La idea básica de los estimadores análogos es contar el número de reacciones que ocurren en el volumen dado y el intervalo de energía. Un ejemplo simple de una estimación análoga es la estimación de la tasa de reacción total obtenida al calcular el número total de reacciones en un ciclo.

Una estimación implícita, por otro lado, se calcula multiplicando una estimación de flujo apropiada por una función de respuesta deseada. Dado un estimado de flujo ϕ y una función de respuesta *f*, la estimación de la tasa de reacción implícita se da como (Kaltiaisenaho, 2014):

$$R_{\rm imp} = \sum_{i=1}^{l} f_i \phi_i \tag{1.2}$$

donde la suma se realiza sobre los valores contados en el volumen dado y el intervalo de energía. Las tasas de reacción integrales calculadas de esta manera no se corresponden con ningún resultado físico. Esto se debe a que los valores dependen del tamaño de la fuente. Cuantas más historias se ejecuten, más conteos se incluyen en la suma y, por lo tanto, mayor es el valor de la integral. La tasa de reacción física correspondiente a la Ecuación (1.1) se obtiene al normalizar la estimación análoga o implícita.

El estimador de flujo más comúnmente utilizado es el estimador de longitud de trayectoria (*track length estimator*) que se basa en el registro de longitudes de trayectoria. La tasa de reacción de la estimación viene dada por:

$$R_{\rm tle} = \sum_{i=1}^{I} f_i l_i \tag{1.3}$$

donde l_i es la longitud de la trayectoria. Se registra una cuenta cada vez que un neutrón crea una trayectoria, incluso cuando pasa el límite de una celda.

Otro estimador común es el estimador de flujo de colisión (Kaltiaisenaho, 2014):

$$R_{\rm cfe} = \sum_{i=1}^{I} \frac{f_i}{\Sigma_{t,i}} \tag{1.4}$$

donde $\Sigma_{t,i}$ es la sección eficaz macroscópica total del material en que se cuenta. Como su nombre lo sugiere, se registra un puntaje cada vez que ocurre una colisión. La estimación resultante es la tasa esperada de las interacciones correspondientes a la función de respuesta. El estimador de colisión es menos eficiente que el estimador de longitud de trayectoria que no requiere que se lleve a cabo una interacción en la celda para registrar la cuenta. La diferencia de eficiencia se ve especialmente en volúmenes pequeños.

Estimación de keff

Serpent proporciona tres estimaciones para k_{eff} . La estimación análoga para k_{eff} (también conocida como la estimación de generación) se define como la relación de los tamaños de fuente de dos ciclos posteriores (Kaltiaisenaho, 2014):

$$k_{\rm eff,ana} = \frac{M_{j+1}}{M_j} \tag{1.5}$$

La estimación implícita para k_{eff} es la estimación de absorción que se calcula como relación de la tasa de producción y la tasa de pérdida de neutrones (Kaltiaisenaho, 2014):

$$k_{\text{eff},imp} = \frac{\overline{\nu}R_f}{R_f + R_c - R_{(n,xn)} + R_L}$$
(1.6)

Donde \overline{v} es el número promedio de neutrones emitidos por fisión, R_f es la tasa de fisión total, R_c tasa de captura total, $R_{(n,xn)}$ es la tasa de producción de dispersión inelástica total de neutrones y R_L es la tasa de fuga total de neutrones. La tercera estimación para k_{eff} es la estimación de colisión que se calcula como la relación de la estimación de colisión de los neutrones de fisión nacidos y el tamaño de la fuente (Kaltiaisenaho, 2014):

$$k_{\text{eff},col} = \frac{\overline{\nu}R_f}{M_1} \tag{1.7}$$

donde M_1 es el tamaño inicial de la fuente.

1.1.3. Estadística de las estimaciones.

En el método de Monte Carlo, la estimación final del parámetro estudiado suele ser dado como la media muestral de las estimaciones individuales obtenidas al repetir la simulación. En Serpent, los conteos (*scores*) se recolectan en lotes (*batches*) para formar estimaciones por lotes usando, por ejemplo, el estimador de colisión. Esto significa que los conteos se dividen en *N* lotes y el número total está dado por (Leppänen, 2007):

$$I = \sum_{n=1}^{N} I_n \tag{1.8}$$

Es natural en cálculos de criticidad incluir todos los conteos realizados dentro de una generación en un solo lote, entonces el número de lotes N es igual al número de generaciones de neutrones activas. La estimación de la tasa de reacción integral R en la generación n en la Ecuación (1.2) viene dada por (Leppänen, 2007):

$$R_n = \sum_{i=1}^{I_n} f_i \phi_i \tag{1.9}$$

Los parámetros son variables aleatorias y sus valores difieren de una generación a otra. Cada parámetro está asociado a la media muestral, acompañada de la desviación estándar correspondiente. El valor medio se conoce como el resultado de la simulación y la desviación estándar es una medida de la exactitud estadística.

En Serpent, la estimación final es la media muestral tomada sobre los valores del lote calculada como (Kaltiaisenaho, 2014):

$$\overline{x} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n \tag{1.10}$$

donde *N* es el número de lotes y x_n es una estimación por lote. La exactitud del resultado se reporta como la desviación estándar de \overline{x} , que también se conoce como error estándar de la media, y se denota mediante (Kaltiaisenaho, 2014):

$$\sigma(\overline{x}) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{n=1}^{N} (x_n - \overline{x})^2}$$
(1.11)

Sin embargo, esta formulación no es muy práctica, ya que todos los valores de los lotes deben almacenarse para obtener la estimación final. Una forma más conveniente se puede escribir como:

$$\sigma(\overline{x}) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[\sum_{n=1}^{N} x_n^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{n=1}^{N} x_n \right)^2 \right]}$$
(1.12)

Usando esta definición, es suficiente acumular sólo las sumas de los valores del lote y sus cuadrados.

La desviación estándar de \overline{x} es una medida de variación en los resultados de múltiples simulaciones idénticas e independientes, en otras palabras, es una medida de cuánto un valor, seleccionado aleatoriamente de una distribución f(x), difiere (en promedio) de la media \overline{x} .

La desviación estándar también está asociada a la varianza σ^2 . Una forma más conveniente para la exactitud es el error estándar relativo (RSE: *Relative Statistical Error*) dado por (Kaltiaisenaho, 2014):

$$RSE = \frac{\sigma(\bar{x})}{\bar{x}} \tag{1.13}$$

El *teorema del límite central* establece que la suma de un gran número de variables aleatorias distribuidas arbitrariamente es en sí misma una variable aleatoria que sigue una distribución normal (conocida también como distribución Gaussiana). Las suposiciones son que la distribución es la misma para cada término en la suma, que los valores son independientes y que tanto la media como la desviación estándar de la distribución desconocida existen y son finitas. La función de densidad de probabilidad (PDF) de la distribución normal se escribe como (Leppänen, 2007):

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2\sigma^2}}$$
(1.14)

La función de distribución acumulativa (CDF) no puede resolverse en forma cerrada, pero se puede escribir utilizando la función error (erf: *error function*) como (Leppänen, 2007):

$$F(x) = \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x - \overline{x}}{\sigma\sqrt{2}}\right) \right]$$
(1.15)

Otra ley útil en estadística es la *ley de grandes números*, que implica convergencia estocástica, es decir, que la desviación estándar de una estimación se aproxima a cero a medida que el número de términos N se acerca al infinito. Entonces, en teoría, la estimación del resultado x debería distribuirse normalmente, siempre que se cumplan los supuestos anteriores. Además, la precisión estadística del resultado siempre debería mejorar si aumenta el número de historias simuladas.

El hecho de que los resultados de la simulación sigan una distribución de probabilidad conocida permite que la desviación estándar se relacione con una medida de exactitud

estadística más fácil de interpretar, llamada, intervalo de confianza. El intervalo de confianza determina la probabilidad en que el resultado se encuentra dentro de una cierta distancia del verdadero valor medio de la distribución. El intervalo de confianza de una variable aleatoria distribuida normalmente se puede escribir como (Leppänen, 2007):

$$P(\overline{x} - z_{\alpha/2}\sigma < x < \overline{x} + z_{\alpha/2}\sigma) = \int_{\overline{x} - z_{\alpha/2}\sigma}^{\overline{x} + z_{\alpha/2}\sigma} f(x) dx = 2F(\overline{x} + z_{\alpha/2}\sigma)$$
(1.16)

Donde el último término resulta de la simetría de la distribución normal. Los intervalos de confianza comúnmente usados son:

- Intervalo de confianza de 68% $(z_{\alpha/2} = 1, P = 0.68)$: $\overline{x} \pm \sigma$
- Intervalo de confianza de 95% $(z_{\alpha/2} = 1.96, P = 0.95)$: $\overline{x} \pm 1.96\sigma$
- Intervalo de confianza de 99%: $(z_{\alpha/2} = 2.58, P = 0.99)$: $\overline{x} \pm 2.58\sigma$

El valor 1-sigma también se llama error estándar o error estadístico y los resultados se dan en la forma de $\overline{x} \pm \sigma$.

1.1.4. Geometría y trayectoria de las partículas.

La rutina de geometría básica en Serpent se basa en un modelo de geometría sólida constructiva tridimensional (CSG: Constructive Solid Geometry), una opción típica para los códigos de transporte de partículas de Monte Carlo (Leppänen et al., 2015b). El modelo se construye a partir de superficies elementales, que se utilizan para formar celdas de dos o tres dimensiones. La geometría se puede dividir en múltiples niveles utilizando universos, transformaciones y estructuras como mallas (*lattices*) cuadradas y hexagonales. Serpent admite geometrías especiales para reactores CANDU (CANadian Deuterium Uranium) e incluye subrutinas para modelar partículas de combustible distribuidas aleatoriamente en Reactores de Alta Temperatura Refrigerados por Gas (HTGR: High-Temperature Gas-cooled Reactors) y de lecho de esferas (Pebble-Bed Reactors). Además de los universos de tipo CSG,

Serpent tiene la opción de importar geometrías CAD (Computer-Aided Design) y basadas en malla no estructurada.

El transporte de partículas en Serpent se basa en el método convencional, *surface-tracking*, en combinación con el método Woodcock, *delta-tracking*. Esta rutina ha demostrado ser eficiente y adecuada para geometrías donde el recorrido libre medio del neutrón o el fotón es largo en comparación con las dimensiones y permite reducir considerablemente el tiempo de cálculo en comparación con otros códigos (Leppänen et al., 2015b). El principal inconveniente del *delta-tracking* es que la estimación de longitud de trayectoria del flujo de partículas no está disponible, y las tasas de reacción deben calcularse utilizando el estimador de colisión menos eficiente. Esto generalmente no es un problema en absoluto en los cálculos cuando las tasas de reacción se cuentan en regiones de alta densidad de colisión. Cuando la tasa de colisión es baja, la eficiencia del estimador se puede mejorar introduciendo colisiones virtuales adicionales sobre la ruta de vuelo de la partícula (Leppänen et al., 2015). Serpent también proporciona un tipo de detector especial basado en el estimador de longitud de trayectoria para calcular las tasas de reacción en volúmenes pequeños u ópticamente delgados, en los que la eficiencia del estimador de colisión suele ser pobre.

1.1.5. Interacciones.

Serpent lee las secciones eficaces de energía continua de las librerías en formato ACE, basadas en la cinemática de colisión clásica, en las leyes de reacción ENDF (Evaluated Nuclear Data File) y el muestreo de tablas de probabilidad en la región de resonancia no resuelta. Las librerías JEF-2.2, JEFF-3.1, JEFF-3.1.1, ENDF/B-VI.8 y ENDFB/B-VII se incluyen en el paquete de instalación y están disponibles los datos de 432 nucleidos a 6 temperaturas entre 300 y 1800 K.

La temperatura de los nucleidos se puede ajustar (a una temperatura mayor definida por el usuario) mediante una rutina de ensanchamiento Doppler. Esta capacidad permite una mejor

descripción de las interacciones físicas ya que las librerías están disponibles en intervalos de temperatura de 300 K. La dependencia de la temperatura de los *kernels* de dispersión resonante se puede tener en cuenta utilizando el método DBRC (Doppler-Broadening Rejection Correction).

Tras leer las secciones eficaces, Serpent reconstruye una única red de energía para todos los tipos de reacción y material. Ésta será usada durante todo el cálculo en lugar de reconstruir la red para cada material cada vez que un neutrón se encuentra en una región de dicho material. Esta técnica tiene la ventaja de reducir considerablemente el tiempo de cómputo. Un modelo físico implementado para el transporte de fotones, cubre las interacciones básicas (dispersión de Rayleigh y Compton, efecto fotoeléctrico y producción de pares electrón-positrón) para energías entre 1 keV y 100 MeV. Los fotones secundarios se producen por relajación atómica y bremsstrahlung, manejados usando la aproximación TTB (Thick-Target Bremsstrahlung). Este modelo es comparable a métodos utilizados en otros códigos de transporte de Monte Carlo y ha permitido ampliar el alcance de las aplicaciones de Serpent desde cálculos tradicionales de física de reactores hasta el transporte y blindaje de radiación.

1.1.6. Cálculo de quemado.

El cálculo de quemado en Serpent se basa en rutinas de cálculo incorporadas, sin acoplamiento a ningún solucionador externo. Las ecuaciones de Bateman se resuelven por dos métodos diferentes. El primero se basa en la solución analítica de las cadenas de desintegración linealizadas, llamado análisis de trayectoria de transmutación (TTA: Transmutation Trajectory Analysis). El segundo es el método de aproximación racional de Chebyshev (CRAM: Chebyshev Rational Approximation Method), una solución de matrices exponenciales avanzada desarrollada en el propio VTT (Leppänen et al., 2015). Los algoritmos de quemado incluyen los métodos convencionales explícitos de Euler y de predictor-corrector, pero además se ofrecen otros métodos de orden superior. Los valores de

decaimiento radiactivo y rendimiento de fisión utilizados se leen de las librerías en formato ENDF.

1.1.7. Simulación Multifísica.

El acoplamiento bidireccional a termohidráulica, CFD y códigos para desempeño de combustible ha sido un tema importante en el desarrollo de Serpent en los últimos años. El esquema de acoplamiento multifísico en Serpent 2 está diseñado para operar en dos niveles:

- a) Acoplamiento interno a solucionadores integrados, para el comportamiento del combustible y termohidráulica.
- b) Acoplamiento externo a través de una interfaz universal multifísica.

En el propio VTT se ha desarrollado un módulo llamado FINIX, que permite simular el comportamiento termo-mecánico del combustible en condiciones de estado estable y transitorio (Ikonen et al., 2015). COSY es otro módulo actualmente en desarrollo de Termohidráulica, tridimensional y a escala sistema-componente.

1.1.8. Resultados, archivo de salida y paralelización de los cálculos.

Los métodos utilizados en Serpent para la homogeneización han sido desarrollados y revisados a lo largo de los años. El código calcula automáticamente todos los parámetros de entrada necesarios para los cálculos nodales de difusión, incluidos (Leppänen et al., 2015):

- a) Secciones eficaces de reacción homogeneizadas en pocos grupos (few-group).
- b) Matrices de dispersión.
- c) Secciones eficaces de transporte y coeficientes de difusión.
- d) Factores de discontinuidad.

- e) Factores de forma para la reconstrucción de la potencia por pin de combustible (pinpower reconstruction).
- f) Albedos y albedos parciales.
- g) Secciones eficaces de Poisson.
- h) Fracción efectiva de neutrones diferidos y parámetros de cinética puntual utilizando para el cálculo el método de probabilidad de fisión iterada IFP (Iterated Fission Probability).

En Serpent se pueden configurar detectores para calcular varias tasas de reacción integral para neutrones y fotones. El dominio de integración espacial se define mediante una combinación de celdas, universos, *lattices* y materiales. Los resultados se pueden dividir en un número arbitrario de *bins* de energía y tiempo.

En el cálculo de quemado el archivo de salida (*output*) contiene: composiciones isotópicas, actividades, tasas de fisión espontánea, calor de decaimiento y valores de radiotoxicidad. Como resultado, están dados valores para cada material y totales.

El *output* es generado en formato .m , lo cual simplifica considerablemente el procesamiento de los resultados. El código permite plotear la geometría y la tasa de reacción durante la simulación, visualizándose por medio de imágenes generadas en formato PNG.

Serpent permite hacer uso de varias CPUs, paralelizando los cálculos empleando la interfaz MPI (Message Passing Interface) y OpenMP.

1.2. Uso de Torio en el Ciclo de Combustible Nuclear.

1.2.1. Aspectos generales.

Los datos sobre los depósitos de Torio en el mundo aún no están bien sistematizados; sin embargo, generalmente se asume que es de tres a cuatro veces más abundante en la

naturaleza. En la actualidad, las tecnologías de reactores moderados con agua son dominantes en el mundo. Según las estadísticas de la Asociación Nuclear Mundial (WNA, 2018), 452 reactores estaban en funcionamiento con una capacidad total instalada de 397663 MWe; de éstos: 289 reactores de agua ligera a presión (PWR), 78 reactores de agua en ebullición (BWR) y 49 reactores de agua pesada a presión (PHWR).

A diferencia del Uranio natural, que contiene aproximadamente 0.72% del isótopo ²³⁵U físil, el Torio natural está compuesto únicamente por el isótopo ²³²Th fértil. Por lo tanto, el combustible basado en Torio como metal, óxido o carburo, se ha utilizado en combinación con ²³⁵U o ²³⁹Pu físiles en investigación nuclear y reactores de potencia para la conversión a ²³³U físil, ampliando así los recursos materiales físiles.

Desde mediados de la década de 1950 hasta mediados de la década de 1970, hubo un considerable interés en todo el mundo para desarrollar combustibles basados en Torio y ciclos de combustible con el fin de complementar las reservas de Uranio (NEA, 2015). Se ha demostrado la viabilidad de la utilización de Torio en reactores HTGR, reactores de agua ligera (LWR), reactores PHWR, reactores reproductores rápidos refrigerados con metal líquido (LMFBR) y reactores reproductores de sal fundida (MSBR). Estos estudios han sido bien documentados en varias revisiones y memorias de conferencias publicadas por la Comisión de Energía Atómica de los Estados Unidos, el Departamento de Energía de los Estados Unidos y el OIEA.

Dos proyectos internacionales principales, el Programa de Reactores Nucleares Innovadores y Ciclos de Combustible (INPRO), iniciado por el OIEA y el Foro Internacional de reactores de Generación IV (GIF), también están considerando los combustibles de Torio (IAEA, 2005). El Informe de la Agencia de Energía Nuclear (NEA, 2015a), identificó condiciones generales bajo las cuales la transición a un ciclo de combustible de Torio se convertiría en una opción práctica, proporcionando detalles de los desafíos técnicos asociados con las diversas etapas y opciones durante esta transición.

La necesidad de resistencia a la proliferación, ciclos de combustible más largos, mayor quemado, mejores características de la forma de los desechos, reducción de los inventarios de Plutonio y uso in situ de material físil ha llevado a un renovado interés en los combustibles basados en Torio en varios países desarrollados. Las áreas de interés más específicas en las que el Torio podría desempeñar un papel favorable en el futuro son:

- 1. Mejoras en la utilización y gestión de materiales físiles.
- 2. Desempeño de combustible.
- 3. Gestión de residuos.

Cuando es irradiado por neutrones térmicos, el ²³²Th produce ²³³U de una forma análoga a aquella en que el ²³⁸U produce ²³⁹Pu. Estos dos procesos de captura de neutrones (reacción de captura radiativa (n, γ)), seguido de desintegraciones radiactivas (β ⁻) consecutivas, representan los dos ciclos de combustible fértil/físil; el ciclo de combustible ²³⁸U/²³⁹Pu y el ciclo de combustible ²³²Th/²³³U (Ecuaciones (1.17) (1.18)).

$$^{232}Th \xrightarrow{(n,\gamma)} ^{233}Th \xrightarrow{\beta^-} ^{233}Pa \xrightarrow{\beta^-} ^{233}Pa \xrightarrow{\beta^-} ^{233}U$$
(1.17)

$${}^{238}U \xrightarrow{(n,\gamma)} {}^{239}U \xrightarrow{\beta^-} {}^{239}Np \xrightarrow{\beta^-} {}^{239}Np \xrightarrow{\beta^-} {}^{239}Pu$$
(1.18)

1.2.2. Razón de conversión.

La razón de conversión (CR), es definida como la razón entre el material físil producido y el consumido en un reactor en operación. Si CR es mayor o igual que 1, el sistema se denomina "de cría". Alcanzar una CR de 1 permite que un reactor en un ciclo de combustible cerrado funcione independientemente de cualquier suministro externo continuo de material físil. Esto es un aspecto clave de la sostenibilidad de los conceptos de reactores nucleares avanzados (Generación IV y posteriores).

Aunque requiere un iniciador (*seed*) físil, un ciclo de combustible de Torio puede llegar a ser autónomo en términos de inventario de material físil debido a la producción de ²³³U físil, siempre que la recuperación de este ²³³U sea viable mediante re-procesamiento y separación. Bajo ciertas condiciones, es posible criar más material físil que el consumido en el reactor. El concepto de cría no es exclusivo del ciclo del Torio y también se puede lograr con el ciclo del Uranio en los reactores de neutrones rápidos. Sin embargo, el Torio tiene una ventaja sobre los ciclos de Uranio ya que puede alcanzar relaciones de conversión cercanas o ligeramente superiores a la unidad en el espectro de neutrones térmicos debido a las propiedades neutrónicas favorables del ²³³U en este rango de energía de los neutrones.

Para los núcleos de ²³³U físil, el número de neutrones producidos por neutrón absorbido es mayor que 2 ($\eta > 2$) en un amplio rango de espectro de neutrones térmicos, a diferencia del ²³⁵U y ²³⁹Pu (IAEA, 2005). Por lo tanto, contrario al ciclo ²³⁸U/²³⁹Pu en el que sólo se puede obtener reproducción en espectros de neutrones rápidos, el ciclo de combustible ²³²Th/²³³U puede operar con espectros rápidos, epitérmicos o térmicos.

1.2.3. Recursos de Torio.

Las últimas estimaciones en el informe conjunto NEA y OIEA sobre el Uranio, "Recursos, Producción y Demanda" identificaron recursos de Torio que ascendían a alrededor de 6.2 millones de toneladas (NEA, 2015b). Los países que poseen cantidades significativas de recursos de Torio incluyen: Australia, Brasil, Egipto, India, Noruega, Rusia, Turquía y los Estados Unidos.

La presente producción de Torio es casi por completo un subproducto de la extracción de tierras raras de la arena de monacita. La minería y extracción de Torio de la monacita es relativamente más fácil que la extracción de la mayoría de minerales que contienen Uranio (NEA, 2015b). La gestión de residuos de la mina de Torio es también más sencilla debido a

la vida media mucho más corta de uno de sus productos de desintegración, ²²⁰Rn (55 s), en comparación con el producto hijo del Uranio, ²²²Rn (3.8 d).

Sobre la base del actual conocimiento incompleto de los recursos disponibles y la falta de un mercado de combustibles basados en Torio, es difícil comparar los recursos de Torio y Uranio disponibles. Sin embargo, es posible afirmar que el Torio es inmediatamente explotable y su abundancia no es un problema que se tenga en cuenta en escenarios de desarrollo energético para el futuro.

1.2.4. Combustibles basados en dióxido de Torio.

El dióxido de Torio (ThO₂) o Thoria es químicamente más estable y más resistente a la radiación que el dióxido de uranio (UO₂). Los combustibles basados en ThO₂ para reactores de agua ligera (LWR) y reactores de agua pesada (HWR) muestran un potencial para mejorar el desempeño del combustible en términos de reducción de la liberación de productos de fisión y reducción de la erosión, lo que conduce a menos defectos del combustible (NEA, 2015b). El ThO₂ tiene propiedades termofísicas favorables debido a la mayor conductividad térmica, menor coeficiente de expansión térmica y alta temperatura de fusión. El ThO₂ es relativamente inerte y no se oxida a diferencia del UO₂, por lo tanto, el almacenamiento provisional a largo plazo y disposición final en repositorios de combustible gastado a base de ThO₂ es más simple sin el problema de la oxidación.

1.2.5. Manejo de los desechos.

En el ciclo de combustible ²³²Th/²³³U se forman cantidades mucho menores de Plutonio y actínidos menores de larga vida (MA: Np, Am y Cm) en comparación con el ciclo de combustible ²³⁸U/²³⁹Pu, minimizando así la radiotoxicidad asociada al combustible gastado

(IAEA, 2005). Sin embargo, en la parte posterior del ciclo de combustible ²³²Th/²³³U, hay otros radionucleidos como el ²³¹Pa, ²²⁹Th y ²³²U, que pueden tener un impacto radiológico a largo plazo (ver Tabla 1.1).

Nucleido	Vida media ¹
²²⁹ Th	7.340x10 ³ años
²³¹ Pa	3.276×10^4 años
²³² U	68.9 años
²³⁷ Np	2.144x10 ⁶ años
²³⁹ Np	2.356 días
²⁴¹ Am	432.6 años
²⁴³ Am	7370 años
²⁴² Cm	162.94 días
²⁴⁴ Cm	18.11 años
1-fuente:	(JAEA, 2016).

Tabla 1.1: Vida media de los principales actínidos menores del ciclo de combustible ${}^{238}U/{}^{239}Pu$ y ${}^{232}Th/{}^{233}U$.

1.2.6. Aspectos de no proliferación.

La no proliferación de armas nucleares siempre ha sido una consideración esencial a tener en cuenta en el despliegue de cualquier tecnología o proceso de energía nuclear (NEA, 2015b). Los combustibles basados en Torio tienen una resistencia intrínseca a la proliferación debido a la formación de ²³²U por medio de las reacciones (n, 2n) con el ²³²Th, ²³³Pa y ²³³U. La vida media de ²³²U es de 73.6 años y los productos hijos tienen una vida media muy corta y algunos como el ²¹²Bi y ²⁰⁸Tl son fuertes emisores gamma.

1.2.7. Implementación.

Es importante diferenciar las diferentes categorías de implementación del Torio, tanto en el corto (antes de 2030), mediano (2030-2050) y largo plazo (después de 2050) (NEA, 2015b).

a) Corto plazo.

Torio como aditivo al ciclo de combustible de ${}^{238}\text{U}/{}^{239}\text{P}$: puede considerarse la introducción de Torio en cantidades pequeñas, es decir, como aditivo en el ciclo de combustible. Un contenido típico de ThO₂ de 5% a 10% en los combustibles de UO₂ puede ser un medio para mejorar las características neutrónicas en reactores PWR, permitiendo una distribución de potencia más plana y la reducción del uso de venenos quemables (NEA, 2015b).

b) Mediano plazo.

Torio en reactores de Generación III o III ⁺ como complemento del ciclo de combustible del Uranio: una opción a mediano plazo sería utilizar Torio en sistemas existentes, ya sea en reactores LWR o HWR. El uso de Torio podría considerarse, por ejemplo, tanto de forma homogénea como heterogénea a través de los siguientes medios (NEA, 2015b):

- mezclar Torio con Uranio y/o óxidos mixtos como combustible homogéneo;
- utilizar ensambles de combustible con una combinación de barras de combustible de Uranio y/o óxidos mixtos y barras de combustible de óxido de Torio;
- utilizando un enfoque de núcleo heterogéneo, con la introducción de ensambles de combustible de Torio separados del resto de los ensambles;
- c) Largo plazo.

Sistemas de cría usando ciclos de combustible cerrados ²³²Th/²³³U: un ciclo de combustible de Torio autónomo sólo es posible si el ²³³U se recicla. Las opciones avanzadas del ciclo de combustible en particular dependerán del desarrollo exitoso de los procesos asociados con el reprocesamiento y la refabricación del combustible (NEA, 2015b).

De los seis conceptos de reactores avanzados de Generación IV, el GIF considera el uso del Torio como combustible específicamente en los reactores de sales fundidas (MSR: *Molten Salt Reactors*). El concepto de MSR implementa enfoques de administración de combustible muy innovadores con el uso de combustible en forma líquida, que en principio permite el reprocesamiento continuo "en línea" del combustible para extraer productos de fisión y ²³³Pa (NEA, 2015b).

1.2.8. Retos asociados al uso de Torio como combustible.

El punto de fusión del ThO₂ (3500°C) es mucho mayor en comparación con el del UO₂ (2 800°C), por lo tanto, se requiere una temperatura de sinterización mucho mayor (> 2 000°C) para producir combustibles de óxido mixto a base de ThO₂ y ThO₂ de alta densidad. Para lograr la densidad deseada a temperatura más baja se requiere un auxiliar de sinterización (CaO, MgO, Nb₂O₅, etc.). Estos combustibles son relativamente inertes y, a diferencia de los combustibles de UO₂ y (U,Pu)O₂, no se disuelven fácilmente en ácido nítrico concentrado (HNO₃). La adición de pequeñas cantidades de ácido fluorhídrico (HF) en el HNO₃ concentrado es esencial, lo que causa la corrosión de los equipos de acero inoxidable y tuberías en las plantas de reprocesamiento. El problema de corrosión se puede mitigar con la adición de nitrato de aluminio.

Como se comentó anteriormente los combustibles irradiados contienen una cantidad significativa de ²³²U, por lo que existe una importante acumulación de dosis de radiación con el almacenamiento de combustible gastado o el ²³³U separado. Esto requiere un reprocesamiento y refabricación del combustible de forma remota y automatizada en celdas calientes blindadas, lo cual representa un aumento en el costo de las actividades del ciclo del combustible. En la cadena de conversión de ²³²Th a U²³³ se produce ²³³Pa como producto intermedio según la Ecuación (1.17). Aunque la vida media del ²³³Pa es de 27 días, más larga en comparación con el ²³⁹Np (2.35 días) en el ciclo del combustible del Uranio, se necesitan
alrededor de 75 días para que se alcance el equilibrio por lo que actúa como veneno de neutrones debido a que posee una sección eficaz de captura radiativa mayor a la del ²³²Th (Figura 1.1) (Soppera et al., 2014).



Figura 1.1: Sección eficaz de captura radiativa del ²³²Th y ²³³Pa.

1.3. Reactor Rápido enfriado con Gas de Generación IV.

El sistema GFR es un reactor de espectro rápido, refrigerado por Helio, de alta temperatura y con un ciclo de combustible cerrado. Combina las ventajas de los sistemas de espectro rápido (sostenibilidad a largo plazo de los recursos de Uranio y minimización del volumen y

radiotoxicidad de los desechos) con las de los sistemas de alta temperatura (alta eficiencia de ciclo térmico y uso industrial del calor generado).

El reactor GFR es uno de los seis conceptos avanzados de reactores de Generación IV seleccionados por el GIF; una cooperación internacional dirigida a la investigación y el desarrollo de los futuros sistemas de energía nuclear. Su objetivo final es diseñar nuevos tipos de reactores basados en: la sostenibilidad, economía, seguridad y confiabilidad, resistencia a la proliferación y protección física. Estos nuevos sistemas pueden lograr una serie de beneficios a largo plazo que ayudarán a la energía nuclear a desempeñar un papel esencial en todo el mundo. En 2002, el GIF seleccionó los siguientes seis sistemas como reactores de Generación IV (GIF, 2002, 2016):

- 1. Reactor Rápido enfriado con Gas (GFR).
- 2. Reactor Rápido enfriado con Plomo (LFR).
- 3. Reactor de Sal Fundida (MSR).
- 4. Reactor Rápido enfriado con Sodio (SFR).
- 5. Reactor enfriado por Agua Supercrítica (SCWR).
- 6. Reactor de muy Alta Temperatura (VHTR).

La mayoría de los conceptos seleccionados son reactores de espectro de neutrones rápidos, incluidos los sistemas enfriados con gas, sodio y plomo, así como la versión no moderada del reactor de sal fundida. Principalmente fueron elegidos debido a su potencial de reciclar actínidos y cerrar el ciclo del combustible. Esto permitiría que los reactores rápidos mejoraran sustancialmente la utilización del combustible, particularmente al permitir alimentar los reactores en equilibrio con solo Uranio Natural o empobrecido.

1.3.1. Espectro de neutrones rápidos.

El espectro de neutrones rápidos es de vital importancia en el reactor GFR y contribuye a la sostenibilidad de dos maneras. La primera, dado a la mayor energía de los neutrones, los actínidos tienen más probabilidad de ser fisionados y menos propensos a capturar neutrones y formar isótopos más pesados. Esto permite utilizar isótopos transuránicos como combustible en el reactor GFR, por lo que los actínidos obtenidos al reprocesar el combustible gastado de los reactores térmicos y del propio GFR pueden reciclarse y transmutarse. La segunda; el número promedio de neutrones producidos por fisión es mayor; esto permite el diseño de núcleos auto-reproductores sin el uso de *blankets* fértiles (principio de no proliferación), de esta manera el reabastecimiento de combustible es posible con materiales puramente fértiles, mejorando en gran medida la eficiencia del uso de material físil.

1.3.2. Utilización de Helio como refrigerante.

La principal ventaja de los diseños modernos de GFR en comparación con otros sistemas de reactores rápidos es debido al uso de gas Helio como refrigerante primario. Dado que prácticamente no introduce moderación, el espectro de neutrones del GFR es uno de los más endurecidos entre los reactores rápidos, por lo que es ideal para reciclar actínidos, incluidos actínidos menores. El Helio es químicamente inerte y transparente, eliminando así la mayoría de los problemas relacionados con la interacción del refrigerante con los materiales estructurales y haciendo posible la inspección visual en línea del núcleo. Debido a su baja densidad, en comparación con otros refrigerantes tradicionales (agua, plomo, sodio, sal fundida), y transparencia neutrónica, el efecto de reactividad por vacíos es bajo, lo cual es ventajoso para la seguridad del reactor. La temperatura de salida del núcleo no está limitada por las características del refrigerante; se alcanzan temperaturas por encima de 750°C, permitiendo una alta eficiencia del ciclo térmico (alrededor del 45%), además, es un valor agregado para el ciclo de combustible cerrado y un atractivo para la producción de hidrógeno y otras aplicaciones industriales.

1.3.3. Retos tecnológicos.

Uno de los retos tecnológicos en este tipo de reactor es que existe una degradación de parámetros de seguridad debido a que la fracción efectiva de neutrones diferidos y el tiempo de generación de neutrones son ambos más pequeños que en los reactores térmicos, dando como resultado, transitorios más rápidos y una operación más difícil del reactor. Por otro lado, asociado al uso de gas como refrigerante; el coeficiente de reactividad por vacíos es positivo; existe un rápido calentamiento del núcleo provocado por su baja inercia térmica; se necesita alta presión para una transferencia de calor eficiente y su densidad es demasiado baja para lograr una convección natural suficiente para enfriar el núcleo, lo que hace que la eliminación de calor por decaimiento en circunstancias accidentales sea especialmente desafiante.

1.3.4. Materiales.

Deben desarrollarse materiales apropiados que soporten las altas temperaturas y presiones, así como los flujos rápidos y las altas fluencias en el reactor. También, deben ser descubiertas nuevas técnicas de fabricación de combustible que permitan la incorporación de los actínidos en el combustible y, a la vez, el confinamiento adecuado de los productos de fisión.

Se han seleccionado ensambles de combustibles basados en materiales refractarios que poseen una alta conductividad térmica y con la capacidad de asegurar el confinamiento de material radiactivo a altas temperaturas de operación. Los materiales de referencia para la estructura del núcleo son los materiales cerámicos, entre los más prometedores se encuentran los carburos (SiC, ZrC, TiC, NbC), nitruros (ZrN, TiN) y óxidos (MgO, Zr(Y)O₂). Los compuestos intermetálicos como el Zr₃Si₂ son candidatos como materiales reflectores de neutrones rápidos. Para los otros componentes internos, los materiales candidatos son los

aceros ferríticos – martensíticos (o austeníticos), otras aleaciones base Fe-Ni-Cr y aleaciones base Ni.

1.3.5. Concepto de referencia para el reactor GFR.

El concepto de referencia para el GFR actualmente corresponde al reactor a gran escala, con una potencia térmica de 2400 MWth (GFR2400), propuesto por la Comisión de Energía Atómica y Energías Alternativas de Francia (CEA: *Commisariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives*) (Bertrand et al., 2012; Stainsby et al., 2011). El reactor GFR2400 utiliza Helio como refrigerante a una alta presión de 7 MPa para asegurar una transferencia de calor adecuada y la temperatura de salida del núcleo supera los 750°C, permitiendo un ciclo indirecto combinado gas-vapor. En la Tabla 1.2 se presentan los parámetros básicos del diseño del reactor GFR2400 (Perkó et al., 2015).

Cabe resaltar que este trabajo abarca una descripción detallada de este reactor centrándose solamente en el núcleo activo, para obtener más información sobre los sistemas, consultar las referencias (Bertrand et al., 2012; Carre et al., 2010; NEA, 2012; Stainsby et al., 2011).

En la Figura 1.2 se muestra una representación esquemática del sistema de conversión de potencia propuesto (Bertrand et al., 2012). El reactor de tres lazos, a plena potencia nominal, permite convertir los 2400 MWth en alrededor 1100 MWe, una parte por las turbomaquinarias del circuito secundario (alternadores auxiliares: 3x130 MWe) y otra parte por una turbina de vapor instalada en el circuito ternario (alternador principal: 1x730 MWe).

Parámetro del reactor	Valor	Parámetro del reactor	Valor
Potencia térmica (MW)	2400	Eficiencia térmica (%)	45
Refrigerante primario	He	Presión refrigerante primario (MPa)	7
T de entrada al núcleo (°C)	400	T de salida del núcleo (°C)	780
T de entrada al IHX. (°C)	346	T de salida del IHX (°C)	750
Refrigerante secundario	20%He+ $80%$ N ₂	Presión refrigerante secundario (MPa)	6.5
Flujo másico (kg/s)	1213	Caída de presión en el núcleo (MPa)	0.143

 Tabla 1.2: Parámetros básicos del diseño del reactor GFR2400.

De manera general, un lazo funciona de la siguiente manera: cuando el Helio ha circulado por medio de un soplador, a través del núcleo, en el circuito primario, se enfría en un intercambiador de calor intermedio (IHX) conectado a un sistema de gas secundario. El circuito secundario es llenado con una mezcla de Helio (para favorecer el IHX) y Nitrógeno (para favorecer la eficiencia y el diseño de las turbomaquinarias). Parte del calor transferido al sistema secundario se convierte en electricidad a través de una turbina de gas (ciclo Brayton) y el resto se utiliza en un generador de vapor (GV) conectado a un circuito ternario llenado con agua donde se genera electricidad de acuerdo con un ciclo de Rankine clásico. Se espera que la eficiencia termodinámica general de la planta sea alrededor del 45%.



Figura 1.2: Sistema de conversión de potencia del reactor GFR2400.

En la Figura 1.3 se muestra el arreglo de los componentes del sistema primario y una vista axial del edificio de la contención (Stainsby et al., 2011). El sistema primario incluye: la vasija del reactor, los tres lazos primarios principales (lazos PCS) con sus IHX, así como los lazos DHR (Sistema de Extracción del Calor de Decaimiento) que permiten enfriar el núcleo en situaciones accidentales. En el diseño actual, hay tres lazos, denominados Sistema de Refrigeración de Alta Presión del reactor (RHP) y un lazo para las situaciones de Baja Presión (RLP). El lado secundario de los lazos DHR, cada uno capaz de eliminar el 100% del calor de decaimiento después de la parada del reactor, se llena con agua presurizada a 1 MPa. Éstos

se enfrían a través de un intercambiador de calor sumergido en una piscina dentro de la contención.



Figura 1.3: Representación esquemática del diseño de los componentes del sistema primario (izquierda) y edificio de la contención (derecha) del reactor GFR2400. 1- Sistema RLP (1 lazo); 2- Sistema RHP (3 lazos); 3- IHX; 4- Vasija del reactor.

Cada piscina asociada a un lazo puede eliminar la potencia residual durante 24 horas sin ser recargada. Todos los componentes anteriores están encerrados en una contención cerrada (CC esférica) que mantiene el inventario primario en caso de un accidente con pérdida de refrigerante (LOCA) y cuyo volumen es igual a 11600 m³. La CC se llena con Nitrógeno a 0.1 MPa bajo operación normal y está encerrada en el edificio de contención (CB) cuyo volumen se supone igual a 60000 m³.

1.3.6. Reactor Experimental.

Un paso necesario en el desarrollo de un GFR comercial es el establecimiento de un reactor de demostración experimental para la calificación de los innovadores materiales refractarios y la demostración a gran escala de los sistemas de seguridad específicos. El proyecto del reactor experimental ALLEGRO está siendo llevado a cabo por un consorcio de cuatro países (la República Checa, Hungría, Polonia y la República Eslovaca) con el objetivo de desarrollar un pequeño reactor experimental dentro de los próximos 10 - 20 años. ALLEGRO con 75 MWth incorpora, a escala reducida, toda la arquitectura y los principales materiales y componentes previstos para el GFR, no incluido el sistema de conversión de potencia.

Capítulo 2: Materiales y Métodos.

2.1. Descripción del modelo del núcleo del reactor GFR2400.

El concepto de combustible y núcleo del GFR se ha desarrollado durante la última década. Este desarrollo ha incluido diferentes diseños de combustible como: partículas de combustible recubiertas; bloques de carburo de silicio (SiC) con micropartículas de combustible dispersas en el interior y placas de SiC con pellets de combustible dispuestos en estructura de panal de abeja. Finalmente se ha arribado al diseño actual de un ensamble de combustible hexagonal que consiste en barras cilíndricas (pines) con pastillas de combustible (pellets), dispuestas en un arreglo hexagonal rodeado con una envoltura hexagonal de SiC. El diseño de referencia del GFR2400 corresponde con las especificaciones en (Perkó, 2012; Perkó et al., 2015), estudios realizados en el marco del proyecto FP7 GoFastR (*European Gas Cooled Fast Reactor Collaborative Project*). Las características generales del diseño del reactor fueron descritas en la Sección 1.3.5.

2.1.1. Ensambles de combustible.

Una vista esquemática del pin de combustible se representa en la Figura 2.1 y la Figura 2.3, mientras que la Tabla 2.1 proporciona su descripción geométrica a temperatura ambiente (Perkó, 2012; Perkó et al., 2015). El revestimiento del pin (*clad*) está hecho de SiC cubierto desde el interior con revestimientos metálicos finos (Renio (Re) y aleación de Tungsteno-Renio (W14Re), metales con alta temperatura de fusión) para mejorar el confinamiento de los productos de fisión. El gap entre los pellets y los revestimientos metálicos es llenado con Helio a 1 MPa. La adición de SiC-fib (fibra de SiC) al material de revestimiento de SiC tiene como objetivo mejorar su resistencia mecánica y al mismo tiempo su hermeticidad, evitando la difusión de gases al refrigerante a través porosidades en el material cerámico.

Pin Ensamble de comb		stible	Núcleo		
Región	Radio (cm)	Región	Radio (cm)	Parámetro	Valor
Pellet	0.3355	Envoltura interna	8.5645	No. de FA	516
Gap	0.350	Envoltura externa	8.7645	No. de FA (IC)	264
W14Re	0.354	Refrigerante (ext. del FA)	8.9145	No. de FA (OC)	252
Re	0.355	Altura Activa	165	No. de CSDs	18
SiC	0.455	No. de pines en el FA	217	No. de DSDs	13
SiC-fib	0.458			No. de RR.	480
Pitch-lattice	1.157				

Tabla 2.1: Descripción geométrica del núcleo del reactor GFR2400 a temperatura ambiente (20°C).



Figura 2.1: Vista de la sección transversal del pin de combustible del reactor GFR2400.

La altura total del pin de combustible es de 3 m incluyendo la altura activa de 165 cm y el pleno de gases de fisión en la parte superior (85 cm de altura) y en la parte inferior (50 cm de altura). Los reflectores axiales (RA) de 1 m de altura, encima y debajo de los plenos, están compuestos por Zr_3Si_2 . Cada ensamble de combustible (FA) contiene 217 pines de

combustible, dispuestos en un arreglo hexagonal, con una envoltura hexagonal de SiC (ver Figura 2.2).



Figura 2.2: Vista de la sección transversal del ensamble de combustible del reactor GFR2400.

El combustible de referencia está compuesto por una mezcla de Carburo de Uranio y Plutonio, (U,Pu)C, donde la composición isotópica del combustible fértil, Uranio, corresponde al Uranio Natural; mientras que la del combustible físil, Plutonio, es característica del combustible MOX dos veces reciclado, el cual se asume que estará accesible en los próximos años en Francia (Perkó, 2012; Perkó et al., 2015).



Figura 2.3: Vista de la sección transversal del pin (izquierda) y el ensamble (derecha) de combustible del reactor GFR2400 modelado en Serpent.

La porosidad del combustible cerámico se considera del 20%. En la Tabla 2.2 se describe la composición del combustible de referencia (U,Pu)C.

El combustible propuesto en este estudio consiste en reemplazar el Uranio fértil por Torio (232 Th), manteniendo el vector de combustible físil de Plutonio. El 232 Th se considera igualmente en forma de Carburo de Torio para formar la mezcla de Carburo de Torio y Plutonio, (Th,Pu)C. Dado a la baja densidad teórica del ThC (TD = 10.65 g/cm³) comparada con la del UC (TD = 13.63 g/cm³), el inventario de metales pesados (HM) en el núcleo aumenta al considerar una mayor fracción de PuC. Por ello, se considera la densidad del combustible como el 90% de la densidad teórica del (Th,Pu)C, que representa una porosidad del combustible cerámico del 10% (Ibrahim et al., 2018). En la Tabla 2.3 se describe la composición del combustible (Th,Pu)C.

Comp. isotópica del Pu	$\operatorname{Pu}_{fr,i}(\operatorname{mol}\%)$	Comp. Isotópica del U	$U_{fr,i}(mol\%)$
²³⁸ Pu	2.7	²³⁵ U	0.72
²³⁹ Pu	56.0	²³⁸ U	99.28
²⁴⁰ Pu	25.9		
²⁴¹ Pu	7.4		
²⁴² Pu	7.3		
²⁴¹ Am	0.7		
Masa molar del PuC (g/mol)	251.677	Masa molar del UC (g/mol)	250.0399
Densidad del PuC (g/cm ³)	10.88 ^a	Densidad del UC (g/cm ³)	10.904 ^a
Fracción de vol.	14.10	Fracción de vol.	17 65
de PuC en IC (V/V%)	14.12	de PuC en OC (V/V%)	17.05
Fracción de vol.	05 00	Fracción de vol.	97 25
de UC en IC (V/V%)	03.00	de UC en OC (V/V%)	02.33

Tabla 2.2: Composición del combustible (U,Pu)C.

a-porosidad del combustible cerámico del 20%.

Comp. isotópica del Pu	$Pu_{fr,i}(mol\%)$	Comp. Isotópica del Th	$Th_{fr,i}(mol\%)$
²³⁸ Pu	2.7	²³² Th	100
²³⁹ Pu	56		
²⁴⁰ Pu	25.9		
²⁴¹ Pu	7.4		
²⁴² Pu	7.3		
²⁴¹ Am	0.7		
Masa molar PuC (g/mol)	251.677	Masa molar ThC (g/mol)	244.049
Densidad del PuC (g/cm ³)	12.24 ^b	Densidad del ThC (g/cm ³)	9.54 ^b
Fracción de vol.	15 625	Fracción de vol.	10 165
de PuC en IC (V/V%)	15.055	de PuC en OC (V/V%)	19.105
Fracción de vol.	91 265	Fracción de vol.	<u>00 025</u>
de ThC en IC (V/V%)	04.303	de ThC OC (V/V%)	00.000

 Tabla 2.3: Composición del combustible (Th,Pu)C.

b-porosidad del combustible cerámico del 10%.

2.1.2. Diseño del núcleo del reactor.

El núcleo activo consiste en 516 ensambles de combustible hexagonales divididos en dos zonas: núcleo interno (IC) con menor y núcleo externo (OC) con mayor contenido de Plutonio, esto con el objetivo de aplanar la distribución de flujo y el perfil de potencia en el núcleo. Por ejemplo, para el combustible de referencia (U,Pu)C: 14.12% en el IC y 17.65% en el OC; estos porcentajes representan la fracción de volumen de Plutonio en el combustible. El IC es está compuesto por 264 y el OC por 252 ensambles de combustible. Los 480 reflectores radiales (RR), al igual los RA, están compuestos por Zr₃Si₂. Para estos elementos no se ha realizado un diseño detallado, en la Tabla 2.4 se considera su composición volumétrica esperada.

Región Axial	Altura (cm)	Material	Fracción de volumen (V/V%)
DA annonion	100	Zr_3Si_2	60
RA superior	100	He a 7 MPa	40
		He a 1 MPa	30.33
		He a 7 MPa	42.89
Pleno superior	85	Re	0.18
		W14Re	0.7
		SiC	25.9
Núcleo activo	165	_	_
		He a 1 MPa	30.33
Pleno inferior	550	He a 7 MPa	42.89
		Re	0.18
		W14Re	0.7
		SiC	25.9
P A inferior	100	Zr_3Si_2	60
KA IIIIefior	100	He a 7 MPa	40
DD	500	Zr_3Si_2	80
ĸĸ	300	He a 7 MPa	20

Tabla 2.4: Disposición axial del núcleo del reactor GFR2400.

La disposición de los ensambles de combustible y la vista axial del núcleo se muestran en la Figura 2.4. La longitud axial del núcleo, incluidos los plenos de gases de fisión y los RA, es de 500 cm.



Figura 2.4: Disposición de los ensambles de combustible (izquierda) y vista axial (derecha) del núcleo del reactor GFR2400.

2.1.3. Diseño del sistema de barras de control.

La reactividad del núcleo del reactor GFR2400 es controlada mediante dos sistemas de barras de control: 18 CSDs (Control System Devices o barras de control) y 13 DSDs (Diverse Safety

Devices o barras de seguridad), distribuidas en 4 anillos concéntricos. El sistema CSD se usará principalmente para el control de la reactividad en el funcionamiento normal y el sistema DSD solo para el apagado de emergencia del reactor. Las barras de absorción en ambos grupos están compuestas por Carburo de Boro (B₄C, enriquecido en ¹⁰B al 90%) mientras que el material de los elementos estructurales es una aleación de acero especial Steel15-15Ti (AIM1). El seguidor de la barra de control (RF: rod follower) está compuesto por SiC y AIM1 como materiales estructurales. El esquema de numeración de las barras de control se muestra en la Figura 2.4, donde "C" se refiere a CSD y "D" a DSD.

No está disponible aún el diseño de los ensambles, sólo la configuración homogénea en base a las composiciones volumétricas de los materiales. En este trabajo, a partir de los resultados obtenidos por (Čerba et al., 2017; Haščík et al., 2014), se ha realizado un diseño heterogéneo para el ensamble del sistema de control del reactor.

La geometría considerada consiste en 54 pines compuestos por pellets de B₄C, con revestimiento de AIM1 y dispuestos en un arreglo hexagonal con envoltura de SiC. El espesor de la envoltura del ensamble se ha aumentado en comparación a la del combustible con el objetivo de mejorar la resistencia del canal en caso de una deformación mecánica del núcleo. El movimiento del ensamble se considera desde la parte superior del núcleo por medio de un eje metálico de AIM1, el seguidor de la barra, que pasa a través del núcleo desde la parte inferior. Con el fin de limitar un posible daño por radiación en el mecanismo de accionamiento, causado por la fluencia de neutrones de alta energía, se diseñó una envoltura central entre el RF y los pines de B₄C. En la Figura 2.5 se muestra una vista de la sección transversal del ensamble diseñado. La composición de los materiales y las especificaciones geométricas se muestran en la Tabla 2.5 y Tabla 2.6 respectivamente.

Ensamble CSD/DSD	Material	Fracción de volumen (%)
Parte absorbente	B_4C	30.26
	AIM1	11.22
	SiC	10.85
	He a 7MPa	47.67
Seguidor de la barra	AIM1	1.20
	SiC	10.85
	He a 7 MPa	87.95

 Tabla 2.5: Composición del material del diseño homogéneo de la barra de control.

Tabla 2.6: Descripción geométrica del diseño heterogéneo de la barra de control.

Pin		Ensamble CSD/DSD	
Región	Radio (cm)	Región	Radio (cm)
B ₄ C	0.7007	Envoltura central int.	2.0509
AIM1	0.8007	Envoltura central ext.	2.1945
Pitch-lattice	1.91796	Envoltura interna	8.3050
		Envoltura externa	8.8088
		Exterior del ensamble (Refrigerante)	8.9145
		Seguidor	1.02543
		No. de pines	54
		No. de CSD/DSD	31



Figura 2.5: Vista de la sección transversal del diseño heterogéneo del ensamble de la barra de control.

2.1.4. Inventario de combustible en el núcleo.

Para el cálculo de la densidad atómica de los isótopos de Pu (y²⁴¹Am) en el núcleo se utilizó la siguiente formulación (Perkó, 2012):

$$N_{i,IC} = \frac{V_{PuC}^{IC}}{V_{fuel,IC}} \cdot \frac{\rho_{PuC}}{M_{PuC}} \cdot \frac{Pu_{fr,i}}{100} \cdot N_A$$
(2.1)

$$N_{i,OC} = \frac{V_{PuC}^{OC}}{V_{fuel,OC}} \cdot \frac{\rho_{PuC}}{M_{PuC}} \cdot \frac{Pu_{fr,i}}{100} \cdot N_A$$
(2.2)

Donde la densidad ρ_{PuC} , la fracción $Pu_{fr,i}$, la masa molar M_{PuC} , y la fracción de volumen $c = V_{PuC}/V_{fuel}$ para ambas regiones, IC y OC, están dadas en la Tabla 2.2. Para los isótopos de U, tenemos (Perkó, 2012):

$$N_{i,IC} = \left(1 - \frac{V_{PuC}^{IC}}{V_{fuel,IC}}\right) \cdot \frac{\rho_{UC}}{M_{UC}} \cdot \frac{U_{fr,i}}{100} \cdot N_A$$
(2.3)

$$N_{i,OC} = \left(1 - \frac{V_{PuC}^{OC}}{V_{fuel,OC}}\right) \cdot \frac{\rho_{UC}}{M_{UC}} \cdot \frac{U_{fr,i}}{100} \cdot N_A$$
(2.4)

En el caso del combustible basado en ²³²Th es similar a la metodología para el U, sólo se sustituye los valores correspondientes dados en la Tabla 2.3.

Para el Carbono natural tenemos (Perkó, 2012):

$$N_{i,IC} = \left[\frac{V_{PuC}^{IC}}{V_{fuel,IC}} \cdot \frac{\rho_{PuC}}{M_{PuC}} + \left(1 - \frac{V_{PuC}^{IC}}{V_{fuel,IC}}\right) \cdot \frac{\rho_{UC}}{M_{UC}}\right] \cdot N_A$$
(2.5)

$$N_{i,OC} = \left[\frac{V_{PuC}^{OC}}{V_{fuel,OC}} \cdot \frac{\rho_{PuC}}{M_{PuC}} + \left(1 - \frac{V_{PuC}^{OC}}{V_{fuel,OC}}\right) \cdot \frac{\rho_{UC}}{M_{UC}}\right] \cdot N_A$$
(2.6)

Una vez determinada la densidad atómica N_i podemos calcular la masa total de los isótopos en las regiones IC y OC dada por:

$$m_{i,IC} = \frac{N_{i,IC} \cdot V_{fuel,IC}}{N_A} \cdot M_i$$

$$m_{i,OC} = \frac{N_{i,OC} \cdot V_{fuel,OC}}{N_A} \cdot M_i$$
(2.7)

Donde $N_A = 6.02214179 \times 10^{23}$ #/mol es el número de Avogadro y M_i es la masa molar dada en la Tabla 2.2 y Tabla 2.3.

El volumen total de combustible V_{fuel} en el IC y OC a temperatura ambiente (teniendo en cuenta el número de pines por ensamble de combustible y el número de ensambles en cada región) es:

$$V_{fuel,IC} = 264 \cdot 217 \cdot R_{pellet}^2 \cdot \pi \cdot H_{activa} = 3342585.5cm^3$$

$$V_{fuel,OC} = 252 \cdot 217 \cdot R_{pellet}^2 \cdot \pi \cdot H_{activa} = 3190649.8cm^3$$
(2.8)

A partir de la formulación presentada, las densidades atómicas (a temperatura ambiente) y las masas de los isótopos para el combustible de referencia (U,Pu)C y el propuesto (Th,Pu)C, se muestran en la Tabla 2.7 y Tabla 2.8 respectivamente. El inventario de combustible para el modelo de referencia presenta buena correspondencia con el reportado por (Perkó, 2012).

	Núcleo Interno (IC) Núcleo Exter		xterno (OC)		
Inétopos	Densidad at.	Masa (g)	Densidad at.	Masa (g)	Masa Total (a)
isotopos	(#/barn cm)	Masa (g)	(#/barn cm)	Masa (g)	Masa Total (g)
²³⁸ Pu	9.92508E-05	131139.366	1.24064E-04	156473.108	287612.474
²³⁹ Pu	2.05854E-03	2731383.234	2.57317E-03	3259036.813	5990420.047
²⁴⁰ Pu	9.52073E-04	1268557.939	1.19009E-03	1513620.268	2782178.208
²⁴¹ Pu	2.72021E-04	363959.562	3.40026E-04	434269.932	798229.493
²⁴² Pu	2.68345E-04	360533.452	3.35431E-04	430181.960	790715.412
²⁴¹ Am	2.57317E-05	34428.604	3.21646E-05	41079.584	75508.188
Pu	-	4855573.553	-	5793582.081	10649155.634
²³⁸ U	2.23914E-02	29585714.783	2.14710E-02	27080099.007	56665813.790
²³⁵ U	1.62387E-04	211851.825	1.55712E-04	193910.083	405761.908
U	-	29797566.608	-	27274009.090	57071575.698
С	2.62297E-02	1748656.319	2.62217E-02	1668659.162	3417315.481
Total (g)	-	36436225.084		34777329.917	71213555.001

Tabla 2.7: Inventario de combustible (U,Pu)C en el núcleo del reactor GFR2400.

	Núcleo Interno (IC)		Núcleo Externo (OC)		
Isótopos	Densidad at.	Masa (g)	Densidad at.	Masa (g)	Masa Total (g)
13010003	(#/barn cm)	Masa (g)	(#/barn cm)	Wiasa (g)	Masa Total (g)
²³⁸ Pu	1.23637E-04	163361.154	1.51552E-04	191142.096	354503.250
²³⁹ Pu	2.56433E-03	3402501.698	3.14329E-03	3981125.813	7383627.510
²⁴⁰ Pu	1.18600E-03	1580250.801	1.45377E-03	1848985.779	3429236.580
²⁴¹ Pu	3.38858E-04	453386.772	4.15364E-04	530489.017	983875.788
²⁴² Pu	3.34279E-04	449118.845	4.09751E-04	525495.293	974614.138
²⁴¹ Am	3.20541E-05	42887.934	3.92912E-05	50181.389	93069.323
Pu	-	6048619.269	-	7077237.997	13125857.266
²³² Th	1.99539E-02	25699166.665	1.55712E-04	23504595.768	49203762.433
С	2.45331E-02	1635546.444	2.62217E-02	1573863.993	3209410.437
Total (g)	-	33426220.311		32205879.147	65632099.458

Tabla 2.8: Inventario de combustible (Th,Pu)C en núcleo del reactor GFR2400.

2.2. Modelación en Serpent del núcleo del reactor GFR2400.

En esta sección se describe la metodología implementada en Serpent 2 versión 2.1.29 para el diseño del modelo 3D heterogéneo del núcleo del reactor GFR2400. Para una mejor comprensión de los parámetros descritos consultar el manual de usuario del código en (Leppänen, 2015) y la plataforma online *Serpent Wiki* (Leppänen et al., 2015a).

2.2.1. Input.

Serpent no tiene una interfaz de usuario interactiva, toda la comunicación entre el código y el usuario es a través de uno o varios archivos de entrada (*input*) y archivos de salida (*output*). El formato del *input* no está restringido. Consta de palabras separadas por espacio en blanco (espacio, tabulación o nueva línea), que contienen caracteres alfanuméricos ('a-z', 'A-Z', '0-9', '.', '-'). El *input* está dividido en bloques de datos separados, denominados tarjetas (*card*). Se procesa una tarjeta a la vez y no hay restricciones con respecto al orden en que se deben organizar. Cada tarjeta está delimitada por el comienzo de la siguiente. El signo de porcentaje

('%') se usa para definir una línea de comentario. Todo a partir de este carácter hasta el final de la línea se omite cuando se lee el *input*. En la Tabla 2.9 se presentan las principales unidades usadas en el código.

Cantidad	Unidad
Distancia	cm
Área	cm ²
Volumen	cm ³
Temperatura	Κ
Tiempo	S
Energía	MeV
Sección eficaz microscópica	b
Sección eficaz macroscópica	1/cm
Masa	g
Densidad másica	g/cm ³
Densidad atómica	$10^{24}/cm^3 = b^{-1}cm^{-1}$
Potencia	W
Densidad de potencia	kW/g
Flujo de partículas	1/cm ² s
Tasa de reacción	1/cm ³ s
Quemado	MWd/kgU
Tiempo de quema	días

Tabla 2.9: Unidades de medida usadas en Serpent.

2.2.2. Definición de la geometría.

El código Serpent utiliza un modelo de geometría basado en universo para describir estructuras complicadas. Esto significa que la geometría se divide en niveles, construidos independientemente y ubicados uno dentro del otro. En el nivel superior, la geometría consiste en pines, donde los pellets (de combustible o B_4C) están rodeados por los revestimientos y el refrigerante. Cada pin se describe de forma independiente como un universo. El siguiente nivel es el ensamble de combustible, en el cual los universos del pin están dispuestos en una lattice hexagonal. En el próximo nivel, estos universos de ensambles se disponen en otra lattice hexagonal para formar el núcleo, rodeada por los reflectores radiales y axiales. El bloque de construcción básico de la geometría es la celda, una región del espacio determinada usando superficies límite. Cada celda está llena de una composición de material homogéneo u otro universo.

La geometría tipo pin consiste en capas anulares de material donde las regiones y sus radios externos se definen en forma ascendente y el código automáticamente construye las celdas utilizando superficies cilíndricas. Para definir el pin es utilizada la tarjeta **pin** y la sintaxis es la siguiente:

 $\begin{array}{l} \mathbf{pin} \ U \\ \begin{bmatrix} MAT_1 & R_1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} MAT_2 & R_2 \end{bmatrix} \\ \dots \\ \begin{bmatrix} MAT_N \end{bmatrix} \end{array}$

Donde:

U: nombre del universo $MAT_1...MAT_N$: materiales $R_1...R_{N-1}$: radios exteriores

El nombre del universo U se asigna arbitrariamente mientras que los materiales y los radios internos del combustible son los dados en la Tabla 2.1.

Una vez definidos los pines se procede a construir las lattices. Las lattices son universos especiales, llenos con una estructura regular de otros universos. El código permite definir varios tipos de lattices como: lattice cuadrada, dos tipos de lattices hexagonales, lattices de arreglo circular, lattices tridimensionales y la lattice definida por capas axiales.

Para este modelo, se construyó la lattice hexagonal tipo 2 utilizando la tarjeta **lat** como sigue:

lat U Tipo X_0 Y_0 N_X N_Y Pitch

Donde:

U	: nombre del universo de la lattice
Tipo	: tipo 2 – lattice hexagonal tipo X
X_0	: coordenada X del origen de la lattice
Y_0	: coordenada Y del origen de la lattice
N_X	: número de elementos en dirección X
N_Y	: número de elementos en dirección Y
Pitch	: pitch de la lattice

Posteriormente se definen las superficies que formarán las celdas utilizando la tarjeta **surf** como:

surf ID Tipo X_0 Y_0 R Z_1 Z_2

Donde:

ID	: nombre
Tipo	: <i>hexyprism</i> – prisma hexagonal tipo Y paralelo al eje Z;
	<i>hexxprism</i> – prisma hexagonal tipo X paralelo al eje Z:
	cyl – cilindro circular paralelo al eje Z
X_0	: origen de coordenadas en X
Y_0	: origen de coordenadas en Y
R	: radio interior de la superficie
Z_1	: plano inferior
Z_2	: plano superior

El código contiene una gran variedad de tipos de superficies, las descritas son las utilizadas en la construcción del modelo (ver Figura 2.6).El parámetro R para la construcción de los ensambles corresponden a los radios de la envoltura dados en la Tabla 2.1, mientras que los planos Z_1 y Z_2 son las dimensiones axiales del núcleo del reactor dadas en la Tabla 2.4. Las superficies *hexyprism* y *hexxprism* se utilizaron para construir los ensambles de combustible, RA y RR, mientras que la del tipo *cyl* fue utilizada para definir el seguidor de la barra de control.



Figura 2.6: Representación esquemática de las superficies utilizadas en Serpent para la construcción del modelo.

Se utilizaron diferentes planos para construir las regiones axiales correspondientes a los RA (superior e inferior), los plenos (superior e inferior), la longitud activa, los RR y las barras de control. En la Figura 2.7 se muestra un esquema de los planos axiales definidos desde la parte inferior del núcleo a la parte superior.



Figura 2.7: Planos axiales definidos para la construcción del núcleo del reactor en Serpent.

En el código la descripción de la geometría consiste en regiones bidimensionales o tridimensionales, denotadas como celdas. Cada celda se define utilizando números de superficie positivos y negativos, que corresponden al *ID* definido en la tarjeta **surf**. La sintaxis para definir las celdas es la siguiente:

cell Nombre UNI_0 MAT [Surf₁ Surf₂ ...]

Donde:

Nombre	: nombre de la celda
UNI_0	: número de universo de la celda
MAT	: material de la celda
Surf _N	: superficies límite

Si la celda se llena con otro universo, el nombre del material *MAT* se reemplaza por el comando **fill** y el universo que la rellena, quedando la sintaxis de la siguiente manera:

cell Nombre UNI_0 **fill** UNI_1 [Surf₁ Surf₂ ...]

Donde UNI_1 es el universo que rellena la celda. Ahora, si la celda describe una región del espacio que no forma parte de la geometría, se define el comando **outside** en lugar del

material *MAT*. La Figura 2.8 muestra un diagrama que representa la metodología descrita hasta el momento para la construcción del ensamble.



Figura 2.8: Representación esquemática de la metodología para la construcción del ensamble en Serpent.

Para formar el núcleo, se procede a llenar una lattice con todas las celdas definidas, ésta a su vez forma un universo que llena a una celda definida como el **Universo 0**. La lattice seleccionada es del tipo 3 (lattice hexagonal tipo Y) la cual contiene todos los ensambles del núcleo. El arreglo de las celdas se realizó a partir del modelo de referencia del reactor GFR2400. Son 1521 celdas ($N_X = 39$, $N_Y = 39$) de las cuales 516 son ensambles de combustible (incluidos los plenos y los RA) y 480 son RR, el espacio restante es llenado con Helio. La celda **Universo 0** se define a partir de la lattice del núcleo, una superficie tipo *hexxprism* que la engloba y los comandos fill y **outside**.

Para la visualización de la geometría se producen archivos de salida en formato *png* utilizando la biblioteca de gráficos GD de código abierto. La sintaxis de la tarjeta **plot** se define como:

plot Tipo XPIX YPIX $[POS MIN_1 MAX_1 MIN_2 MAX_2]$

Donde:

Tipo	: orientación del plano de ploteo 1- YZ, 2- XZ, 3-XY
XPIX	: tamaño horizontal de la imagen en pixeles
XPIY	: tamaño vertical de la imagen en pixeles
POS	: posición del eje perpendicular al plano de ploteo
MIN_1 - MAX_1	: coordenada horizontal mínima y máxima
MIN_2 - MAX_2	: coordenada vertical mínima y máxima

Los colores representan los diferentes materiales, se pueden definir o son asignados aleatoriamente. Las regiones vacías son negras, los errores de geometría son de color verde brillante o rojo (verde = región indefinida, rojo = superposiciones). Los resultados a partir de la metodología descrita se pueden visualizar en la Figura 2.4 de la Sección 2.1.2.

2.2.3. Definición de los materiales.

Definida la geometría se procede a definir los materiales. En Serpent cada material consta de una lista de nucleidos y cada uno se asocia con una librería de secciones eficaces. La convención usual para la definición de los nucleidos es la siguiente:

< Z > < A >. < id >

Donde:

- < Z > : es número atómico del elemento
- < A > : el número másico (tres dígitos)
- <id> : es el id de la librería.

Por ejemplo, 92235.09c se refiere al ²³⁵U y datos generados a una temperatura de 900K.

Para definir los materiales se utiliza la tarjeta **mat**, formulada como:

```
mat Nombre DENS [tmp TEMP] [rgb R G B] [vol VOL] [burn N_R]
[NUC_1 \ FRAC_1]
[NUC_2 \ FRAC_2]
...
```

Donde:

Nombre	: nombre del material
DENS	: densidad del material (positiva para densidad atómica,
	negativa para densidad másica o
	sum para calcular la densidad a partir de fracciones
	de nucleidos dadas)
NUC _n	: identificador de los nucleidos en la composición
$FRAC_n$: fracción de los nucleidos en la composición (positivo para
	fracciones de densidades atómicas y negativo para fracciones
	de densidades másicas)
[tmp TEMP]	: temperatura del material en K para la rutina de ensanchamiento Doppler
	(el valor para TEMP debe ser superior al definido en el material)
[rgb <i>R G B</i>]	: color del material (R: rojo, G: verde, B: azul; valores entre 0 y 255)
[vol VOL]	: volumen del material en cm ³

[**burn** N_R] : cálculo de quemado, $N_R = 1$ para establecer la orden

En la Tabla 2.10 se describe la composición, densidad y temperatura de los materiales definidos en el modelo. La densidad del Helio es determinada a partir de la siguiente ecuación (Perkó, 2012):

$$\rho_{He}\left(\frac{g}{cm^{3}}\right) = 48.14 \times \frac{P(bar)}{T(K)} \times \left[1 + 0.4446 \times \frac{P(bar)}{T(K)^{1.2}}\right]^{-1} \times 10^{-3}$$
(2.9)

Donde T(K) y P(bar) es la temperatura y presión del Helio en el núcleo. La presión del refrigerante en el núcleo es de 7 MPa a una temperatura de 900 K, mientras que en los plenos y en el gap del combustible la presión es de 1 MPa a 900 K.

La densidad del combustible en ambas regiones del núcleo IC y OC es calculada, empleando las Ecuaciones (2.7) y (2.8), a partir de las siguientes relaciones:

$$\rho_{IC} = \frac{m_{total,IC}}{V_{fuel,IC}}; \rho_{OC} = \frac{m_{total,OC}}{V_{fuel,OC}}$$
(2.10)

Tabla 2.10: Composición de los materiales del núcleo del reactor GFR2400 definidos en Serpent.

Motorial	Comp.	Fracción	Densidad	Temperatura	Notación en
waterial	isotópica	(mol%)	(g/cm^3)	(K)	Serpent
(U,Pu)C - IC	Table 2.2	Table 2.2	10.900610	1200	_
(U,Pu)C - OC	1 abla 2.2	1 abla 2.2	10.899760	1200	
(Th,Pu)C - IC	Table 2.3	Table 2.3	10.000110	1200	_
(Th,Pu)C - OC	1 abia 2.3	1 a01a 2.3	10.093830	1200	
Refrigerante	⁴ He	100	0.0037113	900	2004.09c
Gap	⁴ He	100	0.0005342	900	2004.09c
W14Re	^{182}W	22.655	19.48	900	74182.09c

	^{183}W	12.2504			74183.09c
	^{184}W	26.3678			74184.09c
	^{186}W	24.7268			74186.09c
	¹⁸⁵ Re	5.236			75185.09c
	¹⁸⁷ Re	8.764			75187.09c
Re	¹⁸⁵ Re	37.4	21.02	900	75185.09c
	¹⁸⁷ Re	62.6			75187.09c
SiC	²⁸ Si	92.23	2.60	900	14028.09c
	²⁹ Si	4.68			14029.09c
	³⁰ Si	3.09			14030.09c
	C-natural	100			6000.09c
Zr ₃ Si ₂	⁹⁰ Zr	51.45	5.88	900	40090.09c
	91 Zr	11.22			40091.09c
	⁹² Zr	17.15			40092.09c
	⁹⁴ Zr	17.38			40094.09c
	⁹⁶ Zr	2.8			40096.09c
	²⁸ Si	92.23			14028.09c
	²⁹ Si	4.68			14029.09c
	³⁰ Si	3.09			14030.09c
B ₄ C	$^{10}\mathbf{B}$	90	1.912	900	5010.09c
	$^{11}\mathbf{B}$	10			5011.09c
	C-natural	100			6000.09c
AIM1			7.950	900	
Fe: 65.75%	⁵⁴ Fe	5.8			26054.09c
	⁵⁶ Fe	91.72			26056.09c
	⁵⁷ Fe	2.2			26057.09c
	⁵⁸ Fe	0.28			26058.09c
Cr: 14.5%	⁵⁰ Cr	4.34			24050.09c
	⁵² Cr	83.81			24052.09c
	⁵³ Cr	9.49			24053.09c
	⁵⁴ Cr	2.36			24054.09c
Ni: 15.5%	⁵⁸ Ni	68.27			28058.09c
	⁶⁰ Ni	26.1			28060.09c
	⁶¹ Ni	1.13			28061.09c
	⁶² Ni	3.59			28062.09c
	⁶⁴ Ni	0.91			28064.09c

Mo: 1.5%	⁹² Mo	14.84	42092.09c
	⁹⁴ Mo	9.25	42094.09c
	⁹⁵ Mo	15.92	42095.09c
	⁹⁶ Mo	16.68	42096.09c
	⁹⁷ Mo	9.55	42097.09c
	⁹⁸ Mo	24.13	42098.09c
	100 Mo	9.63	42100.09c
Mn: 1.5%	⁵⁵ Mn	100	25055.09c
Ti: 0.4%	⁴⁶ Ti	8.25	22046.09c
	⁴⁷ Ti	7.44	22047.09c
	⁴⁸ Ti	73.72	22048.09c
	⁴⁹ Ti	5.41	22049.09c
	⁵⁰ Ti	5.18	22050.09c
Si: 0.85%	²⁸ Si	92.23	14028.09c
	²⁹ Si	4.68	14029.09c
	³⁰ Si	3.09	14030.09c

2.2.4. Parámetros de cálculo definidos.

Para establecer los parámetros de cálculo se utiliza el comando **set**. Los parámetros utilizados en la simulación de transporte se describen en la Tabla 2.11.

Sintaxis	Descripción
set title NAME	NAME: Nombre del input que se imprime durante
	la ejecución del código.
set pop NPG NGEN NSKIP [K ₀ BTCH]	Establece parámetros para la población de neutro-
	nes simulados.
NPG	: número de neutrones por generación.
NGEN	: número de generaciones activas.
NSKIP	: número de generaciones inactivas.
K_0	: k_{eff} inicial (el valor inicial por defecto es 1).
ВТСН	: número de generaciones ejecutadas por cada lote
	de resultados.

Tabla 2.11: Parámetros de cálculo definidos en Serpent.

set seed RNG	<i>RNG</i> : valor de semilla (valor inicial) utilizado para
	la secuencia de números aleatorios.
set bc <i>MODE</i>	Establece las condiciones de frontera para todas las
	fronteras exteriores de la geometría.
MODE	: tipo de frontera (1 = vacío, 2 = reflectiva, 3 = pe-
	riódica). Por defecto es tipo 1.
set power P	P: potencia para normalización (en W). En el mo-
-	delo se establece una potencia de 2.4E+09 W.
	-
set ures <i>OPT</i> [<i>NUC</i> ₁ <i>NUC</i> ₂]	OPT: opción para cambiar el muestreo de tabla de
-	probabilidad en la región no resuelta (1/sí) o (0/no).
	NUC_n : lista de nucleidos a los que se le aplica la
	opción.
	-
set mcvol NP	Ejecuta la rutina de verificación de volumen de
	Monte Carlo para establecer los volúmenes de ma-
	terial antes de ejecutar la simulación de transporte.
	NP: número de puntos muestreados en la geome-
	tría.
set acelib "< <i>file</i> >"	<i>< file ></i> : Ruta del archivo de directorio de la librería
	de sección eficaz en formato ACE. La librería
	JEFF-3.1 es utilizada en la simulación de trans-
	porte.
set cpd DEPTH [N _z Z _{MIN} Z _{MAX}]	Se establece para el cálculo de la distribución de
	potencia del núcleo modo lattice.
DEPTH	: número de niveles incluidos. 1 – modo ensamble;
	2 – modo ensamble y pin.
N_z	: Número de bins axiales de igual tamaño en los
	que se dividen las lattices.
$Z_{MIN} Z_{MA X}$: Coordenada Z mínima y máxima para la división
	axial.
set ppw UNI LAT	Activa el cálculo de los factores de forma para la
	reconstrucción de la potencia por pin de combusti-
	ble. Los resultados se imprimen en la variable
	PPW_POW_FRAC del output.

UNI	: universo donde la distribución de potencia es cal-
	culada.
LAT	: lattice donde se realiza el cálculo.

2.2.5. Detectores.

Serpent utiliza el estimador de colisión del flujo neutrónico para calcular las tasas de reacción definidas por el usuario según la Ecuación (1.1). La función de respuesta f (r, E) y los dominios de integración se establecen mediante los parámetros del detector. La integral es dividida por el volumen del detector el cual es establecido como la unidad por defecto, pero se puede ajustar manualmente usando la entrada **dv**. La sintaxis para definir el detector es la siguiente:

det NAME PARAM

Donde *NAME* es el nombre del detector y *PARAM* son los parámetros a establecer. En la Tabla 2.12 son descritos los parámetros de los detectores utilizados en el modelo.

Parámetros del detector	Descripción
$\mathbf{dx} X_{MIN} X_{MAX} N_X$	Detectores de malla cartesiana.
$\mathbf{dy} \; Y_{MIN} Y_{MAX} N_Y$	Los detectores de malla se pueden usar para
$\mathbf{dz} Z_{MIN} Z_{MAX} N_Z$	subdividir los resultados en múltiples bins es-
	paciales. Para una malla cartesiana, la división
	cuenta con entradas separadas X, Y, Z.
$X_{MIN}X_{MAX}$: coordenada X mínima y máxima de la malla.
Y _{MIN} Y _{MAX}	: coordenada Y mínima y máxima de la malla.
$N_X N_Y$: número de <i>bins</i> en X Y.
Z _{MIN} Z _{MAX}	: coordenada Z mínima y máxima de la malla
Nz	: número de <i>bins</i> en Z.

	Tabla 2.12: Descri	ipción de los d	letectores utilizados	en Serpent.
--	--------------------	-----------------	-----------------------	-------------

dh TYPE X_0 Y_0 PITCH N_1 N_2 Z_{MIN}	Detector de malla hexagonal.
$Z_{MAX} N_Z$	
TYPE	: tipo de malla (2-plano perpendicular al eje X,
	3-plano perpendicular al eje Y).
$X_0 Y_0$: coordenadas del centro de la malla.
PITCH	: pitch de la malla (pitch definido para la lat-
	tice del núcleo.
$N_1 N_2$: tamaño de la malla. Similar a la definición de
	la lattice del núcleo.
$Z_{MIN} Z_{MAX}$: Coordenada Z mínima y máxima de la malla.
N_Z	: número de <i>bins</i> en Z.
dr MT MAT	Respuesta del detector.
MT	: número de respuesta.
	Los números de respuesta son tipos de reac-
	ción ENDF (MT) y tipos de reacción especia-
	les. Los números de respuesta positivos están
	asociados con secciones eficaces microscópi-
	cas y el resultado es independiente de la den-
	sidad del material. Los números negativos es-
	tán asociados con secciones eficaces macros-
	cópicas y tipos especiales y el resultado es
	multiplicado por la densidad del material.
MAT	: nombre del material o "void" si se utiliza el
	material en el punto de colisión.
de EGRID	Malla de energía del detector.
EGRID	: nombre de la malla de energía.
	Los resultados se dividen en múltiples <i>bins</i> de
	energía basados en la estructura de la red.
ene NAME TYPE N Emin Emax	Definición de la red de energía.
NAME	: nombre de la malla de energía.
N	: número de <i>bins</i> de igual ancho.
TYPE	: tipo 3, <i>bins</i> de igual ancho de letargia.
	: energía mínima (por ejemplo: 1E-09 MeV).
Emax	: energia maxima (por ejemplo: 20 MeV).
dt TYPE	Tipos especiales
TYPF	· tino -3 – división nor ancho de letargia
	. upo 5 – urvision por aneno de letargia.
dm MAT	Material del detector.
--------	--
MAT	: nombre del material donde cuenta el detec-
	tor.
	Si se definen múltiples materiales, los resulta-
	dos se dividen de manera correspondiente en
	múltiples bins. La entrada dm define el volu-
	men de integración.

Los resultados son generados en formato .m de la forma [*input*]_det0.m lo que facilita el procesamiento de los resultados. Serpent permite asociar una malla de ploteo a cada detector, permitiendo visualizar los resultados en imágenes generadas en formato *png*. La sintaxis para definir estas mallas es la siguiente:

mesh ORI XPIX YPIXmesh 8 CMAP DET ORI XPIX YPIX

Donde:

ORI	: orientación con respecto al eje de
	coordenadas
XPIX	: tamaño horizontal de la imagen en pixeles
YPIX	: tamaño vertical de la imagen en pixeles
CMAP	: mapa de color usado (por ejemplo: 1-hot, 4-jet, etc.)
DET	: nombre del detector

El primer formato produce una malla donde se grafica la tasa de fisión y la distribución de flujo térmico utilizando mapas de colores *hot* y *cold*, respectivamente, mientras que el segundo se puede asociar al detector.

2.2.6. Parámetros definidos para el cálculo de quemado.

Para el cálculo de quemado inicialmente se debe identificar los materiales y configurar el historial de irradiación. También hay algunos parámetros adicionales para determinar las rutas de archivos y las opciones utilizadas por las rutinas de cálculo. Cabe señalar que los cálculos de quemado son más sensibles a pequeños cambios en la geometría, los materiales y los parámetros de cálculo en comparación con una simulación de estado estacionario. En la Tabla 2.13 se presentan las tarjetas y parámetros utilizados para el cálculo de quemado en este estudio.

Parámetros	Descripción			
burn	Definido en la tarjeta mat (ver sección 2.2.3)			
dep STYPE [STEP ₂ STEP ₁]	Define el historial de irradiación con pasos y activa el modo de			
	cálculo.			
	STYPE: tipo de paso (daystep: intervalo de tiempo en días).			
	STEP _n : lista de pasos de quemado (1450 días en intervalos de			
	50 días para un total de 29 pasos de quemado).			
set powdens PDE	PDE: densidad de potencia para normalización			
set bumode MODE	Establece el modo de cálculo de quemado.			
	MODE: modo de cálculo.			
	1- TTA (Transmutation Trajectory Analysis),			
	2- CRAM (Chebyshev Rational Approximation Method), mé-			
	todo utilizado por defecto.			
set pcc MODE	Establece el método de integración temporal en el cálculo de			
	quemado. Activa cálculo predictor-corrector.			
	MODE: método de integración (1- extrapolación constante/mé-			
	todo predictor, interpolación linear/método corrector).			
set inventory MAT ₁ MAT ₂	Especifica qué nucleidos o elementos incluir en el archivo de			
	salida [input] _dep.m.			
	MAT_n : nucleido o elemento a incluir.			
set declib "< <i>file</i> >"	Establece la ruta del archivo de la librería de decaimiento, en			
	formato ENDF.			

Tabla 2.13: Parámetros definidos para el cálculo de quemado en Serpent.

set nfylib "< <i>file</i> >"	Establece la ruta del archivo de la librería de rendimiento de fi-
	sión inducida por neutrón, en formato ENDF.
Set sfylib "< <i>file</i> >"	Establece la ruta del archivo de la librería de rendimiento de fi-
	sión espontánea, en formato ENDF.

Capítulo 3: Resultados y Discusión.

3.1. Factor de multiplicación efectivo (*k*_{eff}).

Con el objetivo de verificar los modelos diseñados se utilizó el código Serpent versión 2.1.29 y la librería de secciones eficaces JEFF-3.1 para simular la operación del núcleo al inicio de la vida (BOL, por sus siglas en inglés). El valor de k_{eff} fue calculado considerando condiciones en caliente (temperatura nominal del combustible de 1200 K y 900 K para materiales estructurales del núcleo) y condiciones en frío (temperatura de 300 K en todo el núcleo del reactor). En la simulación se usaron 10⁶ neutrones por generación y 320 generaciones, 300 activas y 20 inactivas, para lograr una buena precisión estadística de los resultados. Los parámetros de corrida se resumen en la Tabla 3.1.

Tabla 3.1: Parámetros de corrida en Serpent al BOL.

Parámetro	Valor
Neutrones por generación (NPG)	106
Generaciones activas (NGEN)	300
Generaciones inactivas (NSKIP)	20
CPU/RAM	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2623 v4
	@ 2.60GHz x 15/64 GB RAM.
Tiempo de corrida:	44 hrs./41.3 hrs.
modelos (U,Pu)C/(Th,Pu)C	

La Tabla 3.2 muestra el valor de k_{eff} calculado para el modelo de referencia (U,Pu)C y el modelo estudiado (Th,Pu)C. Los valores son expresados como $k_{eff} \pm \sigma$, donde la desviación estándar es calculada a partir del error estándar relativo reportado por el código.

El resultado obtenido para el combustible de referencia se comparó con el reportado por (Perkó, 2012) ($1.02777 \pm 9.1E-5$ considerando condiciones en caliente) obteniendo una diferencia de 26 pcm. Para el modelo (Th,Pu)C se ajustó la fracción de volumen de PuC (ver

Tabla 2.3) con el objetivo de obtener un valor de k_{eff} acorde con el resultado para el modelo de referencia.

Modelo	Valor de $k_{\rm eff}$		
Modelo	Condiciones en frío	Condiciones en caliente	
(U,Pu)C	$1.03927 \pm 3.3E-5$	$1.02803 \pm 3.8E\text{-}5$	
(Th,Pu)C	$1.03919 \pm 3.3E-5$	$1.02793 \pm 3.3E-5$	

Tabla 3.2: Resultados de k_{eff} para ambos modelos de combustible.

3.2. Espectro neutrónico.

El espectro de neutrones fue determinado para ambos modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C en el rango de energías de 1E-9 - 20 MeV. Para la obtención de los resultados se definieron los siguientes detectores y parámetros (ver Tabla 2.12):

det 1 dm IC de 1 dt -3	: flujo por unidad de letargia en la región IC
det 2 dm OC de 1 dt -3	: flujo por unidad de letargia en la región OC
det 3 dm RR de 1 dt -3	: flujo por unidad de letargia en el reflector radial
det 4 de 1 dt -3	: flujo por unidad de letargia en el núcleo completo
ene 1 3 1000 1E-9 20	: definición de la malla de energía correspondiente a de

En la Figura 3.1 se muestra la gráfica Flujo neutrónico por unidad de letargia (cm⁻² s⁻¹) vs Energía del neutrón (eV) a escala logarítmica en las regiones IC y OC. Se puede observar las resonancias correspondientes a: ²³⁸U a energías 6.67 eV, 20.87 eV y 36.68 eV para el modelo (U,Pu)C, ²⁴⁰Pu a 1.05 eV y ²⁴²Pu a 2.67 eV. Ambos modelos muestran un comportamiento similar entre sí y a los reportados por (Perkó, 2012; Perkó et al., 2015).



Figura 3.1: Espectro neutrónico en las regiones IC y OC para ambos modelos.

En la Figura 3.2 se muestra la gráfica correspondiente al espectro del núcleo completo y el RR. Como se puede observar el espectro del RR es significativamente más suave respecto a las regiones del combustible IC y OC ya que está compuesto principalmente por Zr_3Si_2 , material que dispersa los neutrones hacia el núcleo activo, y por lo tanto éstos pierden energía. Por esta razón también se obtiene un espectro más suave para el núcleo completo con respecto al de las regiones IC y OC.



Figura 3.2: Espectro neutrónico en el núcleo completo y el RR para ambos modelos.

3.3. Distribución radial de flujo neutrónico.

La distribución radial del flujo neutrónico total se determinó usando detectores de malla cartesiana definidos de la siguiente manera (ver Tabla 2.12):

det 4 dx -350 350 100 dy -3 3 1

En la Figura 3.3 se muestra el cambio del flujo neutrónico $(cm^{-2}s^{-1})$ en función de la distancia desde el centro del núcleo (en cm) en el plano medio de la zona activa del reactor para ambos modelos de combustible.



Figura 3.3: Distribución radial de flujo neutrónico para ambos modelos.

Como se puede observar el valor máximo de flujo no se encuentra en el centro del núcleo, sino en el límite de las dos zonas de combustible IC y OC, dado por la diferencia en la fracción de volumen de PuC entre ambas regiones (ver Tabla 2.2 y Tabla 2.3). Esto conduce naturalmente a una distribución de potencia similar. Las distribuciones de flujo en el plano XY del núcleo del reactor se obtuvieron definiendo el siguiente detector de malla hexagonal:

det 5 **dh** 3 0 0 17.829 39 39 0 0 1

Los resultados se muestran en la Figura 3.4 y la Figura 3.5, donde se aprecia en un mapa de color *jet* el comportamiento descrito anteriormente. La zona en color azul corresponde al RR, mientras que en color rojo hacia el centro es la zona activa del núcleo.



Figura 3.4: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY del núcleo del reactor para el modelo (U,Pu)C.

Como se ha mostrado, las distribuciones de flujo neutrónico son planas indicando que el modelo de combustible (Th,Pu)C propuesto es válido. En adición, los resultados obtenidos para el modelo de referencia (U,Pu)C presentan un comportamiento acorde a los reportados por (Perkó et al., 2015).



Figura 3.5: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY del núcleo del reactor para el modelo (Th,Pu)C.

3.4. Distribución radial y axial de potencia.

Para determinar la distribución radial de potencia se utilizó la opción **ppw** (ver Tabla 2.11) y el detector de malla hexagonal definido como sigue (ver Tabla 2.12):

det 4 dh 3 0 0 17.829 39 39 0 0 1 dr -8 void

Para la normalización de los resultados fue definida la potencia a partir de la opción **<set power** 2.4E+09>, que corresponde a 2400 MW del reactor GFR2400. En la Figura 3.6 y la Figura 3.7 se muestra en un mapa de color *hot* la distribución radial de potencia por ensamble en la zona activa del núcleo (516 ensambles de combustible), para los modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C respectivamente.



Figura 3.6: Distribución radial de potencia para el modelo (U,Pu)C.

Los ensambles en color blanco corresponden a los espacios en el núcleo para las barras de control. Como era de esperar, el comportamiento es similar a la distribución de flujo neutrónico descrito en la Sección 3.3. Se puede observar que el pico de potencia radial, señalado en el ensamble correspondiente, no supera el valor 1.25 por lo que el modelo de combustible propuesto (Th,Pu)C es válido.

En la Figura 3.8 se muestra la gráfica de la distribución del pico de potencia radial en función de la distancia desde el centro del núcleo (en cm) para ambos modelos, la cual presenta un comportamiento acorde a los reportados por (Perkó et al., 2015).



Figura 3.7: Distribución radial de potencia para el modelo (Th,Pu)C.



Figura 3.8: Pico de potencia radial para ambos modelos.

Otro resultado obtenido fue la distribución axial de potencia para ambos modelos. Para ello se dividió la longitud axial del núcleo activo (165 cm) en 100 *bins* utilizando la opción **cpd** de la siguiente forma:

set cpd 1 100 -82.5 82.5

Los resultados se muestran en la Figura 3.9, donde se puede comprobar que el valor máximo de la potencia relativa no supera el valor de 1.25 en ambos casos.



Figura 3.9: Distribución axial de potencia para ambos modelos.

3.5. Evaluación de parámetros de seguridad.

3.5.1. Efecto Doppler.

El efecto Doppler, uno de los parámetros de seguridad básicos considerados, es causado por el ensanchamiento de las resonancias de los nucleidos con el aumento de la temperatura, esto resulta en mayores integrales de resonancia de fisión y de captura. En la Figura 3.10 se puede apreciar el ensanchamiento Doppler de una resonancia de captura radiativa (n, γ) del ²⁴⁰Pu, para temperaturas de 300, 900 y 1200 K simuladas en Serpent. Su efecto sobre la reactividad es negativo y es caracterizado por la constante Doppler (DC) definida como:

$$DC = \frac{\Delta \rho}{\ln\left(\frac{T_{per}}{T_{ref}}\right)}$$
(3.1)

Donde $\Delta \rho$ es el cambio de la reactividad correspondiente a la variación de la temperatura del combustible desde un valor de referencia T_{ref} a un valor perturbado T_{per} . El valor de la reactividad ρ es determinado a partir de la siguiente ecuación:



$$\rho = \frac{k_{\rm eff} - 1}{k_{\rm eff}} \tag{3.2}$$

Figura 3.10: Ensanchamiento Doppler de una resonancia de captura radiativa del ²⁴⁰Pu.

En el código se utilizó la opción **tmp** (Sección 2.2.3) para variar la temperatura (en K) del combustible. En un primer cálculo se consideró un incremento de +100 K variando la temperatura nominal T_{ref} = 1200 K hasta el valor T_{per} = 1300 K, según la referencia (Perkó, 2012). Considerando 2200 K como la temperatura máxima que previene el fallo del revestimiento (Čerba et al., 2017), en un segundo cálculo se varió la temperatura del combustible desde T_{ref} = 1200 K hasta el valor T_{per} = 2200 K. En la Tabla 3.3 se muestran las constantes Doppler calculadas para ambos modelos, mientras que la Tabla 3.4 presenta el cambio de k_{eff} (Δk_{eff}) dado por las perturbaciones consideradas. Los resultados obtenidos para el modelo (U,Pu)C presentan una buena concordancia con el valor reportado por (Perkó, 2012) (DC = -1076.7 pcm, para una perturbación de +100 K), mientras que el modelo (Th,Pu)C presenta una degradación. Esto es debido, principalmente, a la ausencia de ²³⁸U en esta configuración de combustible.

Tabla 3.3: Constante Doppler calculada para ambos modelos.

Modelo	DC (pcm)		
	Perturbaciones		
	+100 K +1000 K		
(U,Pu)C	-1100.4 ± 61.9	-918.4 ± 8.0	
(Th,Pu)C	-603.3 ± 55.0	-568.8 ± 7.2	

El rango de energía de las resonancias para el ²³²Th es inferior al ²³⁸U, por lo tanto, menos neutrones son capturados hacia energías más altas, haciendo que la magnitud de la constante Doppler sea menos negativa en comparación con el modelo que contiene ²³⁸U. En la Figura 3.11 se muestran las resonancias correspondientes a la sección eficaz de captura radiativa para el ²³⁸U y el ²³²Th donde esquemáticamente se aprecia lo anteriormente descrito.

Modelo	$k_{\rm eff} - ref$	$k_{ m eff} - per$		$\Delta k_{ m eff}$	(pcm)
		Perturbaciones		Perturl	paciones
		+100 K	+1000 K	+100 K	+1000 K
(U,Pu)C	$1.02803 \pm 3.8\text{E-5}$	$1.02710 \pm 3.6\text{E-5}$	$1.02218 \pm 3.4\text{E-5}$	-93.0 ± 5.2	-585.0 ± 5.1
(Th,Pu)C	$1.02793 \pm 3.3E-5$	$1.02742 \pm 3.3E-5$	$1.02430 \pm 3.2\text{E-5}$	-51.0 ± 4.7	-363.0 ± 4.6

Tabla 3.4: Cambio de k_{eff} calculado para ambos modelos.



Figura 3.11: Sección eficaz de captura radiativa del ²³⁸U y ²³²Th.

En la Figura 3.12 se muestra la variación de k_{eff} con el aumento de la temperatura del combustible (K) para ambos modelos. Se definieron las 6 temperaturas disponibles en el código desde 300 K a 1800 K en intervalos de 300 K y se mantuvo la temperatura de 900 K para los materiales estructurales del núcleo. Como se observa, existe una buena concordancia entre los dos modelos en el rango de temperaturas estudiado.



Figura 3.12: Variación de k_{eff} con el aumento de la temperatura del combustible.

3.5.2. Efecto de despresurización.

El efecto de despresurización (efecto de vacío del refrigerante) se define como el cambio en la reactividad correspondiente a una pérdida de refrigerante. En un GFR, los accidentes con despresurización presentan las situaciones más desafiantes debido a la baja inercia térmica

del núcleo. En este estudio, se determinó el efecto de reactividad del más grave de tales accidentes, considerando que el núcleo sufre una despresurización total, es decir la presión nominal del He (7 MPa) disminuye hasta condiciones atmosféricas de 0.1 MPa (Perkó, 2012). Para el cálculo de la densidad del He se utilizó la Ecuación (2.9). En una primera simulación se mantuvo la temperatura nominal de 900 K para el He y posteriormente se varió hasta 300 K. La despresurización fue modelada en todas las regiones que contenían refrigerante, incluido los reflectores y plenos de gases de fisión.

La Tabla 3.5 muestra el cambio de k_{eff} (Δk_{eff}) y de reactividad ($\Delta \rho$) calculados, presentando buena concordancia entre ambos modelos. Los resultados obtenidos para $\Delta \rho$ en el modelo (U,Pu)C se aproximan a los reportados por (Perkó, 2012) (315.4 pcm y 303.2 pcm a 900 K y 300 K respectivamente). La baja densidad y transparencia neutrónica del Helio, hace que el efecto de reactividad por despresurización sea bajo. Esta característica del refrigerante es descrita en la Sección 1.2.3. Además, la temperatura del refrigerante (con su densidad correspondiente) no afecta significativamente los resultados.

 Tabla 3.5: Efecto de despresurización para ambos modelos.

Modelo	$\Delta k_{\rm eff}$ (pcm)		$\Delta \rho$ (pcm)	
	900 K	300 K	900 K	300 K
(U,Pu)C	322.0 ± 5.0	316.0 ± 5.1	303.7 ± 4.7	298.1 ± 4.8
(Th,Pu)C	324.0 ± 4.6	318.0 ± 4.8	305.7 ± 4.3	300.0 ± 4.5

3.5.3. Valor de las barras de control y Margen de apagado.

Se han investigado diferentes combinaciones de inserción de barras de control (CSD) y de seguridad (DSD) para cuantificar su valor total y asegurar que sean capaces de introducir suficiente reactividad negativa para el apagado del reactor en caso de accidente. El valor de

la barra de control (CRW) para cada combinación de barras se ha calculado utilizando la siguiente fórmula:

$$CRW = \frac{k_2 - k_1}{k_2 \times k_1}$$
(3.3)

Donde, k_1 y k_2 son los valores de k_{eff} calculados sin y con la inserción de las barras respectivamente. Los cálculos se realizaron en condiciones en frío (300 K) para considerar el máximo exceso de reactivad del núcleo. La nomenclatura utilizada para las diferentes combinaciones de inserción es la siguiente:

- ALL UP: barras totalmente extraídas, ubicadas sobre el borde superior de la zona activa con una dimensión axial de 165 cm;
- ALL DOWN: barras totalmente insertadas en el núcleo;
- CSD 1-6: barras del anillo interno del sistema CSD totalmente insertadas;
- CSD 7-18: barras del anillo externo del sistema CSD totalmente insertadas;
- DSD 1-12: barras del anillo externo del sistema DSD totalmente insertadas;
- CSD 2, CSD 10: barras individuales del sistema CSD, una por cada anillo, totalmente insertadas;
- DSD 0, DSD 4: DSD 0 corresponde a la barra central y DSD 4 al anillo DSD 1-12;
- All CSD, All DSD: todas las barras de los sistemas CSD y DSD totalmente insertadas respectivamente.

Las especificaciones del diseño de los sistemas de barras de control son descritas en la Sección 2.1.3. En la Figura 3.13 se muestra la distribución de las barras en el núcleo donde el color amarillo corresponde a los anillos del sistema CSD (denotado como "C") y el color azul, al anillo DSD 1-12 y la barra central DSD 0 (denotado como "D").

En la Tabla 3.6 se muestran los valores de k_{eff} y de reactividad calculados para la condición ALL UP en ambos modelos. Los resultados de los valores de las barras de control para los modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C se dan en la Tabla 3.7 y Tabla 3.8 respectivamente.



Figura 3.13: Distribución de los sistemas de barras de control en el núcleo del reactor.

Modelo	ALL UP	
Modelo	Valor de <i>k</i> _{eff}	Reactividad (pcm)
(U,Pu)C	$1.03397 \pm 1.0E-4$	3285.40 ± 9.67
(Th,Pu)C	$1.03367 \pm 1.1E-4$	3257.33 ± 10.64

Tabla 3.6: Valor de k_{eff} y reactividad del núcleo con barras de control en condición ALL UP.

CSDs		DSDs		ALL DOWN
Combinación	CRW (pcm)	Combinación	CRW (pcm)	CRW (pcm)
CSD 2	-283.31 ± 14.40	DSD 0	-256.97 ± 13.70	
CSD 10	-241.93 ± 14.40	DSD 4	-272.02 ± 13.70	
CSD 1-6	-1437.20 ± 13.78	DSD 1-12	-4012.04 ± 14.71	
CSD 7-18	-4340.21 ± 15.51	_	_	
All CSDs	-7472.47 ± 15.81	All DSDs	-4198.25 ± 14.72	-11632.69 ± 17.09

 Tabla 3.7: Resultados del valor de las barras de control para diferentes combinaciones de inserción, modelo (U,Pu)C.

 Tabla 3.8: Resultados del valor de las barras de control para diferentes combinaciones de inserción, modelo (Th,Pu)C.

CSDs		DSDs		ALL DOWN
Combinación	CRW (pcm)	Combinación	CRW (pcm)	CRW (pcm)
CSD 2	-264.65 ± 14.33	DSD 0	-252.42 ± 14.27	
CSD 10	-244.89 ± 14.40	DSD 4	-262.77 ± 14.40	
CSD 1-6	-1392.75 ± 14.41	DSD 1-12	-3941.78 ± 15.36	
CSD 7-18	-4635.05 ± 15.41	_	_	
All CSDs	-7590.71 ± 15.65	All DSDs	-4098.24 ± 16.11	-11602.74 ± 16.80

El valor total en la condición ALL DOWN (CSD+DSD) para los modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C es -11632.69 pcm y -11602.74 pcm respectivamente, presentando buena concordancia con el resultado reportado en la referencia (-11273 pcm) (Haščík et al., 2014) considerando un diseño heterogéneo del ensamble de la barra de control y combustible (U,Pu)C.

Los resultados muestran que, tanto los sistemas DSD como los CSD, pueden insertar por separado suficiente reactividad negativa para apagar el reactor, es decir, sin la necesidad de una inserción combinada con el otro sistema (aplicado a los dos modelos de combustible). Además, incluso si el anillo interno del sistema CSD (CSD 1-6) estuviera atascado fuera del núcleo activo, el uso del anillo externo (CSD 7-18) podría hacer que el sistema sea

suficientemente subcrítico. De las barras individuales CSD 2, CSD 10, DSD 0 y DSD 4, la de mayor valor es la CSD 2 con -283.31 pcm y -264.65 pcm para los modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C respectivamente. En la Figura 3.14, Figura 3.15 y Figura 3.16 se muestra la distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para las combinaciones ALL DOWN, All CSD y All DSD respectivamente, para los dos modelos de combustible.



Figura 3.14: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción de barras de control ALL DOWN para ambos modelos de combustible.

Aunque las barras en la condición ALL DOWN introducen suficiente reactividad negativa para apagar el reactor, se presentan puntos calientes distribuidos simétricamente, ubicados entre los ensambles C7-C8, C9-C10, C11-C12, C13-C14, C15-C16 y C17-C18 en el lado interno del núcleo externo OC (ver Figura 3.13). También se pueden visualizar en las combinaciones All CSD y All DSD. Estos 6 puntos calientes son dados por la distancia relativamente grande entre las barras de control y son reportados por (Perkó et al., 2015) donde para proporcionar un perfil de flujo más plano se investigó un sistema adicional de ensambles de reflector parcialmente móviles, permitiendo que una fracción más grande de





Figura 3.15: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción de barras de control All CSD para ambos modelos de combustible.

Determinado el valor de las barras de control CSD 2, CSD 10, DSD 0 y DSD 4, se calculó el margen de apagado del reactor (SDM), éste se realiza con la barra de control de mayor valor atascada, en condiciones en frío (a 300 K), que corresponde en ambos modelos a la barra CSD 2 (Tabla 3.7 y Tabla 3.8). Como principio de diseño, el margen de apagado del reactor debe mantenerse por encima de 1000 pcm (0.01 $\Delta k/k$) (Kasahara, 2017).

Para el cálculo se procedió a insertar todas las barras en núcleo excepto la barra CSD 2 que se mantuvo totalmente extraída. El SDM obtenido para ambos modelos se mantiene por encima de 1000 pcm tal como se muestran en la Tabla 3.9.



Figura 3.16: Distribución radial de flujo neutrónico en el plano XY para la combinación de inserción de barras de control All DSD para ambos modelos de combustible.

 Tabla 3.9: Margen de apagado del reactor calculado para ambos modelos.

Modelo	SDM (pcm)
(U,Pu)C	7625.90 ± 12.01
(Th,Pu)C	7582.40 ± 11.09

Con el fin de determinar el efecto de la inserción y la extracción de las barras de control en la reactividad del núcleo, en condiciones de operación normal (condiciones en caliente, temperatura del combustible 1200 K), se investigó el valor integral de la barra. Dado que el sistema DSD es para el apagado y solo se utiliza en condiciones totalmente retiradas o totalmente insertadas, el valor integral de la barra se calculó solo para el sistema CSD. En la Figura 3.17 se muestra esquemáticamente el procedimiento para la inserción de las barras en el núcleo. En color azul, por debajo de la línea roja, está representado el porciento de la barra

que es insertado y en la parte izquierda la longitud axial (en cm) del núcleo, incluyendo la longitud activa (165 cm) enmarcada en color rojo.



Figura 3.17: Diagrama de inserción del sistema CSD en el núcleo del reactor.

En la Figura 3.18, la pendiente de la curva integral del valor de la barra ($\Delta \rho / \Delta x$) y, por tanto, la reactividad integrada por unidad de inserción del sistema CSD es mayor cuando las barras de control están en la mitad del núcleo. Esto ocurre porque la región de mayor flujo neutrónico está cerca del centro del núcleo (Figura 3.9) y por lo tanto el cambio en la absorción de neutrones es mayor en esta área (una pequeña inserción produce un gran efecto).



Figura 3.18: Curva integral del valor de las barras (sistema CSD) para ambos modelos.

3.6. Determinación de parámetros cinéticos.

En transitorios y condiciones accidentales, los parámetros cinéticos del reactor son de fundamental importancia, por lo que fue determinado la fracción efectiva de neutrones diferidos (β_{eff}) y el tiempo de generación de neutrones para ambos modelos de combustible. Fue utilizado Serpent versión 2.1.29, basado en el método de probabilidad de fisión iterada IFP (Iterated Fission Probability) para el cálculo de parámetros de cinética puntual, y las librerías de secciones eficaces JEFF-3.1. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 3.10.

Modelo	$\beta_{\rm eff}$ (pcm)	Tiempo de generación de neutrones (µs)
(U,Pu)C	391.22 ± 2.04	0.6759 ± 0.0021
(Th,Pu)C	278.92 ± 1.65	0.6466 ± 0.0023

Tabla 3.10: Fracción efectiva de neutrones diferidos y tiempo de generación de neutrones.

El valor de β_{eff} para el modelo (U,Pu)C es un 5% menor que el valor reportado por (Perkó, 2012; Perkó et al., 2015) (413.7 pcm), mientras que el tiempo de generación de neutrones resultó ser 0.3% mayor (0.6737 μs). Esto probablemente por las diferentes librerías de secciones eficaces y los códigos utilizados.

En el modelo (Th,Pu)C existe un deterioro del parámetro β_{eff} , ya que tiene una fracción de transuránicos (TRU) más alta que el modelo (U,Pu)C, dado por la fracción de volumen de PuC (ver Tabla 2.2 y Tabla 2.3), los cuales son caracterizados por su baja β_{eff} (Tabla 3.11). Un efecto similar es reportado en estudio realizado por (Ibrahim et al., 2018).

Nucleido	Espectro	$\beta_{ m eff}$ (%) ¹
²³² Th	Rápido	2.032 ± 0.079
²³³ U	Térmico	0.268 ± 0.013
²³⁸ U	Rápido	1.650 ± 0.086
²³⁵ U	Térmico	0.665 ± 0.021
²³⁸ Pu	Rápido	0.157 ± 0.019
²³⁹ Pu	Rápido	0.225 ± 0.011
²⁴⁰ Pu	Rápido	0.292 ± 0.014
241 Pu	Rápido	0.543 ± 0.028
242 Pu	Rápido	0.574 ± 0.032
²⁴¹ Am	Térmico	0.13183 ± 0.01752

 Tabla 3.11: Fracción efectiva de neutrones diferidos de los principales nucleidos.

1- fuente: (IAEA, 2018).

3.7. Cálculo de quemado.

Para el análisis de la variación de k_{eff} y la evolución del combustible durante un tiempo de operación de 1450 días efectivos a plena potencia (EFPD, por sus siglas en inglés), se utilizó Serpent versión 2.1.29 y la librería de secciones eficaces JEFF-3.1. Se definieron 29 pasos de quemado en intervalos de 50 días, los parámetros definidos se muestran en la Sección 2.2.6. Se consideró la temperatura nominal del combustible de 1200 K y 900 K para el resto de los materiales del núcleo. En la simulación se usaron 10⁵ neutrones por generación y 320 generaciones, 300 activas y 20 inactivas, para lograr una buena precisión estadística de los resultados. Los parámetros de corrida se resumen en la Tabla 3.12.

 Tabla 3.12: Parámetros de corrida en Serpent para el cálculo de quemado.

Parámetro	Valor
Neutrones por generación (NPG)	105
Generaciones activas (NGEN)	300
Generaciones inactivas (NSKIP)	20
CPU/RAM	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2623 v4
	@ 2.60GHz x 15/64 GB RAM.
Tiempo total de corrida:	4 días : 21.5 hrs./4 días : 14.1 hrs.
modelos (U,Pu)C/(Th,Pu)C	

3.7.1. Evolución de k_{eff} .

En la Figura 3.19 se muestra la variación de k_{eff} en función del tiempo de operación (EFPD) para los modelos (U,Pu)C y (Th,Pu)C. Las barras de error están ploteadas para un intervalo de confianza del 95% ($k_{eff} \pm 2\sigma$). Como se puede observar en el modelo (U,Pu)C el valor de k_{eff} decrece linealmente desde 1.02805 hasta 0.99973; mientras que en el modelo (Th,Pu)C inicialmente con un valor de 1.02786 decrece en los primeros 100 días hasta un valor mínimo de 1.02104. Esto se debe a que el ²³³Pa producido a partir del ²³²Th actúa como veneno de neutrones ya que tiene una alta sección eficaz de captura neutrónica, tal como fue descrito en la Sección 1.2.8. Cuando se alcanza el equilibrio (alrededor de los 75 días), el valor de k_{eff} comienza a aumentar progresivamente debido a la producción de ²³³U hasta un valor máximo de 1.02626 (alrededor de los 850 días), posteriormente disminuye hasta 1.02347 con el aumento del tiempo de operación dado al agotamiento del combustible y acumulación de productos de fisión. Esto indica que la configuración y la densidad del combustible propuesta son satisfactorias para mantener el núcleo crítico durante todo el período de irradiación. Los resultados indican que en el modelo (Th,Pu)C se logra extender el ciclo de combustible con respecto al modelo (U,Pu)C dado a la producción de ²³³U.



Figura 3.19: Valor de k_{eff} en función del tiempo de operación para ambos modelos.

Al final del ciclo (EOC) se alcanzó un quemado promedio total (en MWd/kgHM) de 55.75 para el modelo (Th,Pu)C, el cual es mayor al valor 51.33 obtenido para el modelo (U,Pu)C. La contribución del núcleo interno IC durante el tiempo de operación es mayor que el núcleo externo OC. El porcentaje de contribución de IC es 52% contra 48% de OC para el modelo (U,Pu)C, mientras que para el modelo (Th,Pu)C IC representa el 51% contra el 49% de OC.

3.7.2. Evolución del combustible.

En la Figura 3.20 se muestra la evolución del vector de Plutonio (²³⁸Pu, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu y ²⁴²Pu) en función del tiempo de operación para los dos modelos de combustible.



Figura 3.20: Evolución de la masa de los isótopos de Pu en ambos modelos.

Durante el quemado, el cambio en la masa total de Plutonio está predominado por las tasas de fisión de los isótopos presentes y su reproducción a partir de los nucleidos fértiles. La masa de Plutonio al inicio del ciclo (BOC) para el modelo (Th,Pu)C es mayor que en el modelo (U,Pu)C dado a la mayor fracción de volumen inicial presentada en la Tabla 2.3. En el caso del modelo (U,Pu)C se puede observar la producción de ²³⁹Pu, por captura radiativa a partir del ²³⁸U, y de ²⁴⁰Pu a partir del ²³⁹Pu mediante el mismo proceso. En la Figura 3.21 se muestra el consumo del vector de combustible fértil Uranio (²³⁸U y ²³⁵U) en este modelo.



Figura 3.21: Evolución de la masa de U en el modelo (U,Pu)C.

En el modelo (Th,Pu)C las masas de Plutonio decrecen gradualmente durante el quemado, sin embargo, los isótopos físiles (²³⁹Pu y ²⁴¹Pu) presentan mayor tasa de consumo y no se reproducen debido a la ausencia de ²³⁸U en esta configuración. Las masas de los isótopos no físiles (²³⁸Pu y ²⁴²Pu) disminuyen en ambos modelos, pero a una tasa relativamente lenta, lo que indica que su tasa de consumo es proporcional a su producción.

En la Figura 3.22 se observa la producción de ²³³U y ²³³Pa por captura radiativa a partir del ²³²Th. Inicialmente, en los primeros 100 días, la cría de ²³³U es ligeramente menor dado a la producción de ²³³Pa con una mayor sección eficaz de captura radiativa tal como fue descrito en la Sección 3.6.1.



Figura 3.22: Evolución de la masa de ²³²Th, ²³³U y ²³³Pa en el modelo (Th,Pu)C.

Aunque los isótopos ²³⁹Pu y ²⁴¹Pu presentan fisión en el espectro de energía de neutrones rápidos, en este modelo el ²³³U producido contribuye en gran medida a la reactividad del núcleo dado que la sección eficaz de fisión es ligeramente superior como se muestra en la Figura 3.23. Su influencia en la evolución de k_{eff} durante el tiempo de operación fue descrita con anterioridad en la Sección 3.6.1.



Figura 3.23: Sección eficaz de fisión del ²³³U, ²³⁹Pu y ²⁴¹Pu.

La Figura 3.24 muestra la evolución de los isótopos actínidos menores (MA) ²³⁷Np, ²⁴¹Am, ²⁴³Am y ²⁴⁴Cm en función del tiempo de operación. Como se observa la evolución de MA en el núcleo es dominada principalmente por la producción de ²⁴¹Am a partir de la desintegración radiactiva (β^{-}) del ²⁴¹Pu. También está presente al inicio del ciclo ya que forma parte de la composición del combustible Plutonio, característica del combustible MOX dos

veces reciclado. En menor cantidad se produce ²⁴³Am a partir de la desintegración radiactiva (β -) del ²⁴³Pu producido por captura radiativa del ²⁴²Pu.



Figura 3.24: Evolución de la masa de los principales isótopos MA.

En el modelo (U,Pu)C se produce ²³⁷Np, en una cantidad superior al modelo (Th,Pu)C, a partir de sucesivas reacciones de captura radiativa del ²³⁵U y desintegración radiactiva (β^{-}) del ²³⁷U. Por otro lado, el ²⁴⁴Cm producido a partir del ²³⁹Pu mediante sucesivas reacciones de captura radiativa y desintegración radiactiva (β^{-}) del ²⁴³Pu y ²⁴⁴Am, presenta un comportamiento similar en ambos modelos.

Como resumen, en la Tabla 3.13 se presenta el inventario relativo de combustible cargado al BOC y descargado al EOC en unidades wt%. Los principales isótopos considerados son: U

(²³³U, ²³⁴U, ²³⁵U, ²³⁶U y ²³⁸U), Pu (²³⁸Pu, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu y ²⁴²Pu), MA (²³⁷Np, ²³⁹Np, ²⁴¹Am, ²⁴³Am, ²⁴²Cm y ²⁴⁴Cm) y productos de fisión (FP).

Elemento	Modelo (U,Pu)C		Modelo (Th,Pu)C	
	Cargado (wt%)	Descargado (wt%)	Cargado (wt%)	Descargado (wt%)
²³² Th	0.00	0.00	78.82	73.63
²³³ Pa	0.00	0.00	0.00	0.13
U total	84.18	78.43	0.00	3.85
²³³ U	0.00	0.00	0.00	3.71
²³⁴ U	0.00	0.01	0.00	0.13
²³⁵ U	0.60	0.36	0.00	0.01
²³⁶ U	0.00	0.05	0.00	0.00
²³⁸ U	83.58	78.01	0.00	0.00
Pu total	15.71	15.94	21.03	16.20
²³⁸ Pu	0.42	0.32	0.57	0.43
²³⁹ Pu	8.84	9.33	11.83	7.74
240 Pu	4.10	4.37	5.49	5.48
²⁴¹ Pu	1.18	0.83	1.58	1.09
²⁴² Pu	1.17	1.09	1.56	1.46
MA total	0.11	0.39	0.15	0.45
²³⁷ Np	0.00	0.03	0.00	0.00
²³⁹ Np	0.00	0.01	0.00	0.00
²⁴¹ Am	0.00	0.22	0.15	0.30
²⁴³ Am	0.00	0.10	0.00	0.12
²⁴² Cm	0.00	0.01	0.00	0.01
²⁴⁴ Cm	0.00	0.02	0.00	0.02
FP	0.00	5.24	0.00	5.74
Total	100.00	100.00	100.00	100.00
$k_{\rm eff}$	$1.02805 \pm 1.1E-4$	0.99973 ± 1.2E-4	$1.02786 \pm 9.5E-5$	$1.02347 \pm 1.0E-4$
BR	_	0.83	_	0.81

Tabla 3.13: Inventario relativo de combustible a inicio y final del ciclo para ambos modelos.
Es reportada también la razón de cría (BR: *breeding ratio*), o razón de conversión CR (Sección 1.2.2), definida como la razón entre el material físil producido y el consumido, como promedio durante todo el ciclo de operación (se considera el ²³³U, ²³⁵U, ²³⁹Pu y ²⁴¹Pu como material físil). Los valores obtenidos (BR<1) confirman que ambos modelos son reactores de quema. El modelo (U,Pu)C presenta un aumento de 0.2% en la masa de Pu, mientras que el modelo (Th,Pu)C muestra una disminución de 4.8%, dominada por el ²³⁹Pu, el cual presenta una disminución del 35% de su masa y un aumento del 5.5% en el modelo (U,Pu)C. Por otro lado, al EOC la fracción de MA es ligeramente mayor en el modelo (Th,Pu)C dado por la mayor fracción de Pu (que contiene ²⁴¹Am) cargada al BOC. Una solución pude ser reemplazar el vector de combustible físil Pu por ²³³U manteniendo el ²³²Th como combustible fértil, lo cual sería un objetivo principal en trabajos futuros.

En la Figura 3.25 se puede observar la distribución radial de potencia al final del ciclo de combustible (1450 EFPD). Ambos modelos presentan un deterioro con respecto a la distribución obtenida al BOL (Figura 3.6 y Figura 3.7), esto se debe principalmente a la suposición de que el combustible se mantiene en el núcleo durante todo el tiempo de operación considerado sin aplicar un esquema de gestión de combustible. En el modelo (U,Pu)C esta suposición hace que el núcleo interno tenga un contenido de ²³⁹Pu producido mayor que el externo (debido a su mayor fracción de combustible fértil y flujo neutrónico). Este comportamiento en la distribución radial de potencia también es reportado por (Ibrahim et al., 2018; Perkó et al., 2015). Un efecto similar sucede en el modelo (Th,Pu)C con el ²³³U producido. El pico de potencia radial decrece desde 1.24 al BOL hasta 1.18 al final del ciclo para ambos modelos y tal como se observa en la Figura 3.25 se encuentra en la zona central del núcleo.



Figura 3.25: Distribución radial de potencia al final del ciclo de combustible (1450 EFPD).

Conclusiones.

En este trabajo se ha demostrado la factibilidad del uso del Torio como combustible en el Reactor Rápido enfriado por Gas a gran escala GFR2400. Se utilizó el código Monte Carlo Serpent, versión 2.1.29, y la librería de secciones eficaces JEFF-3.1 para el diseño del modelo 3D heterogéneo del núcleo del reactor considerando el combustible de referencia como (U,Pu)C y el combustible propuesto como (Th,Pu)C. Se simuló el núcleo del reactor al BOL obteniendo un valor de k_{eff} con buena concordancia entre los dos modelos diseñados y el valor reportado de referencia. La distribución radial de flujo neutrónico determinada resultó suficientemente plana en ambos modelos, demostrando que el combustible propuesto es válido. La distribución radial de potencia presentó un comportamiento similar donde el pico de potencia radial no superó el valor de 1.25 y el máximo de la distribución axial no superó tampoco dicho valor. La constante Doppler calculada resultó negativa para diferentes variaciones de la temperatura del combustible en ambos modelos. Sin embargo, el modelo (Th,Pu)C presentó una degradación, dado a que el rango de energías de las resonancias para el ²³²Th es inferior al ²³⁸U, por lo tanto, menos neutrones son capturados hacia energías más altas, haciendo que la magnitud de la constante Doppler sea menor en comparación con el modelo que contiene ²³⁸U. Se estudió el efecto de despresurización del núcleo del reactor considerando diferentes situaciones y el valor de $\Delta \rho$ calculado presentó buena concordancia entre ambos modelos. Se comprobó que la baja densidad y transparencia neutrónica del Helio hace que el efecto de reactividad por despresurización sea bajo y la temperatura del refrigerante (con su densidad correspondiente) no afecta significativamente los resultados. Se realizó un diseño heterogéneo para el ensamble de los sistemas de barras de control del reactor y se investigó diferentes combinaciones de inserción. Los resultados de CRW para cada combinación mostraron que, tanto los sistemas DSD como los CSD, pueden insertar por separado suficiente reactividad negativa para apagar el reactor en caso de accidente en ambos modelos. Se calculó el SDM y resultó por encima de 1000 pcm, valor considerado como principio de diseño del reactor. Se determinó también la curva integral del valor de la barra, donde se obtuvo un comportamiento similar en ambos modelos. Se obtuvo la β_{eff} y el tiempo de generación de neutrones. Para el modelo (U,Pu)C los resultados presentaron buena concordancia con los reportados como referencia, pero el modelo (Th,Pu)C presentó un deterioro en la β_{eff} , ya que tiene una fracción de transuránicos (TRU) más alta que el modelo (U,Pu)C, dado por la fracción de volumen de PuC, los cuales son caracterizados por su baja β_{eff} . Se estudió la variación de k_{eff} y la evolución del combustible durante un tiempo de operación de 1450 EFPD. Se obtuvo que la producción de ²³³U en el modelo (Th,Pu)C permite extender el ciclo de combustible con respecto al modelo (U,Pu)C.

Recomendaciones.

- Profundizar en el ciclo de combustible del GFR2400, mediante la aplicación de un esquema de gestión de combustible similar al descrito en (Ibrahim et al., 2018; Perkó et al., 2015) y analizar la capacidad del reactor de trabajar en un ciclo cerrado en equilibrio.
- Investigar la capacidad de quemado de MA del GFR2400 mediante el uso de alimentación externa de MA de los LWRs.
- Evaluar el valor de las barras de control y el SDM durante el ciclo de operación de reactor.
- Analizar el uso del ²³³U como combustible físil, reemplazando el vector Pu de referencia y utilizando igualmente ²³²Th como combustible fértil.
- Realizar análisis de transitorios del núcleo del GFR2400, es decir, simulaciones dependientes del tiempo para modelar la evolución temporal del sistema, considerando los modelos de combustible estudiados.

Referencias.

- Bertrand, F., Bassi, C., Bentivoglio, F., Audubert, F., Guéneau, C., Rimpault, G., & Journeau, C. (2012). Synthesis of the safety studies carried out on the GFR2400. *Nuclear Engineering and Design*, 253, 161–182. https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2012.08.002
- Carre, F., Yvon, P., Anzieu, P., Chauvin, N., & Malo, J.-Y. (2010). Update of the French R&D strategy on gas-cooled reactors. *Nuclear Engineering and Design*, 240(10), 2401–2408. https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2010.02.042
- Čerba, Š., Vrban, B., Lüley, J., Nečas, V., & Haščík, J. (2017). Optimization of the heterogeneous GFR 2400 control rod design. *Progress in Nuclear Energy*, 97, 170–181. https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2017.01.009
- Generation IV International Forum (GIF). (2002). A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems. Recuperado de https://www.gen-4.org/gif/upload/docs/application/pdf/2013-09/genivroadmap2002.pdf
- Generation IV International Forum (GIF). (2016). *Annual Report*. Recuperado de https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_92757/gif-annual-report-2016
- Haščík, J., Čerba, Š., Lüley, J., & Vrban, B. (2014). Investigation of the GFR2400 Reactivity Control System. International Journal of Chemical, Molecular, Nuclear, Materials and Metallurgical Engineering, 8(9), 997–1005. Recuperado de http://scholar.waset.org/1307-6892/9999366
- Ibrahim, A., Aziz, M., EL-Kameesy, S. U., EL-Fiki, S. A., & Galahom, A. A. (2018). Analysis of thorium fuel feasibility in large scale gas cooled fast reactor using MCNPX code. *Annals of Nuclear Energy*, 111, 460–467. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.07.029
- Ikonen, T., Kättö, J., & Loukusa, H. (2015). FINIX Fuel behavior model and interface for multiphysics applications - Code documentation for version 0.15.6. VTT-R-02988-15. Recuperado de http://virtual.vtt.fi/virtual/montecarlo/download/VTT-R-06563-13.pdf
- International Atomic Energy Agency (IAEA). (2005). *Thorium fuel cycle: Potential benefits and challenges. IAEA-TECDOC-1450.* Vienna.

- International Atomic Energy Agency (IAEA). (2018). Nuclear Data Services. Recuperado de https://www-nds.iaea.org/sgnucdat/a7.htm
- Japan Atomic Energy Agency (JAEA). (2016). Nuclear Data Center. Recuperado de https://wwwndc.jaea.go.jp/NuC/index.html
- Kaltiaisenaho, T. (2014). *Statistical Tests and the Underestimation of Variance in Serpent 2. VTT-R-*00371-14. Recuperado de http://montecarlo.vtt.fi/download/VTT-R-00371-14.pdf
- Kasahara, N. (2017). Fast Reactor System Design. (N. Kasahara, Ed.) (Vol. 8). Tokyo: Springer Nature Singapore. https://doi.org/10.1007/978-981-10-2821-2
- Leppänen, J. (2007). *Development of a new Monte Carlo reactor physics code*. VTT Publications. Helsinki University of Technology. Recuperado de http://montecarlo.vtt.fi/download/P640.pdf
- Leppänen, J. (2015). Serpent: a Continuous energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. Recuperado de http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent_manual.pdf
- Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., & Kaltiaisenaho, T. (2015a). Serpent Wiki. Recuperado de http://serpent.vtt.fi/mediawiki/index.php/Main_Page
- Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., & Kaltiaisenaho, T. (2015b). The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, 82, 142– 150. https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.024
- Organisation for Economic Cooperation and Development (OECD), & Nuclear Energy Agency (NEA). (2012). *Workshop on PSA for New and Advanced Reactors*. Paris. Recuperado de https://www.oecd-nea.org/nsd/docs/2012/csni-r2012-2.pdf
- Organisation for Economic Cooperation and Development (OECD), & Nuclear Energy Agency (NEA). (2015a). *Introduction of Thorium in the Nuclear Fuel Cycle*. Recuperado de https://www.oecd-nea.org/science/pubs/2015/7224-thorium.pdf
- Organisation for Economic Cooperation and Development (OECD), & Nuclear Energy Agency (NEA). (2015b). *Perspectives on the Use Thorium in the Nuclear Fuel Cycle*. Recuperado de https://www.oecd-nea.org/science/pubs/2015/7228-thorium-es.pdf

- Perkó, Z. (2012). *GFR2400 core neutronics and thermal-hydraulics characterization*. Delft University of Technology.
- Perkó, Z., Pelloni, S., Mikityuk, K., Křepel, J., Szieberth, M., Gaëtan, G., ... Poette, C. (2015). Core neutronics characterization of the GFR2400 Gas Cooled Fast Reactor. *Progress in Nuclear Energy*, 83, 460–481. https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2014.09.016
- Soppera, N., Bossant, M., & Dupont, E. (2014). JANIS 4: An Improved Version of the NEA Javabased Nuclear Data Information System. *Nuclear Data Sheets*, 120, 294–296. https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.07.071
- Stainsby, R., Peers, K., Mitchell, C., Poette, C., Mikityuk, K., & Somers, J. (2011). Gas cooled fast reactor research in Europe. *Nuclear Engineering and Design*, 241(9), 3481–3489. https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2011.08.005
- World Nuclear Association (WNA). (2018). World Nuclear Power Reactors & Uranium Requirements. Recuperado de http://www.world-nuclear.org