de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXIII, págs. 3037-3044 (artículo completo) Graciela Bertolino, Mariano Cantero, Mario Storti y Federico Teruel (Eds.) San Carlos de Bariloche, 23-26 Setiembre 2014

VALIDACIÓN DE LA LÍNEA DE CÁLCULO NEUTRÓNICO CONDOR-CITVAP PARA EL CÁLCULO DE REACTORES DE ESPECTRO RÁPIDO

Hernán G. Meier^{a,b}, Eduardo A. Villarino^a

^aINVAP S.E. Comandante Luis Piedra Buena 4950, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina, hgmeier@invap.com.ar - men@invap.com.ar, http://www.invap.com.ar/

^bMaestría en Ingeniería, Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo km 9500, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina, http://www.ib.edu.ar

Palabras Clave: Línea de Cálculo Neutrónica, Reactores Rápidos, Bibliotecas de Secciones Eficaces Nucleares.

Resumen. La línea de cálculo neutrónico CONDOR-CITVAP es una herramienta enfocada y validada principalmente para el cálculo de reactores de espectro térmico. La misma, utiliza dos métodos deterministicos para resolver la ecuación de transporte neutrónico: método de probabilidad de colisión a nivel de celda y difusión por diferencias finitas a nivel de núcleo. Posee diversos algoritmos y métodos de aceleración enfocados a reactores térmicos que no son aplicables, en principio, a reactores rápidos.

El objetivo del presente trabajo es corroborar la validez de la línea para el cálculo de reactores de espectro rápido, para lo cual se calcularon distintos Benchamarks experimentales de la IAEA y se compararon los resultados obtenidos con los valores experimentales.

A partir de los resultados obtenidos, se presentan comentarios sobre la validez de la misma y sugerencias para la adaptación de los códigos que componen la línea de cálculo para el cálculo más eficiente de reactores de espectro rápido.

Entre las sugerencias, a nivel de bibliotecas de datos nucleares: incluir reacciones nucleares (n,2n) y (n,3n) para una mejor cálculo a altos quemados. A nivel de celda: modificar el algoritmo de quemado del CONDOR para el cálculo de reacciones (n,2n) y (n,3n), suprimir el modo fundamental de rebalance para los grupos térmicos y fijar un valor de corte para no calcular grupos de baja energía con muy poca contribución tanto para el cálculo de flujo como para la obtención del espectro crítico. Las propuestas a nivel de celda se han implementado mejorando la solución numérica del cálculo de este tipo de reactores.

1 INTRODUCCIÓN

El cálculo neutrónico se fundamenta en la resolución de la ecuación de transporte neutrónico. La secuencia de pasos seguida para cálculo neutrónico de un reactor nuclear se conoce como línea de cálculo neutrónica. En INVAP S.E. la principal línea utilizada es CONDOR-CITVAP *Ref.* [1].

La misma, se compone de tres etapas:

- Generación de bibliotecas datos nucleares
- Cálculos de celda (CONDOR) Ref. [2]
- Cálculos de núcleo (CITVAP) Ref. [3]

Además existen una serie de programas auxiliares que permiten una vinculación entre estos códigos y el usuario.

1.1 Generación de bibliotecas de datos nucleares

La línea de cálculo CONDOR-CITVAP requiere de bibliotecas de datos nucleares confiables que presenten valores de secciones eficaces que modelen correctamente los ritmos de reacción de los neutrones con la materia. Para el presente estudio se utiliza la biblioteca de trabajo *HELIOS 1901c Ref.[4]*. La misma posee datos de secciones eficaces, parámetros resonantes e información sobre quemado en 190 grupos de energía: 63 rápidos, 69 resonantes y 62 térmicos.

1.2 Cálculo de celda

En esta etapa, se generan secciones eficaces condensadas y homogeneizadas macroscópicas y microscópicas para el posterior cálculo del núcleo.

CONDOR es el código de celda empleado por INVAP S.E. y se basa en la resolución de la ecuación de transporte neutrónico mediante el método de probabilidad de colisión.

1.3 Cálculo de núcleo

En esta última etapa es donde se determinan todos los parámetros de interés de un reactor. En primer lugar, flujo y reactividad. Además, permite realizar cálculos de quemado, de posición de barras de control para lograr la criticidad, etc.

En la presente línea de cálculo, el cálculo de núcleo se realiza por el programa CITVAP; se basa en la teoría de difusión empleando un método de diferencias finitas.

1.4 Clasificación de Reactores Nucleares

Los reactores nucleares de fisión se clasifican mediante el rango de energías que causa la mayor cantidad de fisiones, en los reactores térmicos las mayorías de las reacciones nucleares involucran neutrones del rango térmico de energías (E < 1eV) mientras que en los reactores rápidos la mayoría de la reacciones ocurren con neutrones en el rango rápido de energías (E > 1 keV).

2 CONSIDERACIONES Y MODIFICACIONES

La línea de cálculo CONDOR-CITVAP es una herramienta enfocada y validada principalmente para el cálculo de reactores de espectro térmico.

Para el cálculo de reactores de espectro rápido se analizan modificaciones a la línea de cálculo.

2.1 Validación

Para la validación de la línea de cálculo CONDOR-CITVAP para el cálculo de reactores de espectro rápido se calcularon y contrastaron los resultados de los siguientes Benchmarks de reactores rápidos refrigerados por sodio líquido:

- BFS-73-1: Facilidad crítica con combustible de uranio metálico al 18,5% ε.
 Sistema simple sin barras de control en el núcleo con blancos de UO₂ empobrecido colocados axial y radialmente. Ref. [3]
- BFS-62-3A: Facilidad crítica para simular el reactor BN-600,tiene combustibles híbridos U, Pu y MOX con reflector de acero inoxidable y blancos de dióxido de uranio empobrecido. Ref. [6]
- JOYO MK-I: Reactor de 50 MW_{th}, de combustibles MOX con blancos axiales y radiales de dióxido de uranio empobrecido. Ref. [7]

2.2 Contribución de Reacciones (n,2n)

Las bibliotecas de datos nucleares utilizadas poseen datos de secciones eficaces multigrupo de diferentes isótopos. Como las bibliotecas utilizadas por la línea de cálculo CONDOR-CITVAP están orientadas a reactores de espectro térmico, las mismas no poseen datos de reacciones de baja ocurrencia a bajas energías.

Para el caso de reactores rápidos la contribución de reacciones (n,2n) y (n,3n), cuya ocurrencia aumenta a altas energías, produce como productos de reacción actínidos que cambian las propiedades a altos quemados del combustible nuclear. Se propone estudiar su contribución en los ritmos de reacción en un espectro rápido.

2.3 Modo Fundamental de Rebalance

El código de celda CONDOR para realizar los cálculos de flujo utiliza el Modo Fundamental de Rebalance *Ref.* [8] para determinar la contribución de up-scattering en los grupos térmicos de energía.

Debido a la ausencia de moderador en un reactor rápido, los neutrones no llegan a los rangos térmicos de energía y no se produce ningún fenómeno de up-scattering.

Para el presente estudio se propone analizar la viabilidad de eliminar el modo fundamental de rebalance en CONDOR.

2.4 Valor criterio de corte

Para los cálculos de flujo y espectro crítico, el código de celda resuelve por el método de probabilidad de colisión la ecuación de transporte de neutrones por medio de balances para cada malla y para cada grupo utilizando la fuente de moderación del grupo de mayor energía predecesor.

El código continua resolviendo los balances por malla y por grupo hasta finalizar todos los grupos de energía. Incluso resuelve los balances de los grupos térmicos donde en reactores rápidos por ausencia de moderador los niveles de flujo y los ritmos de reacción son despreciables.

Para evitar la resolución de grupos térmicos, se propone fijar un valor de corte; se adopta que para los cálculos de flujo y espectro crítico se dejen de procesar los grupos donde la fuente de scattering proveniente de los grupos de mayor energía sea menor a 1×10^{-10} neutrones por neutrón de fuente.

3 RESULTADOS

3.1 Validación

A continuación se presentan los resultados de validación frente a los Benchmarks experimentales.

En la Tabla 1, se observan los resultados de cálculo de configuraciones críticas y subcríticas. Se observa que para todos los casos los resultados de cálculo están dentro o a menos de 30 pcm del margen de error experimental.

	Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
Configuración	ρ (pcm)	ρ (pcm)	ρ (pcm)
BFS-73-1	80 ± 290	-1	-81
BFS-62-3A	80 ± 380	-297	-377
JOYO MK-I 64-FA ARO	110 ± 180	-49	-159
JOYO MK-I 64-FA Crítico	-190 ± 200	-362	-172
JOYO MK-I 70-FA ARO	2191 ± 170	1998	-193
JOYO MK-I 70-FA Crítico	-190 ± 180	-397	-206

Tabla 1: Validación de configuraciones críticas y subcríticas de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente a los Benchmarks *BFS-73-1, BFS-62-3A* y *JOYO MK-I* con 64 y 70 elementos combustibles y en configuración ARO (todas las barras afuera) y barras en posición crítico.

En la Tabla 2, se observan los resultados de cálculo de índices espectrales. Los valores experimentales de los Benchmarks se obtuvieron mediante pequeñas cámaras de fisión en el tubo de combustible central. Se observa buena correlación entre los datos experimentales y los valores calculados por la línea de cálculo CONDOR-CITVAP.

Configuración	Índice	Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
	$RR_f^{239}Pu / RR_f^{235}U$	1.112 ± 0.011	1.108	-0.37%
	$RR_{\rm f}^{238}U/RR_{\rm f}^{235}U$	0.0356 ± 0.0005	0.0380	6.70%
BFS-73-1	$RR_c^{238}U/RR_f^{239}Pu$	0.1104 ± 0.0021	0.1091	-1.14%
	$RR_f^{237}Np/RR_f^{239}Pu$	0.269 ± 0.009	0.268	-0.44%
	$RR_c^{237}Np/RR_f^{239}Pu$	0.546 ± 0.025	0.559	2.41%
	$RR_f^{241}Am / RR_f^{239}Pu$	0.228 ± 0.009	0.226	-0.66%
	$RR_f^{243}Am/RR_f^{239}Pu$	0.175 ± 0.008	0.177	1.29%
BFS-62-3A	$RR_f^{239}Pu / RR_f^{235}U$	0.965 ± 0.017	0.944	-2.17%
	$RR_f^{238}U / RR_f^{235}U$	0.0218 ± 0.0006	0.0213	-2.31%

Tabla 2: Validación de Índices Espectrales de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente a los Benchmarks *BFS-73-1 y BFS-62-3A*. Los valores experimentales de los Benchmarks se obtuvieron mediante pequeñas cámaras de fisión en el tubo de combustible central. RR_f: Ritmo de fisión, RR_c: Ritmo de captura.

En la Tabla 3, se observa el coeficiente isotérmico de temperatura determinado experimentalmente frente al calculado por la línea CONDOR-CITVAP. El resultado obtenido no se encuentra incluido dentro del margen de error experimental aunque la diferencia no se considera significativa.

Configuración	Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
	(pcm/°		
JOYO MK-I 65-FA	$-4.04500 \pm 3.00\%$	-3.6047	-11%

Tabla 3: Validación de coeficiente isotérmico de temperatura de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente al Benchmark *JOYO MK-I* con 65 elementos combustibles entre 170 a 250 °C.

En la Tabla 4, se observan los cambios de reactividad por vacio de sodio determinados experimentalmente frente a los calculados por la línea CONDOR-CITVAP. Los valores experimentales de los Benchmarks se obtuvieron al introducir un elemento combustible en cuyas boquilla de ingreso de refrigerante se coloca una obstrucción de caudal para aumentar la fracción de vacío de sodio en el combustible. Los resultados obtenidos presentan mayor imprecisión al ir alejándose del centro del núcleo.

Configuración	Posición	Elemento	Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
			(pcm)	
	Central	FA	$-34.26 \pm 28.5\%$	-24	-30%
	1°Anillo	FA	$-37.34 \pm 24.5\%$	-26	-31%
	2°Anillo	FA	$-37.80 \pm 25.7\%$	-28	-25%
	3°Anillo	FA	$-31.18 \pm 30.0\%$	-24	-23%
JOYO MK-I 70-FA	4°Anillo	FA	-29.62 ± 33.5%	-28	-4%
JOIO MK-1 /U-I'A	5°Anillo	RB	$-12.83 \pm N/A$	-11	-11%
	6°Anillo	RB	$3.03 \pm 240\%$	-3	-192%
	Central				
	+	FA + FA	$-88.50 \pm N/A$	-49	-44%
	1°Anillo				

Tabla 4: Validación de cambios de reactividad por vacio de sodio de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente al Benchmark *JOYO MK-I* con 70 elementos combustibles. FA: vacio en elemento combustible, RB: vacio en elemento blanco radial.

En la Tabla 5, se observan los cambios de reactividad ocasionados por remplazar un elemento combustible por un elemento reflector o dejar la posición vacante. Los resultados obtenidos por la línea CONDOR-CITVAP presentan buena concordancia cuando el intercambio es por un elemento reflector, mientras que la diferencia es mayor cuando en la posición vacante solo queda sodio refrigerante.

Configuración	Posición Remplaz		Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
			(pcm)	(pcm)	
	4°Anillo	RB	$-484.3 \pm 4.56\%$	-468	-3%
JOYO MK-I 70-FA	5°Anillo	RB	$-348.6 \pm 5.36\%$	-340	-2%
	5°Anillo	RB	$-430.5 \pm 4.76\%$	-419	-3%
	5°Anillo	RB	$-397.4 \pm 5.10\%$	-385	-3%
	Central	Na	$-1367.9 \pm 2.58\%$	-1534	12%
	5°Anillo	Na	$-85.8 \pm 17.6\%$	-118	37%

Tabla 5: Validación de cambios de reactividad por vacio de sodio de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente al Benchmark *JOYO MK-I* con 70 elementos combustibles. RB: Cambio por elemento blanco radial, Na: Cambio por la posición vacante donde se llena de sodio refrigerante.

En la Tabla 6 y Figura 1 , se observan los pesos y calibración de barras de control obtenidos por la línea CONDOR-CITVAP frente a los obtenidos experimentalmente en el Benchmark. Para la calibración y peso total de barras de control experimental se utiliza el método del periodo. Los resultados obtenidos por la línea CONDOR-CITVAP presentan buena concordancia.

Configuración	Barra de	Benchmark	CONDOR- CTIVAP	Diferencia
	Control	(pcm)		
JOYO MK-I 70-FA	RR1	2021 ± 2,09%	2079	3%
	RR2	$2012 \pm 3{,}18\%$	2048	2%
	SR1	$2123 \pm 4,04\%$	2135	1%
	SR2	$2142 \pm 2{,}99\%$	2170	1%
	SR3	$2067 \pm 3{,}96\%$	2102	2%

Tabla 6: Validación de pesos de barra de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP frente al Benchmark *JOYO MK-I* con 70 elementos combustibles. RR: Barra Reguladora, SR: Barra de Seguridad.

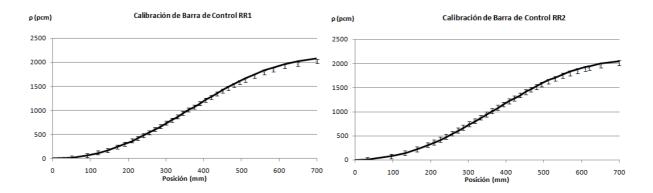


Figura 1: Validación de las curvas de calibración de barras de control de la línea de cálculo CONDOR-CTIVAP (línea gruesa) frente al Benchmark *JOYO MK-I* con 70 elementos combustibles. RR: Barra Reguladora.

3.2 Contribución de Reacciones (n,2n)

Para determinar la contribución de las reacciones (n,2n) en un reactor de espectro rápido se estimo la relación de ritmos de reacción (n,2n) frente a ritmos de reacción de captura en un combustible del Benchmark *BFS-73-1*. Los resultados se observan en la Tabla 7.

Configuración	Índice	CONDOR-
Configuración	marce	CTIVAP
BFS-73-1	$RR_{n,2n}^{238}U/RR_{c}^{238}U$	0.00971

Tabla 7: Relación de ritmos de reacción (n,2n) frente a ritmos de de captura en combustible de *BFS-73-1* calculados con línea de cálculo CONDOR-CITVAP. RR_{n,2n}: Ritmo de reacción (n,2n) RR_c: Ritmo de captura.

Debido a que el código de celda CONDOR no calcula reacciones (n,2n) se agrego al algoritmo de quemado un rendimiento en ²³⁷U del 0.00971 frente a la reacción de captura neutrónica del ²³⁸U, la cual con una vida media de 6.75 días decae en ²³⁷Np.

En la Tabla 8, se ven las variaciones en concentración de 237 U y 237 Np para distintos quemados de un combustible de *BFS-73-1*. Se observa a bajos quemados un gran aumento de 237 U y 237 Np por reacciones (n,2n) mientras que la variación disminuye al aumentar el quemado. Este efecto se explica debido a que sin tener en cuenta las reacciones (n,2n) la única vía para producir 237 U y 237 Np es a través del build-up por capturas neutrónicas a partir del 235 U + n \rightarrow 236 U + n \rightarrow 237 U y este efecto empieza a ser preponderante luego de altos quemados.

Quemado (MWd/TonHM)	Aumento de ²³⁷ U	Aumento de ²³⁷ Np
50000	60%	111%
60000	50%	92%
75000	41%	73%
80000	38%	68%
90000	35%	60%
100000	32%	54%

Tabla 8: Variación de densidad numérica de ²³⁷U y ²³⁷Np al agregar quemado por reacción (n,2n en combustible de *BFS-73-1* en función del quemado.

3.3 Modo Fundamental de Rebalance

La supresión del modo fundamental de rebalance no produjo cambios en los resultados de cálculo de la línea CONDOR-CITVAP, queda pendiente determinar la mejora en la velocidad de cálculo.

3.4 Valor criterio de corte

La introducción del valor criterio de corte para el cálculo de flujo y de espectro crítico reduzco los errores de espectro negativo observados previo a la modificación. La misma, no produjo cambios en los resultados de cálculo de la línea CONDOR-CITVAP, queda pendiente determinar la mejora en la velocidad de cálculo.

4 CONCLUSIONES

De los resultados de los Benchmarks, se observa que la línea de cálculo CONDOR-CITVAP es adecuada en reactores de espectro rápido para los cálculos de:

- Factor de multiplicación de configuraciones críticas y subcríticas
- Obtención de espectros
- Obtención de peso y posiciones de barras de control
- Coeficientes isotérmicos de temperatura

Sin embargo, se debe seguir estudiando la determinación de los coeficientes de realimentación por vacio de sodio para obtener valores más precisos.

Los estudios de reacciones (n,2n) demuestran que a bajos quemados su contribución es mayor que los efectos de build-up por captura neutrónica. Se deben seguir realizando estudios para determinar si es conveniente incluirlas o no en las reacciones a considerar en los cálculos de quemado.

Por último, la supresión Modo Fundamental de Rebalance y la adopción de Valor Criterio de Corte para los cálculos de flujo y espectro crítico se han implementado y han mejorado la solución numérica del cálculo de este tipo de reactores. Queda pendiente determinar la contribución de estas modificaciones en aumento de velocidad de cálculo.

5 REFERENCES

- [1] INVAP S.E. Neutronic Calculation Line. S.C. de Bariloche: s.n.,2001. RRRP-0140-3EDEIN-034-A- Revisión: A.
- [2] Villarino, E. CONDOR V2.61 Neutronic calculation code. S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina: INVAP S.E. DIN.
- [3] Villarino, E., Lecot, C. y Mochi, I. CITVAP V3.6 Reactor calculation code. S.C. de Bariloche, Río Negro, Argentina: INVAP S.E.
- [4] Ferri, A., Fredin, B., Giust, F., Jonsson, A., Skardhamar, T & Stammler, R., *Helios Methods, Chapter IX: The library*. Studsvik Scandpower, December 1997
- [5] Nuclear Energy Agency (NEA), NEA Nuclear Science Committee (NSC) and US Department of Energy (DOE) BFS-73-1 Assembly: Experimental Model of Sodium-Cooled Fast Reactor with Core of Metal Uranium Fuel of 18.5% Enrichment and Depleted Uranium Dioxide Blanket, NEA/NSC/DOE(2006)1, Liquid Metal Fast Reactor LMFR, BFS1-LMFR-EXP-001, (2006)
- [6] Nuclear Energy Agency (NEA), NEA Nuclear Science Committee (NSC) and US Department of Energy (DOE) BFS-62-3A Experiment: Fast Reactor Core with U and U-Pu Fuel of 17% Enrichment and Partial Stainless Steel Reflector, NEA/NSC/DOE(2006)1, Liquid Metal Fast Reactor LMFR, BFS2-LMFR-EXP-001, (2006)
- [7] Nuclear Energy Agency (NEA), NEA Nuclear Science Committee (NSC) and US Department of Energy (DOE) Japan's Experimental Fast Reactor JOYO MK-I Core: Sodium-Cooled Uranium-Plutonium Mixed Oxide Fueled Fast Core Surrounded by UO2 Blanket, NEA/NSC/DOE(2006)1, Liquid Metal Fast Reactor LMFR, JOYO-LMFR-RESR-001, (2006)
- [8] Stamm'ler, R., & Abbate, M., *Methods of steady State Reactor Physics in Nuclear Design*, Fundamental Mode Rebalancing, Página: 271-274, Academic Press, London, (1983)