

Análisis comparativo de resultados entre CASMO, MCNP y SERPENT para una suite de problemas Benchmark en reactores BWR

José Vicente Xolocostli Munguía, Samuel Vargas Escamilla, Armando Miguel Gómez Torres
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Carretera México-Toluca S/N, La Marquesa, Ocoyoacac, México, 50180
vicente.xolocostli@inin.gob.mx; samuel.vargas@inin.gob.mx; armando.gomez@inin.gob.mx

Melisa del Carmen Reyes Fuentes y Edmundo del Valle Gallegos
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares
Av. IPN s/n, Col. Lindavista, México, D. F., 07738, México
rf.melisa@gmail.com; evalle@esfm.ipn.mx

Resumen

En este trabajo se hace una comparación en el análisis de la suite de problemas Benchmark para reactores tipo BWR entre el código **CASMO-4**, **MCNP6** y **SERPENT**. El problema Benchmark consiste de dos geometrías diferentes: celda combustible de un pin y ensamble tipo BWR. Para facilitar el estudio de la física de reactores en el pin de combustible se proporcionan sus características nucleares a detalle, como es el caso de la dependencia del quemado, de la reactividad del nuclido seleccionado, etc. Con respecto al ensamble de combustible, los resultados presentados son respecto al factor de multiplicación infinito para diferentes pasos de quemado y diferentes condiciones de vacío. El hacer el análisis de este conjunto de problemas Benchmark proporciona exhaustivos problemas de prueba para la próxima generación de combustibles de reactores BWR con quemados extendidos altos. Cabe señalar que al realizar esta comparativa se persigue validar las metodologías empleadas al modelar para diferentes condiciones de operación, en caso de que se trate de otro tipo de ensamble BWR. Tomando en consideración que no importa el código a utilizar los resultados estarán dentro de un rango con cierta incertidumbre. En el IPN, en la Escuela Superior de Física y Matemáticas, se ha acumulado cierta experiencia en el uso de **SERPENT** bajo la dirección de personal del ININ, debido al potencial que tiene éste código con respecto a otros códigos comerciales como lo son CASMO y MCNP. Los resultados obtenidos para el factor de multiplicación infinito son alentadores y motivan los estudios para continuar con la generación de las XS de un núcleo para que en un siguiente paso se construya una respectiva biblioteca de datos nucleares y ésta pueda ser empleada por los códigos desarrollados como parte del proyecto de desarrollo de la Plataforma Mexicana de Análisis de Reactores Nucleares AZTLAN.

1. INTRODUCCIÓN

El problema Benchmark con el cual se hace la comparación en este trabajo de los tres códigos no toma en cuenta las actuales limitaciones de diseño de los reactores de agua ligera (aunque para

este caso sólo son BWR) por ejemplo la limitación del enriquecimiento del U-235 (5 w/t), el máximo quemado o la integridad mecánica [1].

Con respecto al quemado promedio a la descarga, se tomó de 70 GWd/t para toda la suite de problemas Benchmark. Las limitaciones del quemado a la descarga tanto para los combustibles de los reactores BWR y PWR es de 55 GWd/t.

El problema Benchmark original consiste de tres diferentes geometrías: celda de combustible, ensamble combustible BWR, y ensamble combustible PWR, en este caso sólo se realizó el análisis para las primeras dos. Para el caso de los ensambles combustible, los modelos geométricos representan configuraciones más realistas.

Se han escogido estos códigos puesto que el objetivo es validar los resultados con el código SERPENT, para tomarlo como base en otros cálculos y análisis posteriores de problemas reales, como parte de su utilización dentro de la Plataforma Mexicana de Análisis de Reactores Nucleares AZTLAN.

2. DESCRIPCIÓN DE LOS CÓDIGOS A COMPARAR

2.1. El Código CASMO

El paquete de cómputo CMS consta de los siguientes códigos: INTERPIN-3, CASMO-4, CMSLINK, SIMULATE-3, SIMULATE-3K, SIMULATE-3R, CMSVIEW, en este trabajo sólo se utiliza el segundo.

El código INTERPIN-3 proporciona valores de temperatura de combustible que son datos de entrada para el código CASMO-4 y SIMULATE-3.

CASMO-4 [3] es un código bidimensional, basado en la teoría de transporte de neutrones en multigrupos, para cálculos de quemado en ensambles de reactores BWR y PWR. El código utiliza una geometría consistente de barras de combustible cilíndricas de composición variada en un arreglo cuadrado, con opción para barras de control que contengan: gadolinio, erbio; barras absorbedoras quemables; barras de control del tipo cluster; canales de instrumentación en el núcleo; espaciadores de agua y barras de control cruciforme en las regiones de separación del ensamble. CASMO-4, incorpora el agotamiento directo de absorbedores quemables, tales como el gadolinio dentro de los cálculos principales y un modelo totalmente heterogéneo se utiliza para los cálculos de la ecuación de transporte bidimensional. El código CASMO-4 proporciona archivos de salida que contienen las características de cada uno de los ensambles de combustible, en cuanto a enriquecimiento de uranio 235, concentraciones de gadolinio, características de las barras de control, los espaciadores, etc. Las salidas de CASMO-4 son datos de entrada para el código CMSLINK, que es utilizado para generar las bibliotecas de datos nucleares a pocos grupos de energía, que son necesarias para el código SIMULATE-3.

2.2. El Código MCNP

MCNP [4] es un código Monte Carlo de N-partículas multipropósito que se puede utilizar para transporte de neutrones, fotones, electrones, o acoplamientos de neutrones/fotones/electrones, incluyendo la capacidad para calcular problemas de valor propio en los sistemas críticos. El código usa una configuración tridimensional arbitraria de materiales en las celdas geométricas delimitadas por diferentes tipos de superficies.

El código utiliza datos de secciones eficaces de punto a punto. Para neutrones, se contabilizan todas las reacciones que ocurren en la evaluación de una sección transversal en particular (tal como ENDF/B-VI). Los neutrones térmicos se describen tanto por los modelos de gas libre como la $S(\alpha, \beta)$. Para las reacciones fotonucleares, la física está disponible para un número limitado de isótopos.

Una de las características importantes del MCNP que lo hacen muy versátil y fácil de utilizar, es una vasta colección de técnicas de reducción de varianza; una estructura de conteo flexible; y una extensa colección de datos de secciones eficaces.

2.3. El Código SERPENT

El código SERPENT [5] es esencialmente un código de transporte neutrónico tridimensional basado en el método de Monte Carlo, como lo es el código MCNP [2], de energía continua, con capacidades de quemado y que ha sido especialmente diseñado y optimizado para la generación de constantes de grupo y aplicaciones físicas de celdas. SERPENT fue desarrollado y actualmente se le da mantenimiento en el centro de investigación técnica de Finlandia (VTT) y desde 2009 se distribuye por medio de la OECD/NEA Data Bank y RSICC.

La generación de constantes de grupo usando códigos tipo MC presenta ciertos problemas debido a la incompatibilidad de metodologías entre los métodos heurísticos y los determinísticos. Originalmente, los cálculos realizados con SERPENT, se basan en cálculos de celda infinita (corriente neutrónica cero en la frontera exterior). Sin embargo, actualmente se realizan varios esfuerzos para incluir en SERPENT opciones para considerar correcciones por fugas mediante modelos similares a los usados en los códigos de física de celdas determinísticos [3]. Códigos de producción basados en métodos determinísticos son el HELIOS [4] y CASMO4 [5]. En este primer acercamiento con SERPENT para la generación de secciones eficaces para celdas de combustible se usarán los modelos más simples de SERPENT.

El código fuente escrito en C, está optimizado y su compilación e instalación se consigue simplemente ejecutando el programa GNU-make. El Makefile proporciona instrucciones detalladas y varias opciones para diferentes plataformas. SERPENT usa la biblioteca de gráficos de código abierto GD para producir una salida gráfica. La compilación no genera errores ni mensajes de advertencia y produce un ejecutable llamado "sss".

3. ESPECIFICACIONES DE LOS PROBLEMAS BECHMARK

3.1. Celda de Combustible

El modelo del arreglo de la celda de combustible [1] utilizado, que es común para el UO_2 y el problema de la celda con MOX, se observa en la Figura 1. El enriquecimiento de U-235 del combustible de UO_2 es de 6.5 w/o y el enriquecimiento de Pu fisible del combustible MOX es del 11.0 w/o (17.2 w/o en total de Pu). Debido a que los problemas de las celdas de combustible están diseñados para el estudio tanto de los PWR como de los BWR, el boro soluble no está contenido en la región del moderador. La densidad de potencia para la celda con UO_2 es de 37 W/gU.

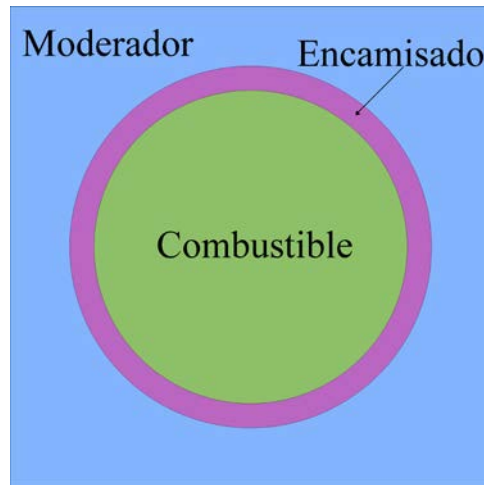


Figura 1. Geometría de la celda de combustible

Los datos geométricos así como los datos de los materiales se muestran en las siguientes tablas:

Tabla I. Dimensiones de la celda de combustible

Descripción	Dimensión (cm)
Pitch	1.265
Diámetro de la pastilla de combustible	0.824
Diámetro externo del encamisado	0.952

Tabla II. Especificaciones del combustible y material estructural

Material	Enriquecimiento	Densidad (g/cm^3)
UO_2		10.3
U-235	6.5 w/o	
Zr-nat		6.53

Tabla III. Especificaciones del moderador

Material	Densidad (g/cm ³)			
	Fracción de vacíos en Frío 0%	Fracción de vacíos en Caliente 0%	Fracción de vacíos en Caliente 40%	Fracción de vacíos en Caliente 70%
H ₂ O	0.996	0.66	0.549	0.409

En cuanto a los resultados, para analizar las dependencias del quemado se pide: 1) k-infinita, 2) la reactividad en vacío del moderador definida como el cambio instantáneo de la reactividad en condiciones de 0% de vacío a 40% o 70% de vacío, 3) la reactividad Doppler, entre la condición "Doppler" (pastilla a 1,800 °K/encamisado y moderador 600 °K) y el estado en "caliente" (pastilla 900 °K/encamisado y moderador 600 °K), 4) reactividad Caliente-Frío entre la condición de "Caliente" y la condición en "frío" (300 °K para todos los materiales y la densidad del agua). En este trabajo sólo se presentan los resultados con respecto a la k-infinita para diferentes condiciones de vacío.

Para el caso de la celda MOX [1], además de la densidad de potencia, que es de 36.6 W/gU, sólo se tiene el cambio en la composición del combustible. Estos datos se proporcionan en las siguientes tablas:

Tabla IV. Especificaciones del combustible MOX

Material	Enriquecimiento	Densidad (g/cm ³)
MOX		10.4
U-235	0.2 w/o	
Pu-total	17.2 w/o	
Pu-físil*	11.0 w/o	

*Pu-físil: (²³⁹Pu+²⁴¹Pu)/(²³⁵U+²³⁸U+²³⁸Pu+²³⁹Pu+²⁴⁰Pu+²⁴¹Pu+²⁴²Pu+²⁴¹Am)

Tabla V. Composición del plutonio

Isotopos	²³⁸ Pu	²³⁹ Pu	²⁴⁰ Pu	²⁴¹ Pu	²⁴² Pu	²⁴¹ Am
w/o	2.1	54.5	25.0	9.3	6.4	2.7

3.2. Ensamble de Combustible con UO₂

La configuración geométrica del modelo utilizado corresponde a un diseño de ensamble combustible moderno BWR 9x9 [1]. En el cual los contenidos físis aseguran quemados promedio a la descarga de 70 GWd/t para 18 meses de operación. Se consideran barras de combustibles con cinco tipos de enriquecimiento: cuatro de los cuales son con UO₂ y sólo un tipo con UO₂-Gd₂O₃, siendo el enriquecimiento promedio del ensamble del 5.5 w/o. La densidad de potencia utilizada es de 25 W/gU

La configuración geométrica del ensamble combustible, así como las características de los materiales se muestran a continuación.

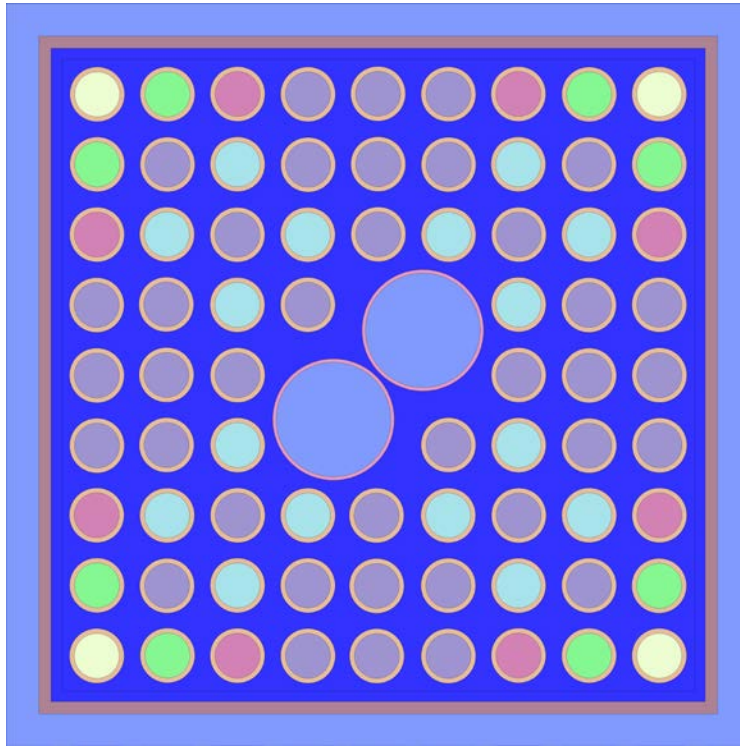


Figura 2. Configuración geométrica del ensamble combustible tipo BWR

Tabla VI. Dimensiones del ensamble combustible Tipo BWR






Descripción	Dimensión(cm)	
 Barras de combustible con UO ₂ Tipo 1	Pitch	1.265
 Barras de combustible con UO ₂ Tipo 2		
 Barras de combustible con UO ₂ Tipo 3		
 Barras de combustible con UO ₂ Tipo 4		
 Barras de combustible con UO ₂ – Gd ₂ O ₃		
Diámetro de la barra de combustible	0.980	
Diámetro externo del encamisado	1.120	
Diámetro interno de la barra de agua	2.350	
Diámetro externo de la barra de agua	2.490	
Distancia interna del canal del ensamble	13.40	
Espesor del canal del ensamble	0.250	
Espesor del Gap de agua del canal	0.670	
Pitch del Ensamble	15.24	

Tabla VII. Especificaciones del combustible y material estructural

Característica/Material	Tipo 1	Tipo 2	Tipo 3	Tipo 4	UO ₂ – Gd ₂ O ₃
Densidad del UO ₂ (g/cm ³)	10.1	10.1	10.1	10.1	9.8
Enriquecimiento de U-235	6.3 w/o	5.0 w/o	4.0 w/o	3.0 w/o	5.0 w/o
Densidad del Zr-nat (g/cm ³)	6.53	6.53	6.53	6.53	6.53
Concentración de Gd ₂ O ₃	0	0	0	0	6.0 w/o
Número de barras	38	8	8	4	16

Tabla VIII. Especificaciones del moderador

Material	Densidad (g/cm ³)			
	Fracción de vacíos en Frío 0%	Fracción de vacíos en Caliente 0%	Fracción de vacíos en Caliente 40%	Fracción de vacíos en Caliente 70%
H ₂ O	0.996	0.737	0.457	0.247

4. RESULTADOS

Los resultados para la k-infinita que se muestran en éste análisis son de la siguiente manera: Primero se hace una comparativa entre los resultados de los códigos del Benchmark [2] que se tomaron como referencia basados en metodologías semejantes a los que se utilizaron en éste trabajo, ellos son el código CASMO4 con una biblioteca ENDF-V con CASMO4 con ENDF-IV que es la versión utilizada en éste trabajo. Cabe notar que se incluyen las tablas con los resultados solamente para las condiciones de 40% vacío en Caliente. Pero tal y como se hace en el Benchmark sólo se reportan los análisis para 40% de Vacíos en Caliente.

Después de ver que las diferencias, se hace la comparación entre los códigos MCNP-BURN2 con una biblioteca JENDL-3.2 y los códigos MCNP6 con ENDF-VII y SERPENT con ENDF-VII.

Los pasos de quemado que se consideran en el Benchmark son de 0, 0.1, 5, 10, 15, 20, 30, 50 y 70 GWd/t.

4.1. Celda de Combustible con UO₂

Tabla IX. Resultados de la k-infinita con CASMO.

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente		
	CASMO4 ENDF-IV	CASMO4 ENDF-V	pcm
0.00	1.37603	1.37611	6
0.10	1.34118	1.34292	130
5.00	1.28284	1.28604	249
10.00	1.23297	1.23633	272
15.00	1.19028	1.19239	177
20.00	1.15317	1.15363	40
30.00	1.08946	1.08591	-327
50.00	0.98741	0.97286	-1496
70.00	0.90752	0.88104	-3006

Tabla X. Resultados de la k-infinita con Metodología Monte Carlo.

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente			pcm	
	MCNP6	SERPENT	MCNP-BURN2	MCNP6	SERPENT
0.00	1.38043	1.38022	1.3874	502	518
0.10	1.34131	1.34467	1.3527	842	594
5.00	1.28413	1.28394	1.2942	778	793
10.00	1.23699	1.23295	1.2425	443	769
15.00	1.19707	1.18937	1.2005	286	927
20.00	1.15494	1.15218	1.1616	573	811
30.00	1.10050	1.08846	1.0933	-659	443
50.00	0.99830	0.98615	0.9780	-2076	-833
70.00	0.92183	0.90522	0.8843	-4244	-2366

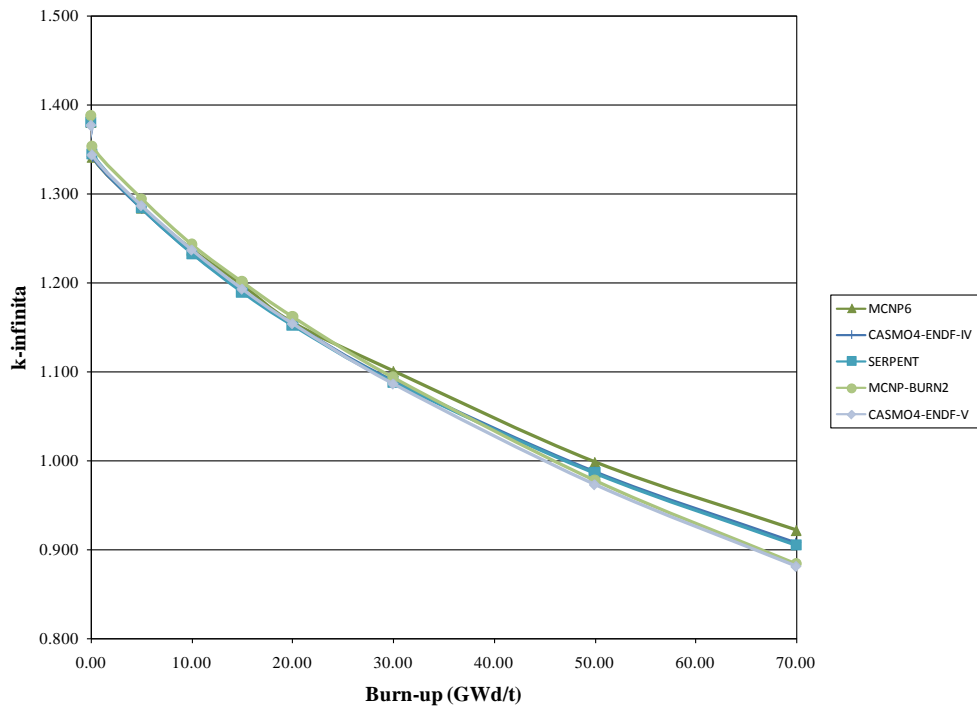


Figura 3. Comportamiento de la k-infinita contra el quemado a 40% de vacíos en caliente para la celda de combustible con UO₂

Como se observa en la Tabla IX, las diferencias entre el código CASMO4 ENDF-IV y CASMO4 ENDF-V no sobrepasan el 3.1% (3006 pcm) solamente para el quemado del 70 GWd/t, porque para los demás quemados está por debajo del 1%. En la Tabla X se hace la comparación del promedio de k-infinita entre MCNP-BURN2 y los códigos utilizados en éste trabajo con la misma metodología, observándose una diferencia máxima por abajo del 4.5% con MCNP6, nótese que nuestro caso SERPENT arroja al igual que lo que CASMO en la tabla anterior una diferencia menor del 2.5% (2366 pcm) solamente para el quemado del 70 GWd/t, porque para los demás quemados está por debajo del 1%, esto es bastante alentador, por las características que implica el uso SERPENT, además que se desea utilizar en la Plataforma AZTLAN.

4.2. Celda de Combustible con MOX

Tabla XI. Resultados de la k-infinita con CASMO.

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente		
	CASMO4 ENDF-IV	CASMO4 ENDF-V	pcm
0.00	1.15378	1.1489	-425
0.10	1.14795	1.1433	-407
5.00	1.13011	1.126	-365
10.00	1.11516	1.1117	-311
15.00	1.10188	1.0987	-289
20.00	1.08948	1.0865	-274
30.00	1.06618	1.0628	-318
50.00	1.02352	1.0183	-513
70.00	0.98589	0.9784	-766

Tabla XII. Comparativa de Resultados Obtenidos con Respecto al Benchmark

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente			pcm	
	MCNP6	SERPENT	MCNP-BURN2	MCNP6	SERPENT
0.00	1.18438	1.18538	1.1803	-346	-430
0.10	1.17728	1.18007	1.1757	-134	-372
5.00	1.15677	1.15817	1.1543	-214	-335
10.00	1.14039	1.14033	1.1378	-228	-222
15.00	1.12457	1.12489	1.1231	-131	-159
20.00	1.10966	1.11027	1.1089	-69	-124
30.00	1.08424	1.0833	1.0815	-253	-166
50.00	1.03802	1.03449	1.0333	-457	-115
70.00	0.99830	0.991905	0.9889	-951	-304

De igual manera que se hizo con la Celda de combustible con UO₂, con la Celda de combustible con MOX, se realizó el mismo análisis, observándose en la Tabla XI, las diferencias entre los cálculos con las dos versiones de CASMO4 ENDF-IV y CASMO4 ENDF-V las cuales no sobrepasan el 0.8% (766 pcm). Así mismo se en la Tabla XII se hace la comparación de la k-infinita entre los códigos basados en metodología Monte Carlo, se puede observar que ahora la diferencia alcanza su valor mayor para MCNP6 hasta casi el 1% (951pcm) y la mínima es con SERPENT de alrededor 0.11% (115 pcm), siendo SERPENT en conjunto donde se tienen las menores diferencias. Esta vez SERPENT se destaca en las mínimas diferencias por abajo del 0.45% (430 pcm). En la gráfica se puede visualizar el comportamiento antes descrito.

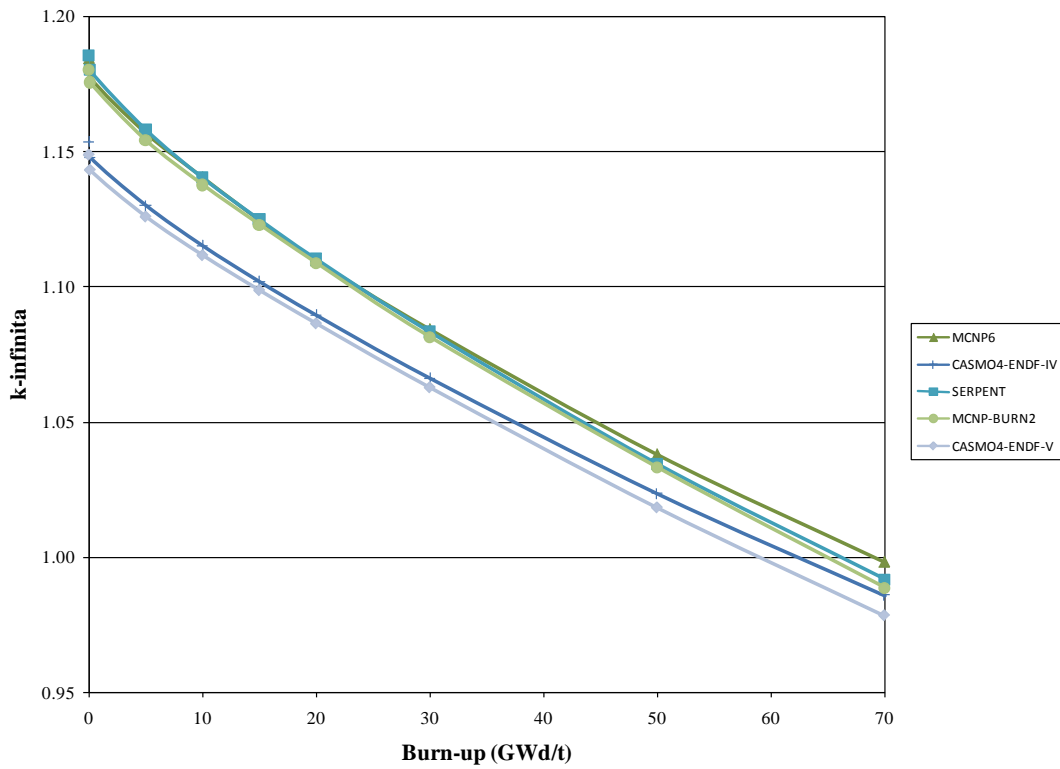


Figura 4. Comportamiento de la k-infinita contra el quemado a 40% de vacíos en caliente para la celda de combustible con MOX

4.3. Ensamble de Combustible con UO₂

Tabla XIII. Resultados de la k-infinita con CASMO.

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente		
	CASMO4 ENDF-IV	CASMO4 ENDF-V	pcm
0.00	1.04962	1.04471	-470
0.10	1.03013	1.02531	-470
5.00	1.05040	1.04843	-188
10.00	1.07973	1.08191	201
15.00	1.11839	1.12589	666
20.00	1.15740	1.16935	1022
30.00	1.11858	1.12327	418
50.00	0.97820	0.97964	147
70.00	0.85251	0.84887	-429

Tabla XIV. Comparativa de Resultados Obtenidos con Respecto al Benchmark

Burn-up (GWd/t)	k-inf a 40% Vacíos en Caliente			pcm	
	MCNP6	SERPENT	MCNP-BURN2	MCNP6	SERPENT
0.00	1.05140	1.0511	1.05449	293	321
0.10	1.02625	1.0306	1.03400	750	329
5.00	1.02303	1.0457	1.05709	3222	1080
10.00	1.05125	1.0688	1.08936	3498	1891
15.00	1.11480	1.1015	1.13132	1460	2636
20.00	1.17810	1.1419	1.17423	-330	2759
30.00	1.12645	1.1268	1.12689	39	15
50.00	1.00420	0.98921	0.98103	-2362	-833
70.00	0.88538	0.86412	0.85303	-3792	-1300

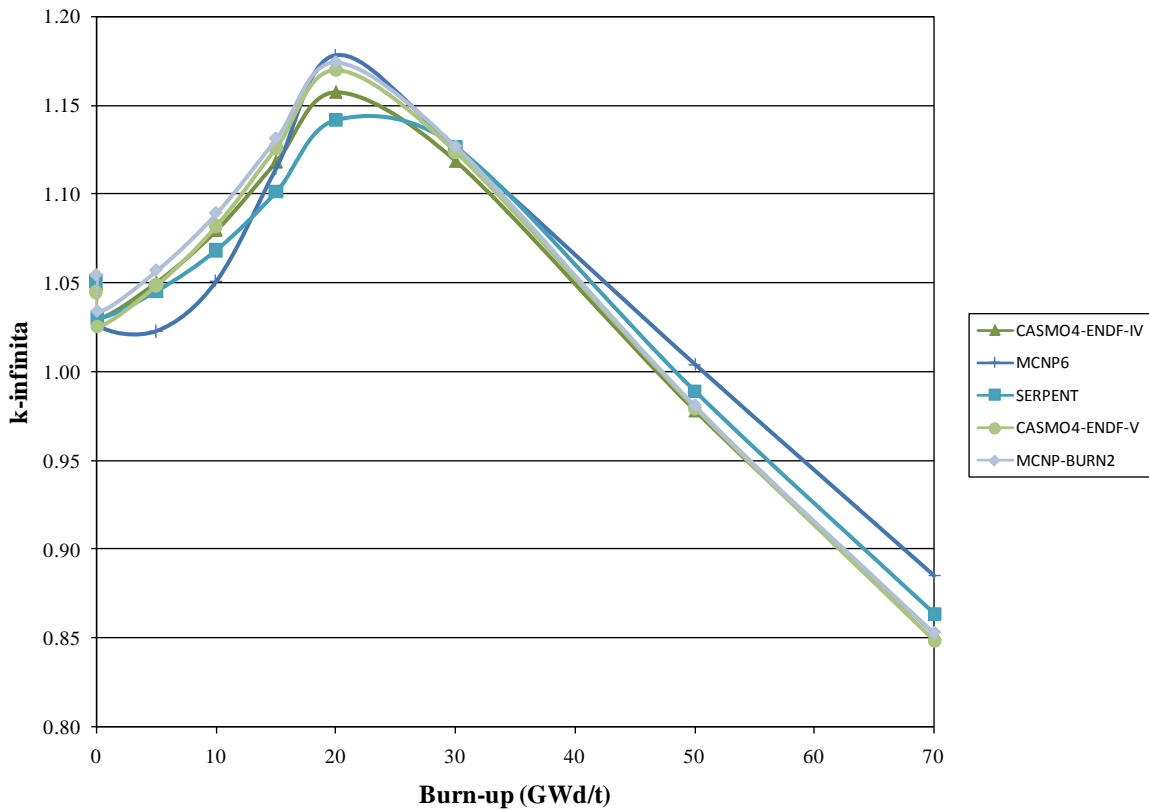


Figura 5. Comportamiento de la k-infinita contra el quemado a 40% de vacíos en caliente para el ensamble combustible con UO₂

Para el caso del análisis del Ensamble BWR hay que considerar que se tienen diferentes tipos de combustible, más los ensambles con Gadolinio. Por lo anterior debido a las limitaciones en el equipo de cómputo se necesitan hacer más análisis con MCNP ya que uno de los puntos débiles tiene que ver con el número de historias empleados que está relacionado directamente con el tiempo de cómputo. Aún así se tiene que la diferencia está por debajo del 4% (3792 pcm). SERPENT en éste caso está por abajo del 3%, conllevando así a que SERPENT sea una mejor alternativa para ser utilizado dentro de la Plataforma AZTLAN, debida a estos resultados, además de ser un código de fuente abierta.

5. CONCLUSIONES

Como se observó en los resultados mostrados, se tuvieron tres análisis: los dos primeros referentes a una celda de combustible primero sólo con UO_2 y después con óxidos mixtos de Uranio y Plutonio (MOX), mientras que el tercero corresponde a un ensamble combustible Tipo BWR 9x9 con cinco tipos de combustible de UO_2 , un tipo de combustible es con Gadolinio ($UO_2-Gd_2O_3$). De acuerdo a los resultados obtenidos se puede concluir lo siguiente:

- En cuanto a los resultados obtenidos para la celda de combustible con UO_2 , si bien CASMO obtiene muy buenos resultados, tiene una diferencia mucho más grande que SERPENT en los últimos pasos de quemado, haciendo que SERPENT se destaque en éste análisis.
- Para la celda con MOX podemos observar una tendencia mejor en los resultados de SERPENT en comparación con CASMO y MCNP.
- Finalmente respecto al análisis del ensamble de combustible, se observan mayores desviaciones. La razón más importante es que mientras que MCNP6 y SERPENT, utilizan la biblioteca de secciones eficaces ENDF-VII, MCNP-BURN2 utilizan la JENDL-3. Sin embargo, la tendencia en los resultados indica que SERPENT reproduce de mejor manera los resultados, teniendo desviaciones menores.

El estudio realizado en este trabajo es un avance significativo en la tarea de validación de las metodologías de cálculo de secciones eficaces principalmente usando el código SERPENT, el cual es la base para la generación de datos nucleares de la Plataforma Mexicana de Simulación AZTLAN.

REFERENCIAS

1. Yamamoto, T. Ikehara, T. Ito and E. Saji, "Benchmark Problem Suite for Reactor Physics Study of LWR Next Generation Fuels," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **Vol. 39**[8], 900-912 (2002).
2. K. Okumura, H. Unesaki, T. Kitada and E. Saji, "Benchmark Results of Burn-up Calculations for LWR Next Generation Fuels," *Proc. Int'l. Conf. On the New Frontiers of Nuclear technology: Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing (PHYSOR2002)*, 9A-03 (2002).
3. Joel Rhodes, Malte Edenius, CASMO-4. A Fuel Assembly Burnup Program, User's Manual, Studsvik-Scandpower, Restricted Distribution.

4. “MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 6”, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, (2012).
5. J. Leppänen. PSG2 / Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. VTT Technical Research Centre of Finland. (2012).