

Análisis de resultados de los códigos AZTRAN y AZKIND para un BWR

Guillermo Elías Bastida Ortiz, Julio Amhed Vallejo Quintero, Juan Galicia Aragón, Juan Luis François Lacouture

*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Ingeniería
Departamento de Sistemas Energéticos*

Av. Universidad 3000, C.U., 04510 México, D.F.

gbo729@yahoo.com.mx; amhedjvq@gmail.com; blink19871@hotmail.com; jfl@fi-b.unam.mx

José Vicente Xolocostli Munguía, Andrés Rodríguez Hernández, Armando Miguel Gómez Torres

*Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares Carretera México-Toluca S/N, La Marquesa,
Ocoyoacac, México, 50180*

vicente.xolocostli@inin.gob.mx; andres.rodriguez@inin.gob.mx;

armando.gomez@inin.gob.mx

Resumen

En este trabajo se presenta un análisis de resultados obtenidos de simulaciones realizadas con el código de transporte de neutrones AZTRAN y el código cinético de difusión de neutrones AZKIND, basado en comparaciones con modelos correspondientes a un típico BWR, con el fin de verificar el comportamiento y confiabilidad de los valores obtenidos con dicho código para su actual desarrollo. Para esto se hicieron simulaciones de diferentes geometrías haciendo uso de códigos nucleares ya validados, como CASMO, MCNP5 y SERPENT. Los resultados obtenidos se consideran adecuados ya que son comparables con los obtenidos y reportados con otros códigos, basados principalmente en el factor de multiplicación de neutrones y la distribución de potencia de los mismos.

1. INTRODUCCIÓN

El proyecto *AZTLAN Platform* [1] es una iniciativa nacional liderada por el Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, que reúne a las principales instituciones públicas de educación superior de México. Consiste en el desarrollo de una plataforma de modelación para el análisis y diseño de reactores nucleares. En este proyecto se pretende modernizar, mejorar e integrar los códigos neutrónicos, termohidráulicos y termomecánicos desarrollados en las instituciones nacionales, en una plataforma integrada, desarrollada y mantenida por expertos mexicanos.

El desarrollo de *AZTLAN Platform* está dividido técnicamente en 4 Grupos de Trabajo (GT), cada uno liderado por expertos en el tema de cada una de las instituciones participantes, Neutrónica, Termohidráulica, Acoplamiento y Análisis de Sensibilidad e Incertidumbre y Grupo de Usuarios.

El presente trabajo es resultado de la participación del Grupo de Usuarios y al seguimiento, y uso, que éste le ha dado al proyecto AZTLAN, en específico a los módulos AZTRAN y AZKIND pertenecientes al Grupo de Trabajo 1 “Neutrónica”, con el fin de proporcionar retroalimentación y sugiriendo prioridades de desarrollo al equipo de desarrolladores, así como promover la colaboración y sinergia entre las instituciones participantes, de esta forma, el beneficio tecnológico y económico de este desarrollo traerá consigo un fortalecimiento institucional en investigación.

2. CÓDIGOS.

Actualmente el proyecto está en su segundo año, después de haber seleccionado y modernizado códigos propios, tomando en cuenta como criterio de selección los códigos que más se apeguen al estado del arte actual, se ha iniciado el desarrollo y actualización de éstos para conformar la plataforma AZTLAN.

Las plataformas de simulación consideran un conjunto extenso de fenómenos físicos importantes en el diseño y seguridad de reactores nucleares, siendo los fenómenos más evidentes y medibles la fuente de calor por fisión, mecanismos de transferencia de calor al refrigerante, así como el comportamiento térmico y mecánico de los materiales que componen las barras de combustible bajo esfuerzos extremos que determinan la integridad de las barreras de seguridad en condiciones normales y anormales de operación. La neutrónica, la termohidráulica y el comportamiento termomecánico de los combustibles constituyen la base para realizar análisis de seguridad, diseño y análisis de reactores nucleares [2].

El diseño y operación de un reactor nuclear está relacionado con la capacidad de predecir la distribución de los neutrones en el sistema en función del espacio, el ángulo, la energía y el tiempo. El núcleo de un reactor es un sistema complejo, en el que se tienen diversos materiales como el combustible, las barras de control, las estructuras, el refrigerante, etc., por lo cual, resulta prácticamente imposible describir de forma analítica la distribución de neutrones, de manera que es necesario realizar los cálculos con programas de cómputo. En el mejor de los casos, se resuelve una ecuación integro-diferencial complicada, conocida como ecuación de transporte de Boltzmann, cuya solución es difícil y demandante de tiempo de cálculo, por lo tanto, se utilizan aproximaciones.

Se puede dar solución a la ecuación de transporte de dos formas: con métodos deterministas (P_1 , S_N , P_L , SP_L , etc.) o con métodos estocásticos, como el método de Monte Carlo.

El grupo 1 del proyecto AZTLAN es el encargado de abordar las soluciones por métodos deterministas, mediante el desarrollo de herramientas de cómputo (códigos) que cubren una amplia variedad de escenarios hasta el caso de considerar núcleos en tres dimensiones (3D), tanto en geometría XYZ como Hexagonal-Z. Los códigos en desarrollo son:

- AZTRAN. Resuelve la ecuación de transporte de neutrones en estado estacionario, geometría XYZ, en multigrupos y ordenadas discretas usando la aproximación nodal RTN-0.

- AZKIND. Resuelve la ecuación de difusión de neutrones dependiente del tiempo, geometría XYZ, en multigrupos, usando el método de elemento finito de Galerkin con la aproximación nodal RTN-0.
- AZNHEX. Resuelve la ecuación de difusión de neutrones dependiente del tiempo, geometría hexagonal-Z, en multigrupos, usando el método de elemento finito de Galerkin con la aproximación nodal RTN-0 y una transformación que permite convertir cada cuadrante de un hexágono en un cuadrado.

2.1 AZTRAN: Código de transporte 3D en coordenadas cartesianas

El código AZTRAN (**AZ**tlan **TR**ansport **N**eutronic code) es un código que resuelve la ecuación de transporte neutrones para varios grupos de energía en estado estacionario, en tres dimensiones, aproximando la dependencia angular por el método de ordenadas discretas y discretizando la dependencia espacial del flujo por el método nodal RTN-0. El código determina en forma numérica el factor de multiplicación efectiva k_{eff} , la distribución del flujo angular de neutrones en cada punto, dado el número de grupos de energía y regiones que caracterizan algún arreglo en particular.

La discretización es realizada por medio de:

- Energía: Teoría de Multigrupos.
- Espacial: Método nodal RTN-0.
- Angular: Aproximación S_N .

La aproximación en multigrupos significa que el intervalo de interés de la variable energía (típicamente de 0 a 15 [MeV] en un reactor nuclear de fisión) es dividido en G grupos o subintervalos.

El método de Ordenadas Discretas consiste en representar el dominio de la variable angular por un conjunto discreto de direcciones angulares. El conjunto de ecuaciones resultantes se le conoce como aproximación S_N .

El método nodal utilizado es el RTN-0, en el cual las variables a determinar son el promedio de la función incógnita en cada una de las caras de la celda, y el valor promedio de la función en cada una de las celdas en las que se discretiza el dominio [3].

La idea original de AZTRAN es poder realizar estudios neutrónicos de núcleos en tres dimensiones con ensambles de combustible de secciones transversales cuadradas típicos de reactores BWR y PWR.

2.2 AZKIND: Código de difusión 3D coordenadas cartesianas

El código AZKIND (**AZ**tlan **KI**netics in **N**eutron **D**iffusion) forma parte de las aplicaciones de análisis neutrónico de la plataforma AZTLAN, resuelve las ecuaciones de difusión de neutrones con dependencia en el tiempo, en coordenadas cartesianas (x, y, z). Tiene su origen en NRKin3D, diseñado para la simulación de la dinámica de reactores y éste se incorporó a la Plataforma AZTLAN como AZKIND, donde se le adicionó el cálculo en estado estacionario y se modernizó de F77 a F90/95, y se incorporó cálculo computacional de doble precisión, optimizando el uso y operaciones con arreglos. Finalmente, se verificó la modernización con la reproducción de resultados previos [4].

Para resolver las ecuaciones de difusión con dependencia en el tiempo en coordenadas cartesianas, AZKIND utiliza el método de Galerkin de elementos finitos y el esquema nodal RTN-0; hace una aproximación del flujo de neutrones con condiciones de frontera y continuidad, generando un sistema matricial de ecuaciones diferenciales, para obtener finalmente un sistema algebraico.

Las consideraciones y uso de archivos de entrada dependen de las opciones de cálculo y de la opción elegida para el procesamiento de cómputo:

- Únicamente simulación de un estado estacionario.
- Estado estacionario seguido de un transitorio.
- Simulación de un transitorio.

También es necesario definir ciertos parámetros como: materiales, condiciones de frontera, datos geométricos, *buckling*, número máximo de iteraciones numéricas, criterios de convergencia, coeficientes de difusión, secciones eficaces, entre otros.

3. SIMULACIÓN DE MODELOS

Los resultados se comparan con los obtenidos con los códigos CASMO-4 [5], HELIOS-1.5 [6], MCNP5 [7], SERPENT 2 [8] y SIMULATE-3 [9]. En particular, SERPENT es un código tridimensional de transporte neutrónico para física de reactores, basado en el método de Monte Carlo, de energía continua y cálculo de quemado, el cual, además de calcular los valores del factor de multiplicación de neutrones y distribución de potencia utilizados para la realización de este trabajo, es capaz de generar las secciones eficaces requeridas por AZTRAN y AZKIND (que no pueden generar por sí mismos) para la realización de los cálculos determinísticos.

Los modelos y simulaciones de este trabajo son una celda de combustible 8x8, un ensamble y un núcleo completo, todos correspondientes a un reactor de agua en ebullición (BWR por sus siglas en inglés). Todos simulados con AZTRAN y el modelo del núcleo completo también con AZKIND.

3.1 Casos de estudio.

El primer modelo realizado es una celda de combustible BWR 8x8, con UO_2 como combustible y ocho tipos de enriquecimiento, dos de ellos con gadolinia en su composición, en el centro se encuentran dos barras de agua y se tiene 40% de vacíos en el moderador. La Figura 1 muestra la geometría del modelo:

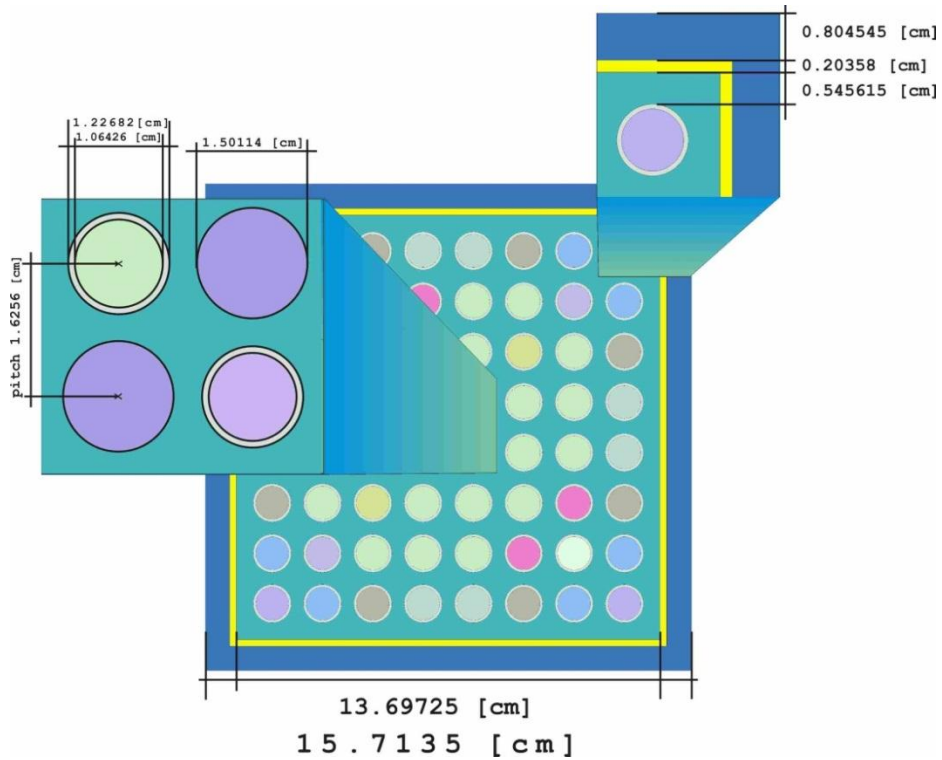


Figura 1. Esquema del modelo simulado de la celda de combustible.

En la Figura 2 y Tabla I se describe la distribución y composición de las barras de combustible en la celda, respectivamente.



Figura 2. Distribución de materiales para el modelo de la celda de combustible.

Tabla I. Composición de materiales para el modelo de la celda de combustible.

	Temp [K]	Dens [g/cm ³]	U ²³⁵ [%]	U ²³⁴ [%]	U ²³⁸ [%]	O [%]	Gd ¹⁵² [%]	Gd ¹⁵⁴ [%]	Gd ¹⁵⁵ [%]	Gd ¹⁵⁶ [%]	Gd ¹⁵⁷ [%]	Gd ¹⁵⁸ [%]	Gd ¹⁶⁰ [%]
1	883	9.691	1.1460	0.0092	86.9949	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	883	9.691	1.4986	0.0120	86.6395	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
3	883	9.691	1.7630	0.0141	86.3729	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
4	883	9.691	1.9393	0.0155	86.1952	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5	883	9.691	2.2919	0.0183	85.8398	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
6	883	9.691	2.6445	0.0212	85.4843	11.8500	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7	883	9.494	1.4386	0.0115	83.1739	11.9056	0.0069	0.0729	0.5036	0.7045	0.5428	0.8669	0.7729
8	883	9.447	1.4236	0.0114	82.3075	11.9195	0.0087	0.0911	0.6294	0.8806	0.6785	1.0836	0.9661

Actualmente en el código AZTRAN sólo se pueden hacer geometrías paralelepédicas, por tal motivo se realizó un modelo equivalente, lo más detallado posible para conservar la esencia del original. La Figura 3 muestra la geometría mencionada:

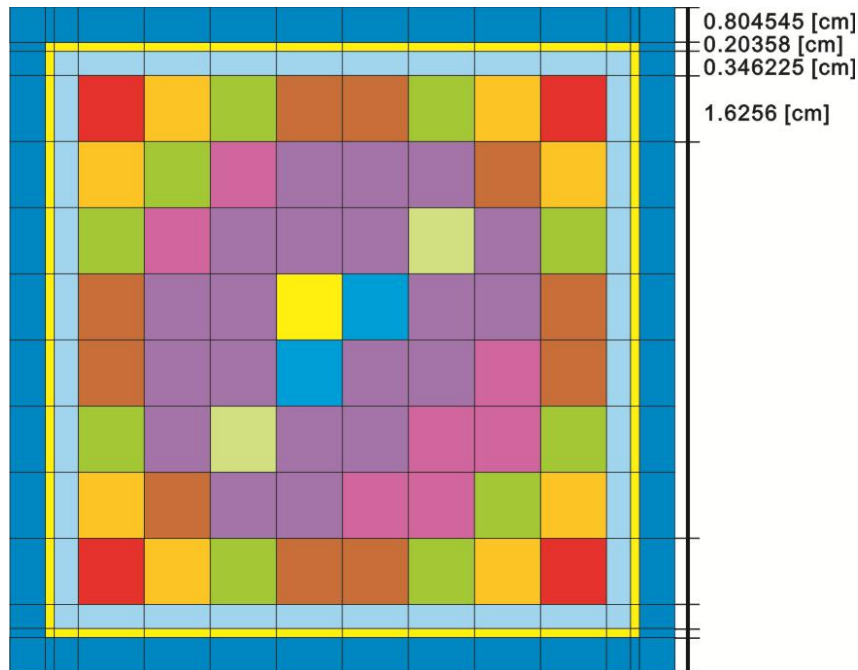


Figura 3. Geometría para el modelo de celda de combustible en AZTRAN.

En la Tabla II se muestran los resultados del factor infinito de multiplicación de neutrones para la celda de combustible, obtenidos con los diferentes códigos, y en el caso de SERPENT con diferentes librerías, para el caso de AZTRAN se utilizó la aproximación de ordenadas discretas S₄.

Tabla II. Valores de k_{inf} de los diferentes códigos para el modelo celda de combustible.

	CASMO-4	SERPENT JEFF-3.1	SERPENT* ENDF/B-7	MCNP5* ENDF/B-7/ JEFF-3.1	HELIOS	AZTRAN
k_{inf}	1.11441	1.12500	1.12752	1.13261	1.10478	1.13691
%EE	1.607	0.672	0.449	0	2.457	0.379

$$\%EE = \left| \frac{k_{inf_{MCNP5}} - k_{inf}}{k_{inf_{MCNP5}}} \right| * 100$$

* 10,000 historias simuladas, 230 ciclos, los primeros 30 descartados. En el modelo de MCNP5 se utilizaron dos librerías por falta de isótopos necesarios en ambas.

Tomando como referencia el valor obtenido con MCNP5, se puede apreciar que el porcentaje de error de los valores de k_{inf} obtenidos con los diferentes códigos son bajos, teniendo al producido con AZTRAN entre los mejores. Cabe notar la variabilidad de los resultados producidos por el mismo código, en este caso SERPENT con tan sólo modificar la librería usada, también mencionar que los valores de SERPENT son los más cercanos a MCNP, esto probablemente debido ambos códigos están basados en el mismo método (Monte Carlo); de donde se destaca la importancia del código usado, así como la biblioteca empleada.

Recordando la siguiente distribución de materiales en donde los valores “7” y “8” (ver Tabla III) corresponden a pines de combustible que contienen UO₂ con gadolinia: Gd₂O₃.

Tabla III. Distribución de materiales para el modelo de celda de combustible.

1	2	3	4	4	3	2	1
2	3	5	6	6	6	4	2
3	5	6	6	6	8	6	3
4	6	6	7	9	6	6	4
4	6	6	9	6	6	5	4
3	6	8	6	6	5	5	3
2	4	6	6	5	5	3	2
1	2	3	4	4	3	2	1

Se obtienen las siguientes distribuciones de potencia radial (ver Tabla IV), en donde se observa claramente la depresión de la potencia en las barras con gadolinia:

Tabla IV. Distribuciones de potencia radial de los diferentes códigos para el modelo de celda de combustible.

CASMO								SERPENT JEFF-3.1							
0.992	1.065	1.09	1.101	1.089	1.062	1.039	0.974	0.989	1.057	1.088	1.105	1.096	1.062	1.037	0.968
1.065	1.002	1.064	1.087	1.056	1.096	1.029	1.041	1.056	0.991	1.070	1.101	1.068	1.082	1.025	1.031
1.09	1.064	0.996	0.889	0.872	0.236	1.105	1.068	1.092	1.064	0.996	0.882	0.876	0.147	1.091	1.054
1.101	1.087	0.889	0.24	0	0.905	1.08	1.102	1.107	1.103	0.875	0.154	0	0.920	1.098	1.106
1.089	1.056	0.872	0	0.922	0.973	1.01	1.12	1.092	1.065	0.871	0	0.987	1.008	1.024	1.133
1.062	1.096	0.236	0.905	0.973	0.948	1.097	1.107	1.060	1.092	0.147	0.920	1.011	0.964	1.117	1.110
1.039	1.029	1.105	1.08	1.01	1.097	1.022	1.079	1.035	1.021	1.086	1.100	1.022	1.107	1.021	1.087
0.974	1.041	1.068	1.102	1.12	1.107	1.079	1.003	0.968	1.032	1.066	1.110	1.142	1.117	1.090	1.005

SERPENT ENDF/B-7								MCNPS							
0.979	1.059	1.093	1.096	1.091	1.058	1.031	0.970	0.979	1.062	1.091	1.108	1.101	1.064	1.040	0.977
1.065	1.006	1.078	1.097	1.070	1.083	1.024	1.033	1.060	1.001	1.071	1.100	1.067	1.082	1.022	1.041
1.096	1.062	1.006	0.886	0.875	0.147	1.100	1.069	1.091	1.069	1.004	0.883	0.873	0.150	1.096	1.077
1.103	1.085	0.872	0.154	0	0.922	1.096	1.119	1.109	1.095	0.874	0.157	0	0.919	1.095	1.112
1.087	1.060	0.876	0	0.973	1.001	1.028	1.145	1.097	1.067	0.869	0	0.982	0.997	1.020	1.122
1.056	1.092	0.146	0.923	0.996	0.965	1.120	1.111	1.072	1.098	0.149	0.919	1.001	0.952	1.105	1.104
1.023	1.021	1.093	1.097	1.034	1.118	1.026	1.077	1.047	1.023	1.097	1.092	1.021	1.111	1.019	1.069
0.963	1.036	1.061	1.107	1.142	1.121	1.080	0.998	0.980	1.048	1.076	1.105	1.125	1.106	1.067	0.992

AZTRAN

1.197	1.121	1.171	1.196	1.176	1.125	1.077	1.161
1.121	0.914	0.984	1.001	0.945	0.945	0.915	1.084
1.171	0.984	0.914	0.8	0.776	0.14	0.962	1.145
1.196	1.001	0.8	0.148	0	0.846	0.993	1.212
1.176	0.945	0.776	0	0.919	0.953	0.97	1.247
1.125	0.945	0.14	0.846	0.953	0.931	1.054	1.221
1.077	0.915	0.962	0.993	0.97	1.054	0.962	1.167
1.161	1.084	1.145	1.212	1.247	1.221	1.167	1.242

El siguiente modelo a simular consistió en “alargar” el modelo anterior, de modo que se tuviera un ensamble de combustible de 381 [cm] de altura y axialmente homogéneo. La Figura 4 muestra la geometría utilizada:

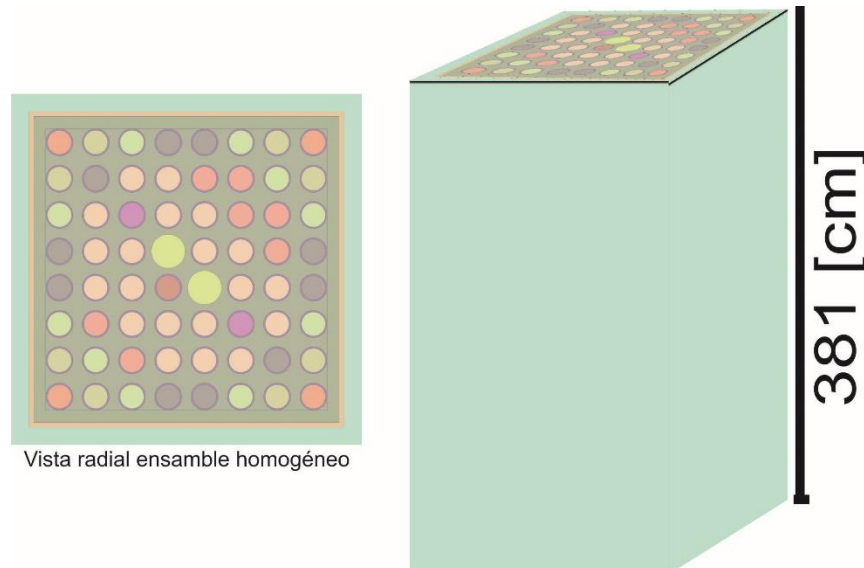


Figura 4. Esquema del modelo de ensamble homogéneo.

Después se simuló el mismo ensamble, pero esta vez cambiando su composición axial, la Figura 5 muestra el esquema de este caso.

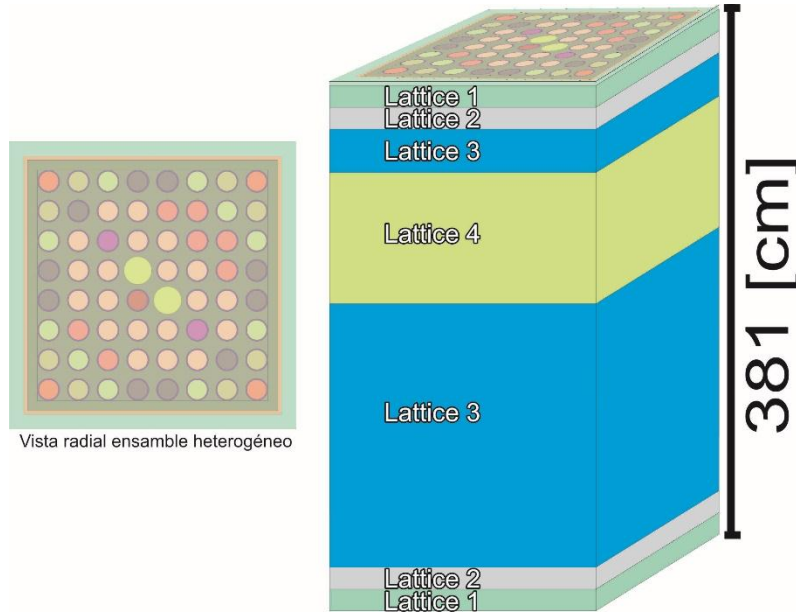


Figura 5. Esquema del modelo de ensamble heterogéneo.

En la Tabla V se muestran los resultados obtenidos del factor infinito de multiplicación de neutrones con AZTRAN, obtenidos con los métodos de aproximación de ordenadas discretas S_2 y S_4 , y su comparación con SERPENT, así como su porcentaje de error relativo.

Tabla V. Valores de k_{inf} SERPENT y AZTRAN S_2 y S_4 .

Método	SERPENT	AZTRAN			
		S2	%EE	S4	%EE
Ensamble homogéneo	1.11991	1.0824	3.3	1.0907	2.6
Ensamble heterogéneo	1.09758	1.0223	6.9	1.0545	3.9

$$\%EE = \left| \frac{k_{inf\ SERPENT} - k_{inf}}{k_{inf\ SERPENT}} \right| * 100$$

Por último se simuló el núcleo completo, con 3 tipos de ensamble y éstos a su vez con 6 tipos diferentes de celda. Las Figuras 6 y 7 muestran la distribución y descripción del modelo.

Igual que en los modelos anteriores se calculó el factor de multiplicación de neutrones, pero en este caso efectivo, la Tabla VI muestra los valores obtenidos, así como el porcentaje de error de éstos con respecto al obtenido con SIMULATE-3.

Tabla VI. Valores de k_{eff} para el modelo de núcleo completo.

	SIMULATE-3	SERPENT	AZTRAN	AZKIND 1.0	AZKIND 1.1
k_{eff}	1.0879	1.09472	1.10428	1.09281	1.08013
%EE	0	0.63	1.051	0.45	0.71

$$\%EE = \frac{|k_{inf_{SIMULATE-3}} - k_{inf}|}{k_{inf_{SIMULATE-3}}} * 100$$

Por último se obtuvieron las distribuciones de potencia radial para el modelo de núcleo completo con SIMULATE-3 y AZKIND, las Figuras 8 y 9 muestran los resultados.

SIMULATE-3

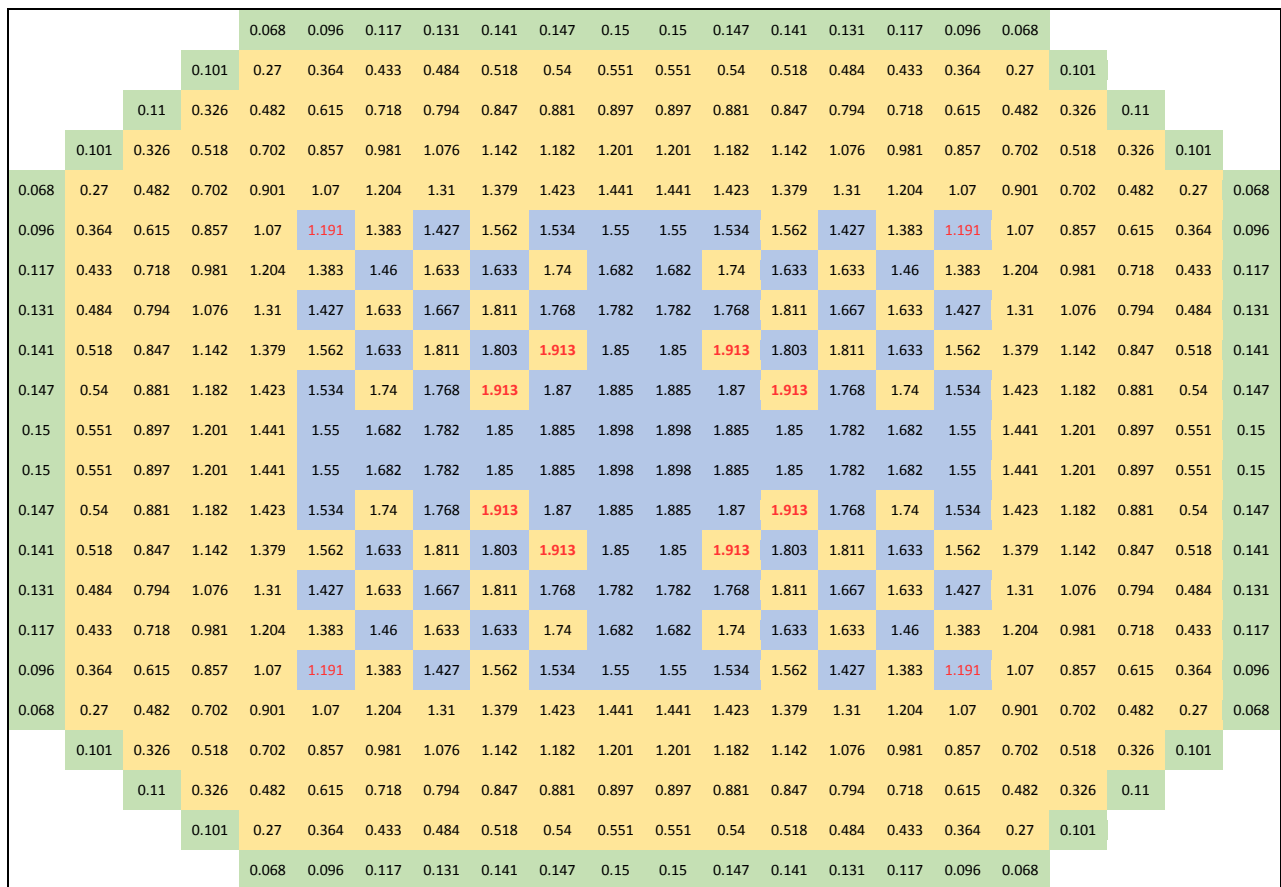
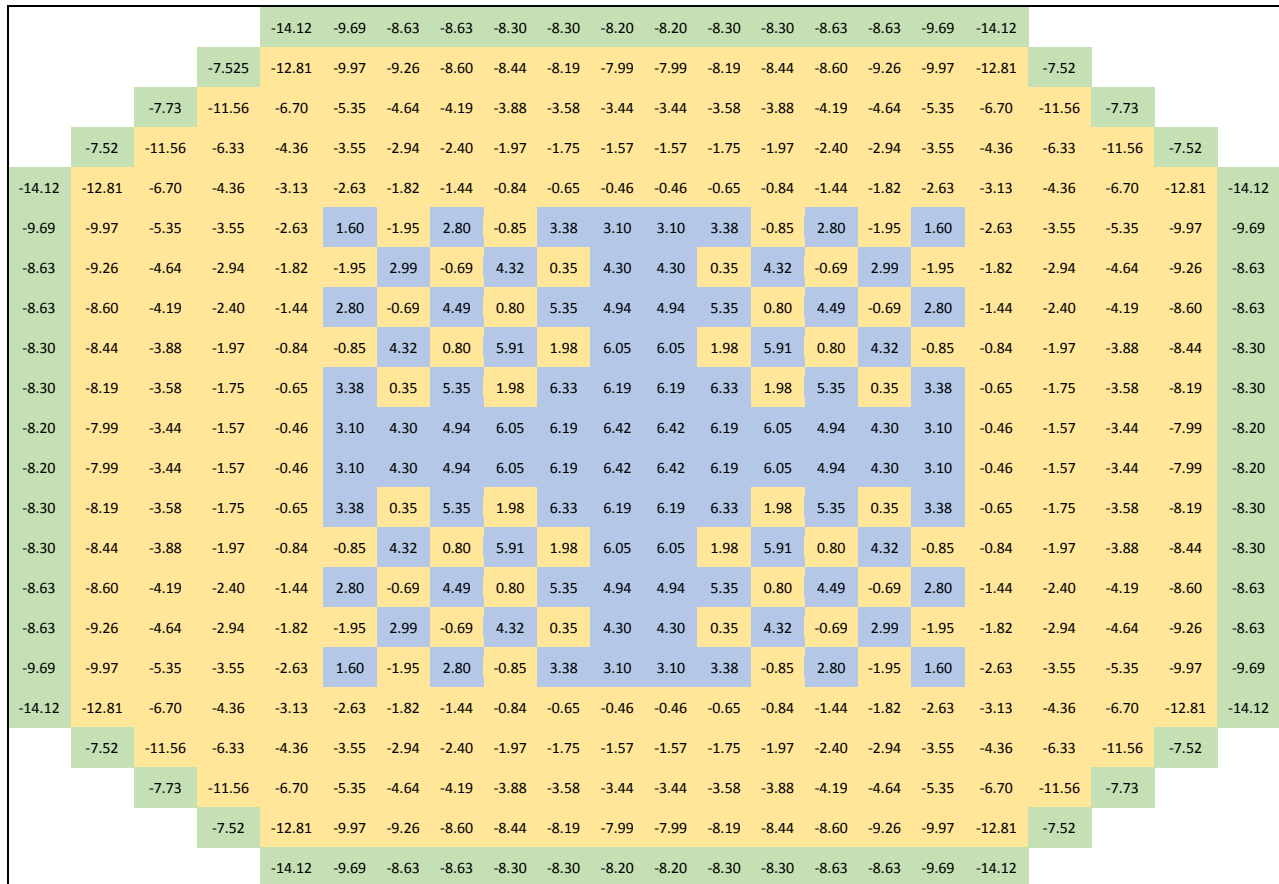


Figura 8. Distribución de potencia axial para el modelo de núcleo completo obtenido con SIMULATE-3.



**Figura 10. Porcentajes de error entre las distribuciones de potencia SIMULATE-3 y AZKIND.
 Promedio = -3.36%, desviación estándar = 1.32.**

En general, los errores por ensamble están por debajo del 7%, con excepción de los que se encuentran hacia la periferia del núcleo, y en particular hacia las esquinas, en donde se ponen de manifiesto varias limitaciones de la aproximación de difusión, como son poder representar adecuadamente el flujo neutrónico en la frontera del núcleo, en donde se presenta un gradiente de flujo importante, una alta anisotropía debida principalmente a las dispersiones del agua que actúa como reflector, y, probablemente, una estimación incorrecta de las condiciones de frontera por parte de AZKIND, y especialmente en las esquinas.

4. CONCLUSIONES

Tomando en cuenta que aún están en desarrollo y que los valores reportados fueron calculados con ordenadas discretas S_2 y S_4 , los resultados presentados en este trabajo muestran un buen comportamiento de los códigos AZTRAN y AZKIND, debido a que los resultados obtenidos en los cálculos de criticidad de los diferentes modelos, así como el comportamiento la distribución de potencia, integrados con diferentes composiciones en el combustible, fueron comparables con los resultados obtenidos y/o reportados con otros códigos.

Se puede comprobar que las soluciones numéricas utilizadas por AZTRAN y AZKIND están bien implementadas al tener valores bajos en las diferencias de resultados obtenidos con respecto al código SERPENT, lo cual también verifica la confiabilidad de éste para la generación de secciones eficaces y que los diferentes modelos fueron correctamente simulados.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el apoyo financiero recibido del proyecto estratégico No. 212602 (AZTLAN Platform) del Fondo Sectorial de Sustentabilidad Energética CONACYT - SENER.

REFERENCIAS

1. “AZTLAN Platform”, www.aztlanplatform.mx (2016).
2. Armando M. Gómez Torres et al, “AZTLAN Platform: Plataforma Mexicana para el Análisis y Diseño de Reactores Nucleares”, *XXV Congreso Anual de la Sociedad Nuclear Mexicana* Boca del Río, Veracruz, México, 2014
3. AZTRAN 1.0, AZTLAN TRANSPORT NEUTRONIC CODE, Manual de usuario, 2015.
4. AZKIND 1.0, AZTLAN KINETICS IN NEUTRON DIFFUSION, Manual de usuario, 2015.
5. Dave Knott, Bengt H. Forssén, Malte Edenius. CASMO-4 A Fuel Assembly Burnup Program Methodology, STUDSVIK/SOA-95/2. Rev. 0, (Sept 1995).
6. R. J. J. Stammers, HELIOS Methods, Studsvik Scandpower, (2002).
7. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. X-5 Monte Carlo Team. Los Alamos National Laboratory. (2003).
8. “SERPENT, a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics _Burnup Calculation Code”, <http://montecarlo.vtt.fi> (2016).
9. SIMULATE-3, Advanced Three-Dimensional Two-Group Reactor Analysis Code, STUDSVIK/SOA-95/18.