

Usuarios de Códigos Neutrónicos para Cálculos de Reactores Nucleares: Capacidades de cálculo

F. Álvarez-Velarde
Unidad de Innovación Nuclear - CIEMAT

francisco.alvarez@ciemat.es

14 de septiembre de 2021

ÍNDICE

- EVOLCODE
- TR_EVOL
- GEANT4
- COUNTHER
- SUMMON
- DAWN

EVOLCODE: Teoría

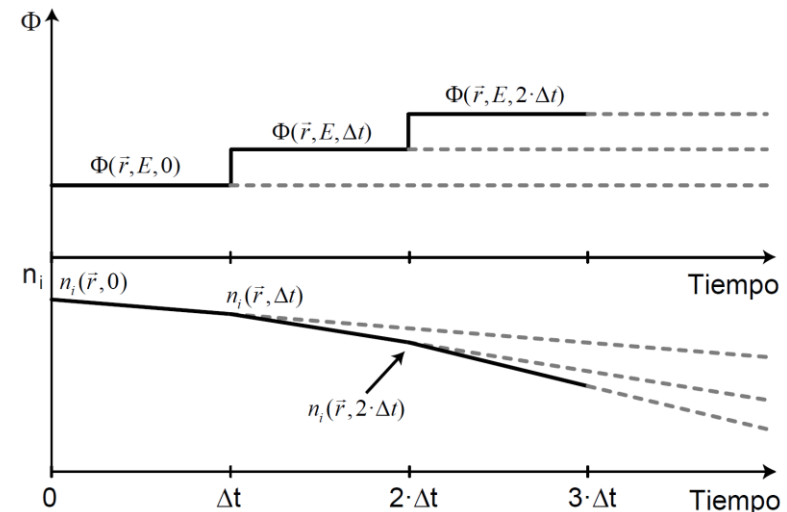
- Desarrollado para hacer frente al problema del quemado.
- Acoplamiento del sistema integro-diferencial de ecuaciones no lineales.
- Se busca la versatilidad, para dar respuesta a problemas variados.
- Alta precisión en tiempo de computación moderado.

Ecuación de Boltzmann o de transporte neutrónico

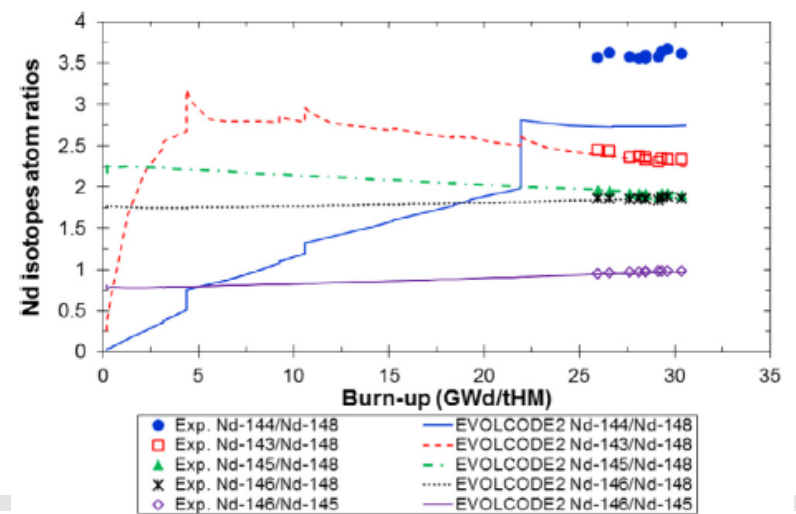
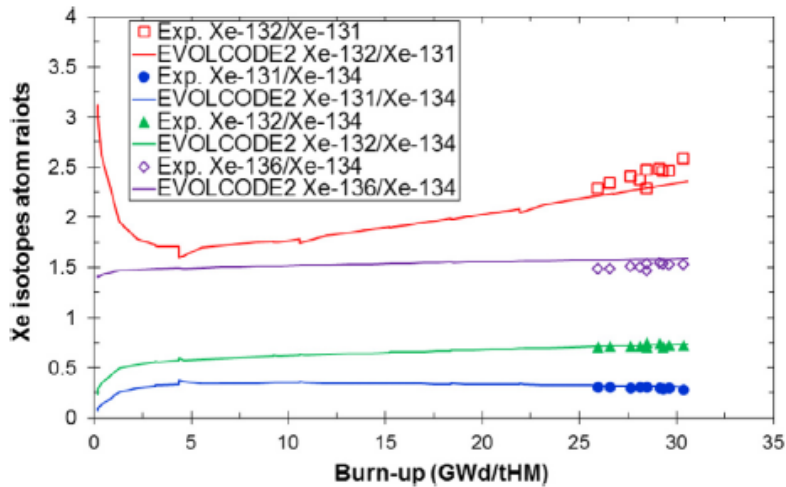
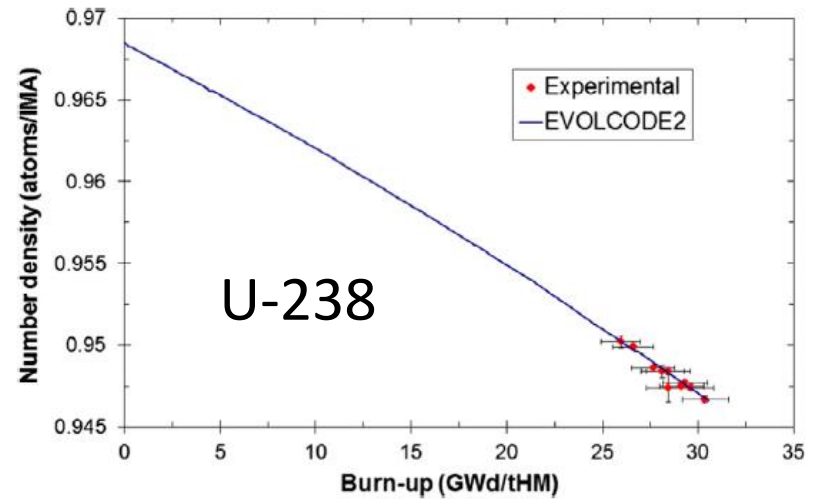
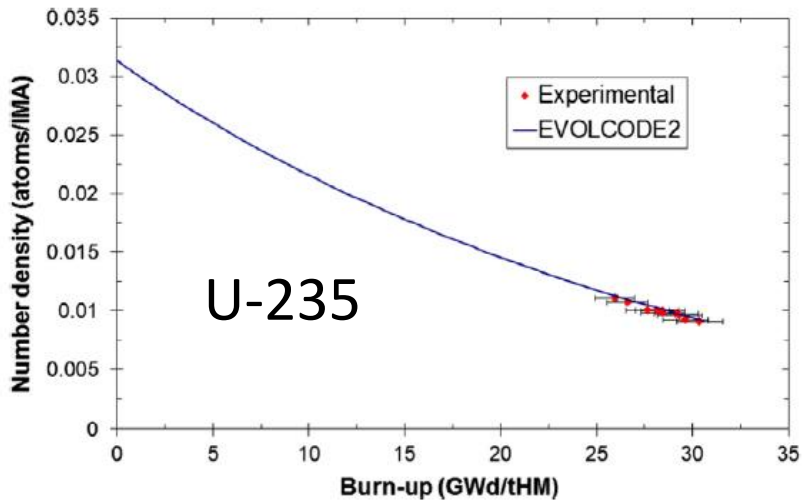
$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, E, t) = S(\vec{r}, E, t) - \Sigma_T(\vec{r}, E, t) \Phi(\vec{r}, E, t) + \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E', t') f(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\vec{r}, E', t) dE' + \int_0^\infty s(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t') v(E', t) \Phi(\vec{r}, E', t) dE'$$

Ecuaciones de Bateman o de evolución isotópica

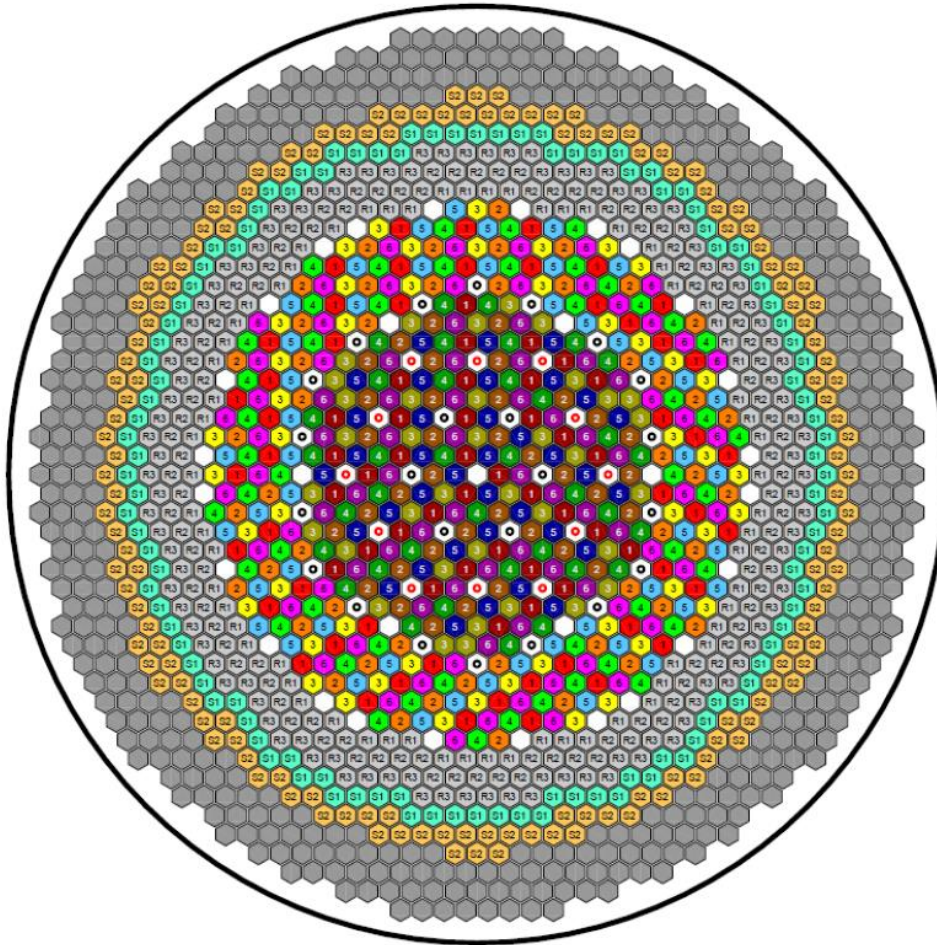
$$\frac{dn_i(\vec{r}, t)}{dt} = \left[\sum_{j \neq i} n_j(\vec{r}, t) \left(\lambda_{ji} + \int \sigma_{ji}(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \right) \right] - \left[n_i(\vec{r}, t) \left(\lambda_i + \int \sigma_{abs}(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \right) \right], \text{ con } i = 1, M \text{ isótopos.}$$



EVOLCODE: Validación con ICE

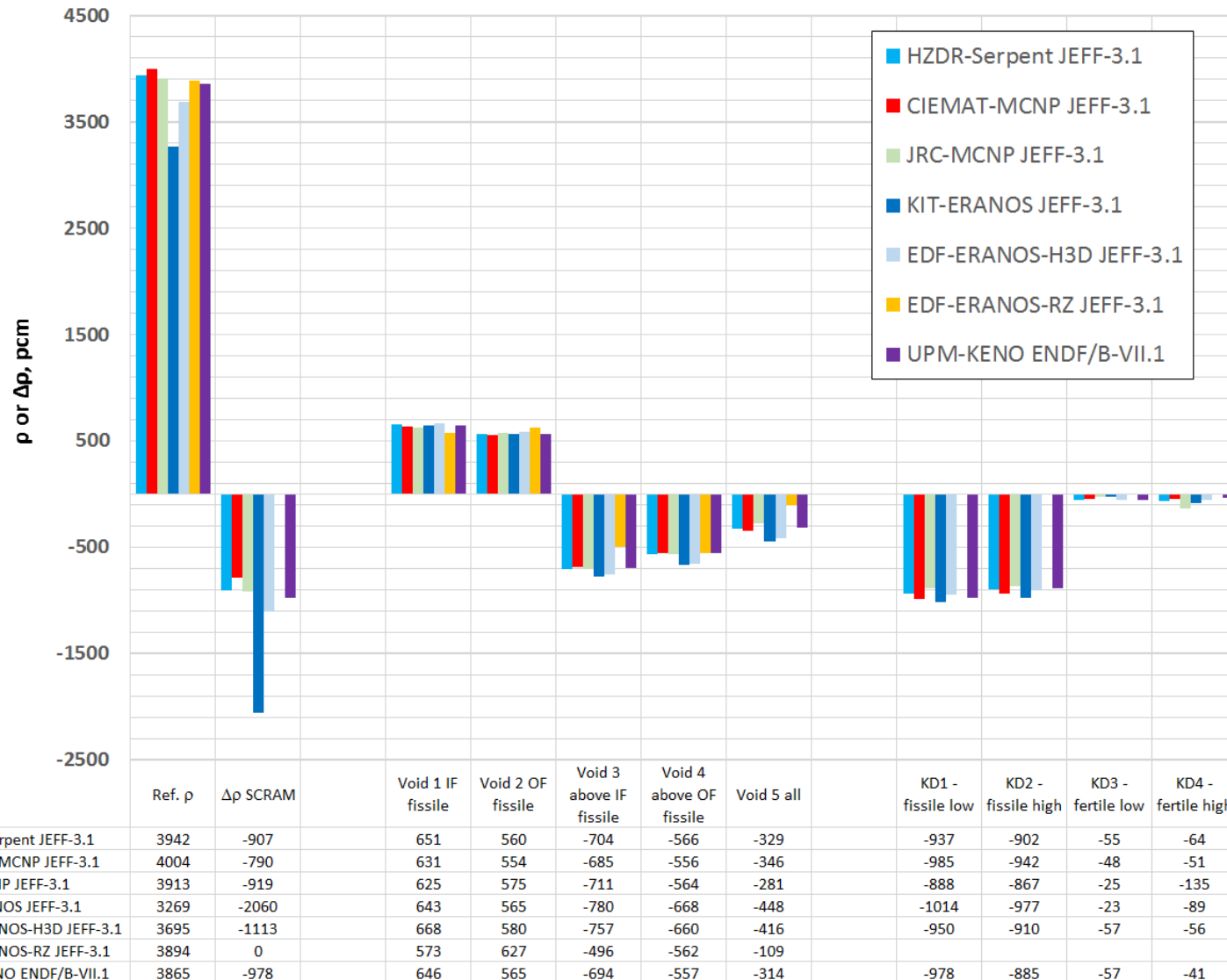


Diseño final de ESFR-SMART refrigerado por sodio

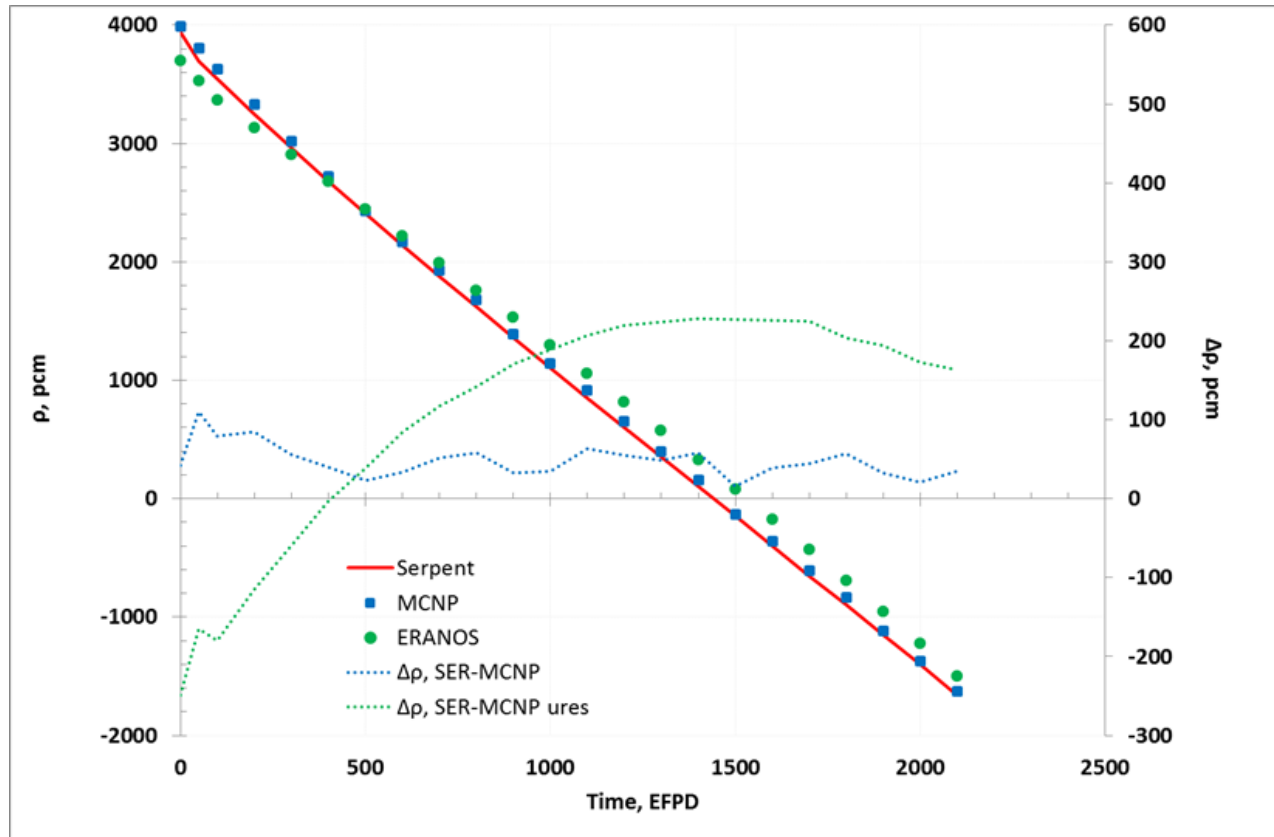


	Núcleo interno
	Núcleo externo
	CSD / DSD
	1 st / 2 nd / 3 rd anillos de reflector
	Combustible gastado
	Combustible gastado
	Tubos de descarga del corium

Benchmark a inicio de vida



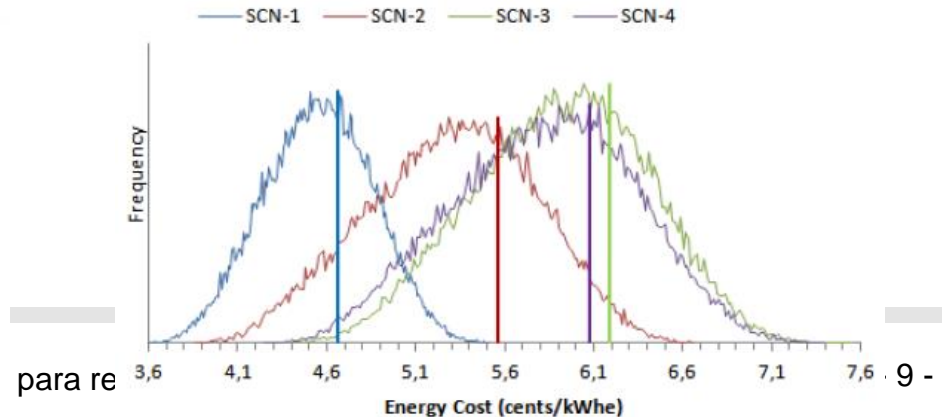
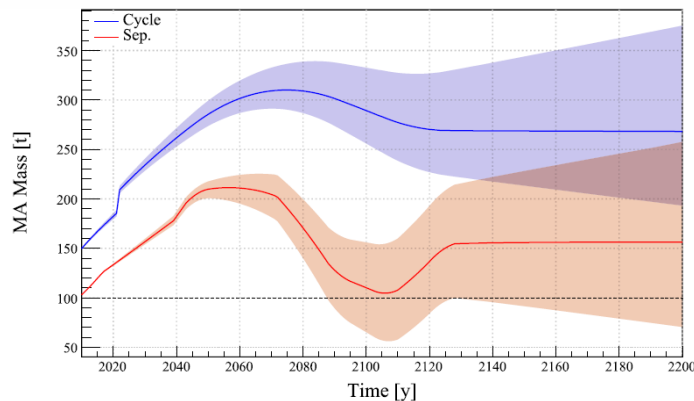
EVOLCODE: *Benchmark* de quemado



- Buen acuerdo entre herramientas de Monte Carlo.
- Diferencias significativas entre algunos códigos.

Nuevos sistemas: TR_EVOL

- Código TR_EVOL de ciclos de combustible nuclear
- Escrito en ANSI FORTRAN 95.
- 6675 líneas de código (no blancas), 18032 líneas incluyendo ORIGEN.
- Validado con datos experimentales (escenario España) y verificado en *benchmarks*.
- Principales características:
 - Versatilidad
 - Propagación de incertidumbres
 - Costes
 - Equivalencia ^{239}Pu
- Empleado en los proyectos:
 - CP-ESFR
 - ENRESA
 - Grupo de Expertos de la AEN (WPFC/AFCS)
 - INPRO-SYNERGIES
 - ARCAS



para re

9 -

Geant4

Geant4 es una herramienta de simulación Monte Carlo para partículas elementales que atraviesan e interaccionan con la material.

Web: <http://geant4.web.cern.ch/> (código, guías de usuarios, publicaciones ...)

Dominios de usuarios:

High energy physics

Nuclear physics

Space engineering

Medical applications

Material science

Radiation protection

Security

...

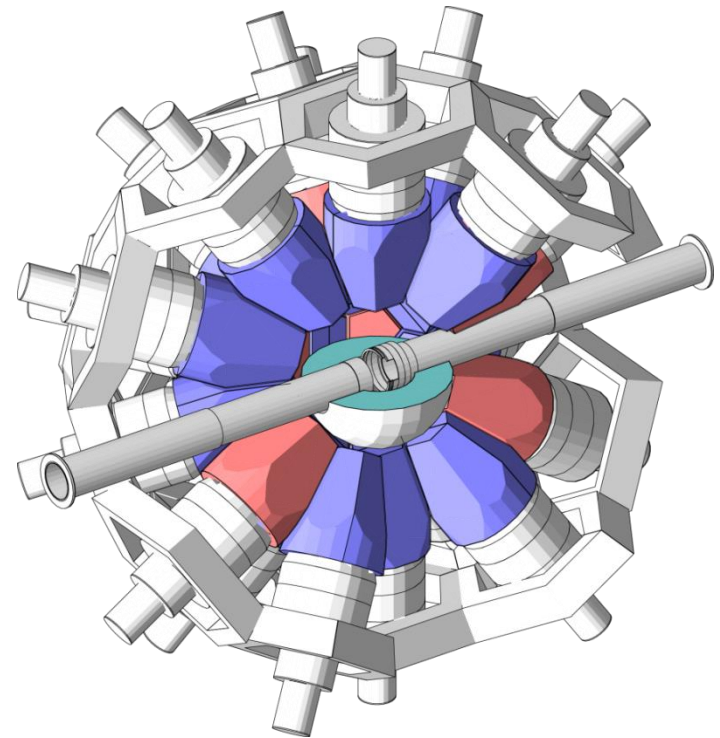
[S. Agostinelli et al., NIMA 506, 250 \(2003\)](#) → **17540 citas** (Sep-2021)

Características

Escrito en C++

- Toolkit → Código C++ ha de ser escrito para construir una aplicación
- Gran flexibilidad (geometría, resultados ...)

Paquete geométrico muy potente:



[C. Guerrero et al., NIMA 671, 108 \(2012\)](#)

Geant4 en UIN

Principalmente usado para simular detectores, para medidas de física nuclear:

- n_TOF TAC
- Detectores C_6D_6 en n_TOF
- MONSTER
- BELEN
- Otros detectores de rayos gamma y neutrones: LaBr₃, LaCl₃, CLYC ...

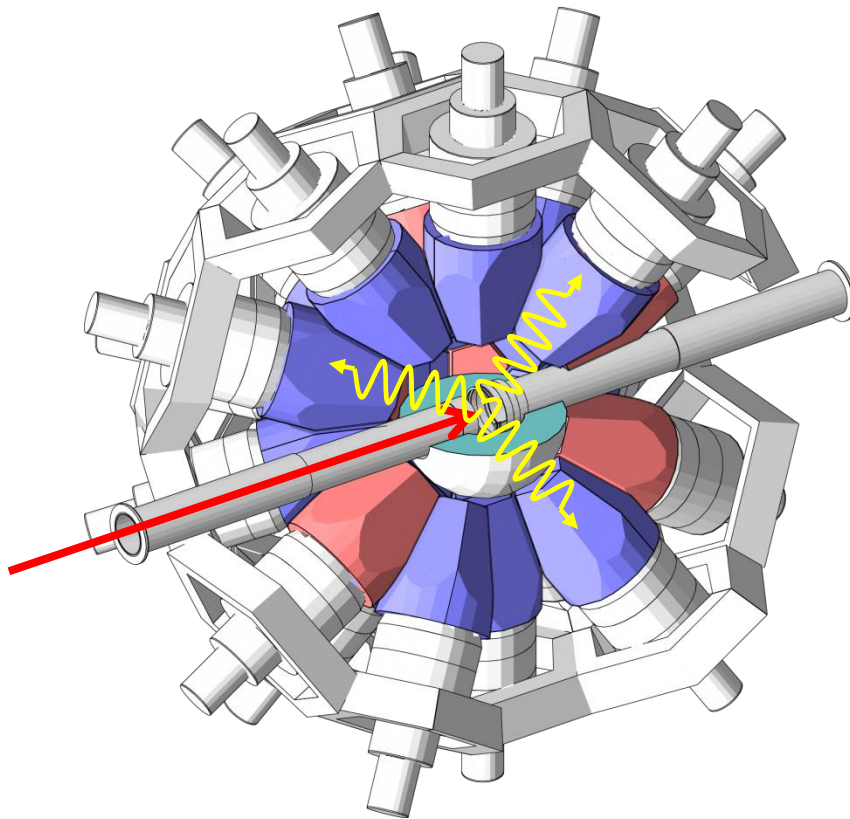
También usamos Geant4 para:

- Calcular la producción de neutrones por reacciones (α,n) (<http://win.ciemat.es/SaG4n/>)
- Modelar la emisión de partículas en combustible gastado debido a su desintegración radiactiva

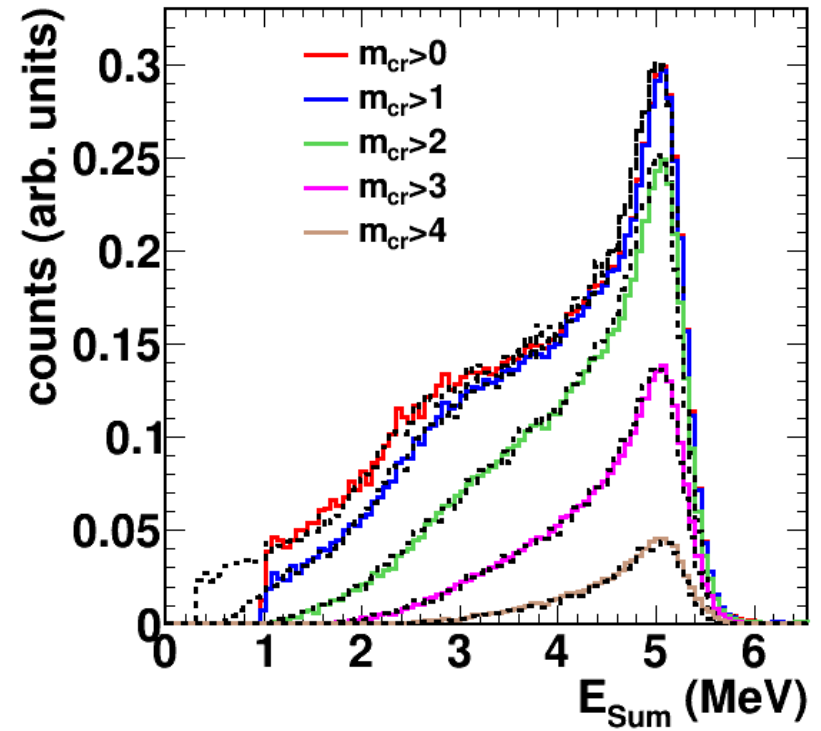
Geant4 en UIN

Principalmente usado para simular detectores, para medidas de física nuclear

n_TOF TAC



Total E_{dep}

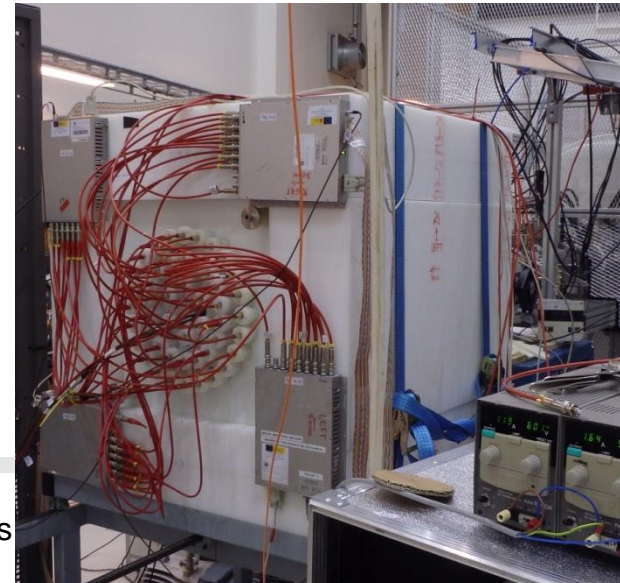
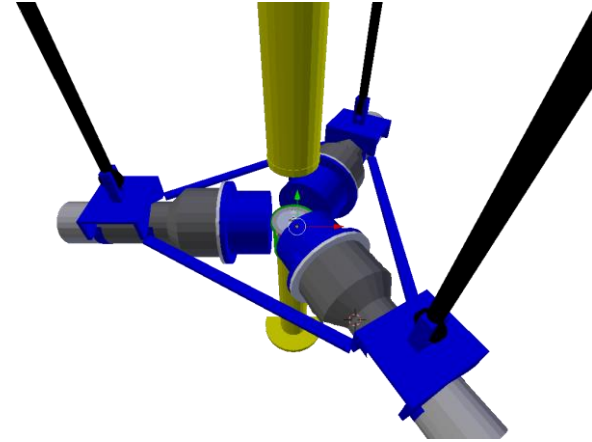


$^{240}\text{Pu}(n,\gamma)$

Geant4 en UIN

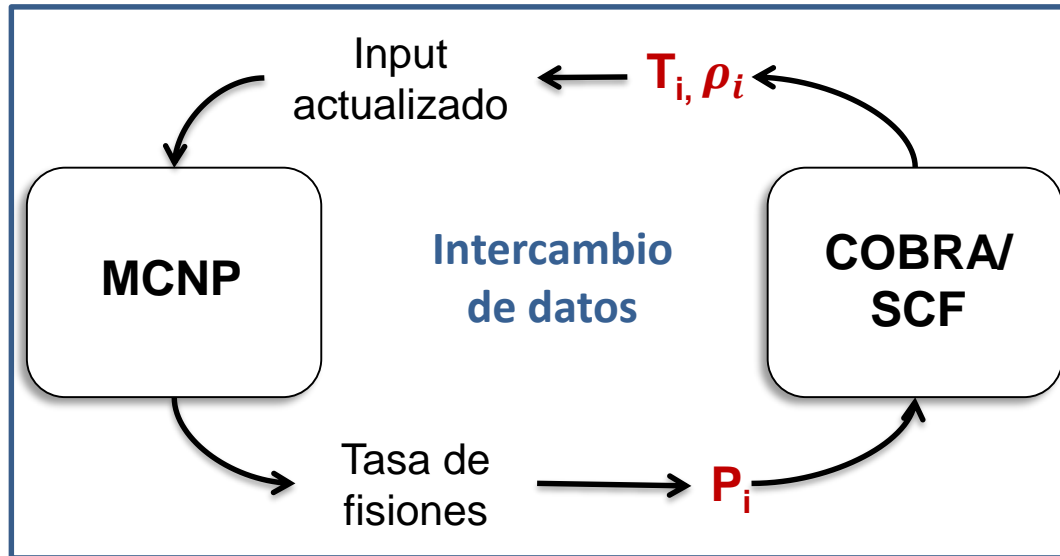
Principalmente usado para simular detectores, para medidas de física nuclear

- Detectores C_6D_6 en n_TOF
- MONSTER
- BELEN

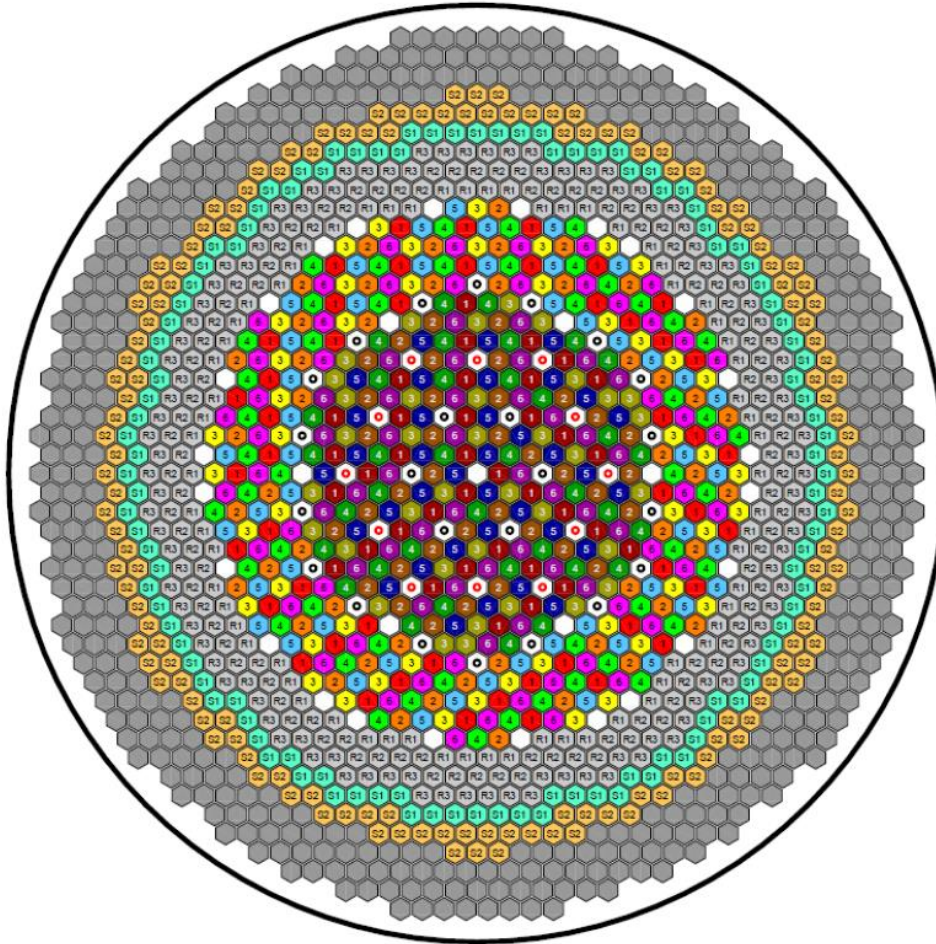


COUNTHER

- Sistema COUNTHER de acoplamiento neutrónico/termo-hidráulico:
 - La termo-hidráulica realimenta a la neutrónica con **mapas de temperaturas**.
 - La neutrónica realimenta a la termo-hidráulica con la **reactividad** y la **potencia**.
 - 100% implementado: **MCNP/PK+COBRA/SCF**.
 - Estacionario y transitorio: Realización de verificaciones para detección de errores y programación de mejoras.



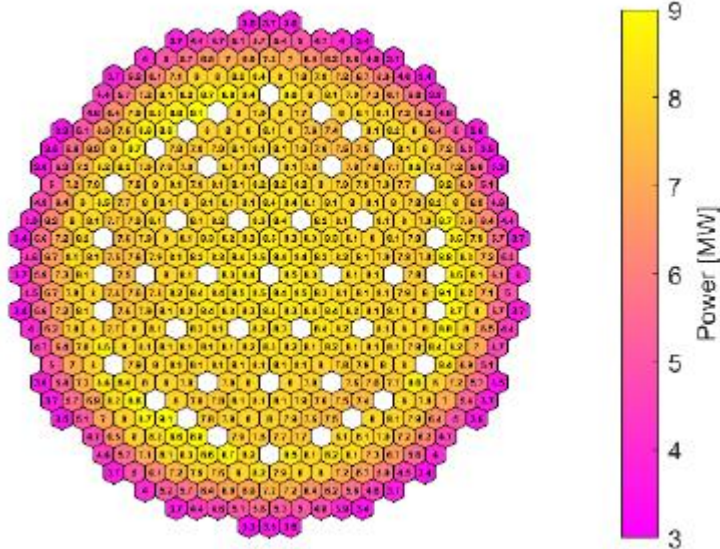
Diseño final de ESFR-SMART refrigerado por sodio



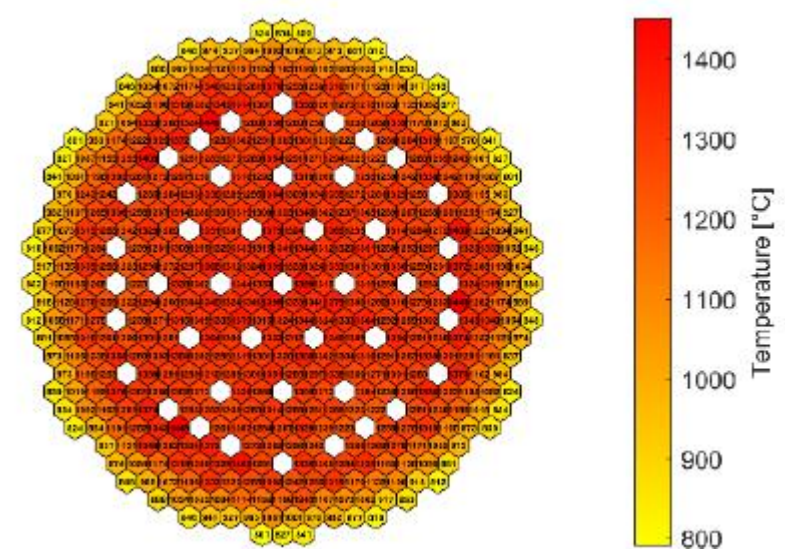
	Núcleo interno
	Núcleo externo
	CSD / DSD
	1 st / 2 nd / 3 rd anillos de reflector
	Combustible gastado
	Combustible gastado
	Tubos de descarga del corium

Uso de COUNTER en ESFR-SMART

Mapa de potencia

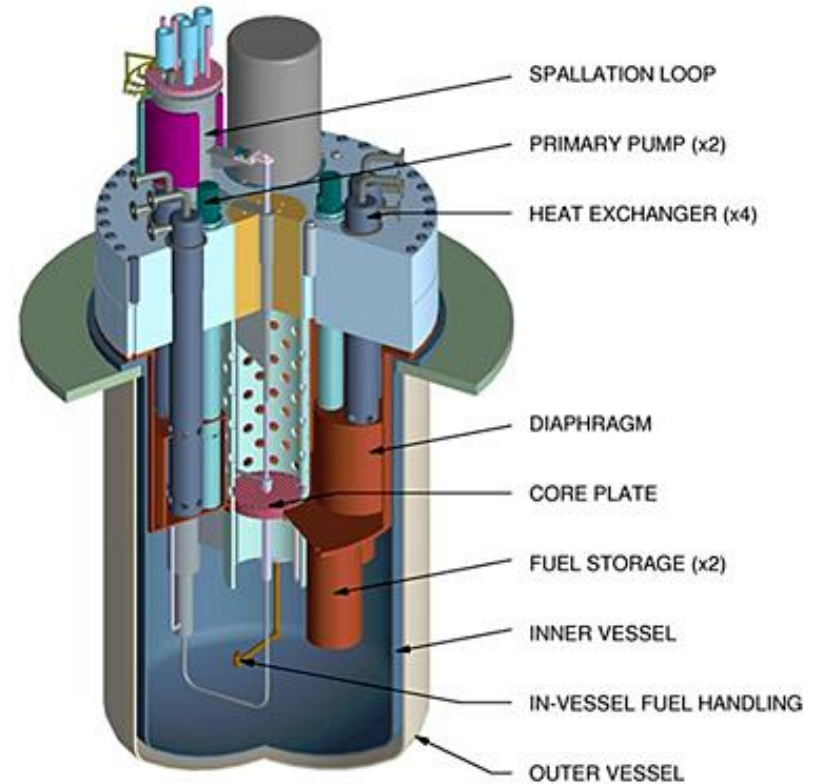


Mapa de temperatura



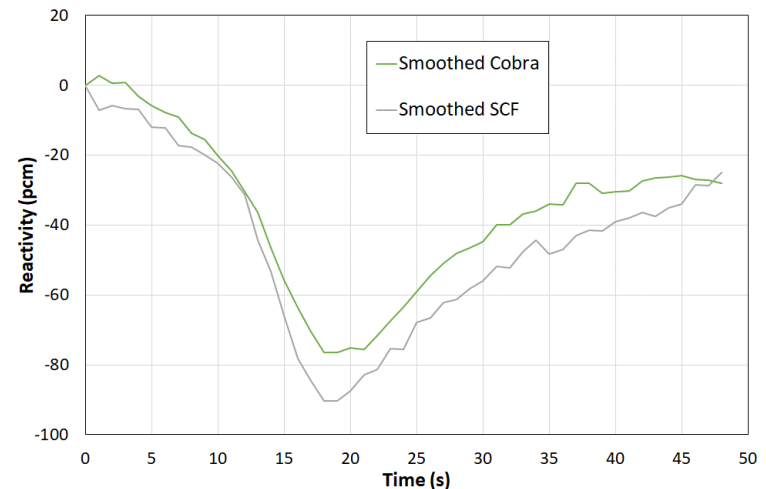
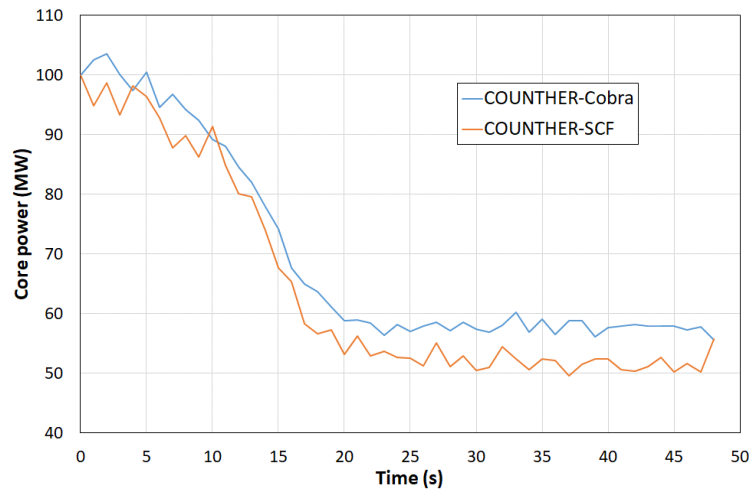
MYRRHA: Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications

- El objetivo principal es avanzar en el diseño de **MYRRHA**, con especial atención en la fase de construcción y licenciamiento.
- Operación en modo **crítico** y **subcrítico**.



Transitorios con COUNTER

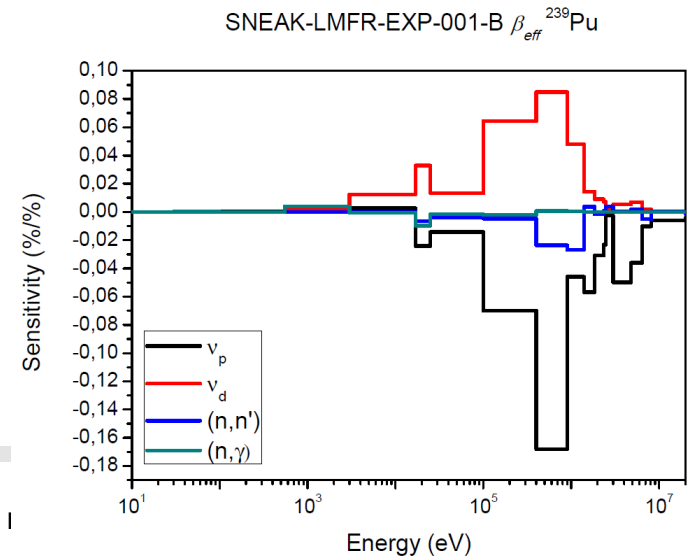
- Verificación de transitorios de MYRRHA:
 - Inserción de reactividad
 - Pérdida de carga



- Implementación de nuevos transitorios (asimétricos: fallo de una bomba, bloqueo de uno/varios canales).

SUMMON

- Continuo desarrollo, validación y verificación de **SUMMON** (*Sensitivity and Uncertainty Methodology for MONte carlo codes*).
- Validación con experimentos integrales y verificación códigos de S/U (SUSD3D, SERPENT y SANDY).
- **Capacidades** implementadas:
 - Análisis S/U k_{eff}
 - Análisis S/U parámetros respuesta (Doppler, vaciado...)
 - Análisis S/U β_{eff} empleando el método de Chiba
 - Análisis S/U Λ_{eff}
- **Desarrollos futuros:**
 - **Acoplamiento con COUNTER**



SUMMON: Aplicación a MYRRHA

- Propagación de incertidumbre debida a los datos nucleares en la k_{eff}
- Se obtienen la incertidumbre y las reacciones contribuyentes

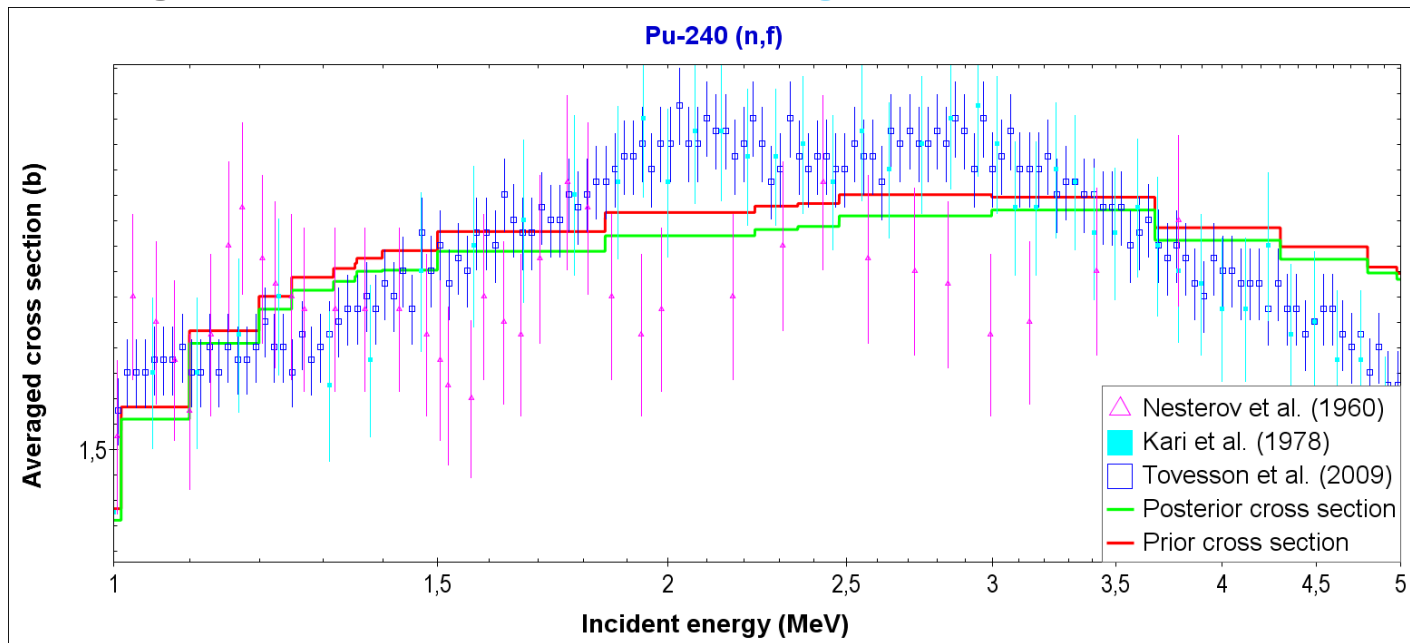
P. Romojaro et al. On the importance of target accuracy assessments and data assimilation for the co-development of nuclear data and fast reactors: MYRRHA and ESFR. Annals of Nuclear Energy 161 (2021) 108416

Table 3
 k_{eff} nuclear data uncertainty quantification for MYRRHA with JEFF-3.3 and ENDF/B-VIII.0 libraries.

MYRRHA					ENDF/B-VIII.0				
JEFF-3.3					ENDF/B-VIII.0				
Quantity				$\Delta k_{eff}/k_{eff}$ (%)	Quantity				$\Delta k_{eff}/k_{eff}$ (%)
^{240}Pu	(n,f)	^{240}Pu	(n,f)	$0.543 \pm 7.3 \cdot 10^{-7}$	^{239}Pu	(n,f)	^{239}Pu	(n,f)	$0.550 \pm 5.4 \cdot 10^{-7}$
^{240}Pu	(n,f)	^{240}Pu	(n, γ)	$-0.420 \pm 1.4 \cdot 10^{-7}$	^{239}Pu	(n, γ)	^{239}Pu	(n, γ)	$0.227 \pm 1.2 \cdot 10^{-7}$
^{239}Pu	vp	^{239}Pu	vp	$0.321 \pm 1.1 \cdot 10^{-7}$	^{209}Bi	(n,n)	^{209}Bi	(n,n)	$0.222 \pm 3.3 \cdot 10^{-6}$
^{239}Pu	(n,f)	^{239}Pu	(n,f)	$0.295 \pm 2.6 \cdot 10^{-7}$	^{239}Pu	vp	^{239}Pu	vp	$0.187 \pm 4.0 \cdot 10^{-8}$
^{239}Pu	χ	^{239}Pu	χ	$0.261 \pm 2.0 \cdot 10^{-6}$	^{238}U	(n, γ)	^{238}U	(n, γ)	$0.139 \pm 2.7 \cdot 10^{-8}$
^{240}Pu	(n, γ)	^{240}Pu	(n, γ)	$0.197 \pm 2.3 \cdot 10^{-8}$	^{239}Pu	χ	^{239}Pu	χ	$0.128 \pm 3.5 \cdot 10^{-7}$
^{239}Pu	(n,f)	^{239}Pu	(n, γ)	$0.174 \pm 4.3 \cdot 10^{-8}$	^{238}U	(n,n')	^{238}U	(n,f)	$-0.095 \pm 2.6 \cdot 10^{-7}$
^{238}U	(n, γ)	^{238}U	(n, γ)	$0.167 \pm 3.6 \cdot 10^{-8}$	^{240}Pu	(n, γ)	^{240}Pu	(n, γ)	$0.091 \pm 6.2 \cdot 10^{-9}$
^{239}Pu	(n, γ)	^{239}Pu	(n, γ)	$0.151 \pm 6.7 \cdot 10^{-8}$	^{238}U	vp	^{238}U	vp	$0.087 \pm 4.3 \cdot 10^{-8}$
^{238}U	(n,n')	^{238}U	(n,f)	$-0.138 \pm 5.6 \cdot 10^{-7}$	^{238}U	(n,n')	^{238}U	(n, γ)	$0.081 \pm 1.5 \cdot 10^{-7}$
Total uncertainty in k_{eff}				$0.772 \pm 3.7 \cdot 10^{-6}$	Total uncertainty in k_{eff}				$0.771 \pm 3.9 \cdot 10^{-6}$

DAWN

- Desarrollo del módulo **DAWN** (*Data Assimilation With summoN*).
- **Objetivo:** producir datos nucleares ajustados capaces de predecir los parámetros del reactor dentro de sus márgenes de diseño y de seguridad, siendo consistentes con los datos experimentales.
- **Metodología:** **GLS** + **Experimentos integrales** bases de datos públicas.



Verificación DAWN

- GODIVA:** esfera de ^{235}U (94 wt.% sin reflector)

	Incertidumbre total en k_{eff} (%)	
	DAWN JEFF-3.3	MC Bayesiano* TENDL-2014
PRIOR	1.357	1.125
POST	0.108	0.100

*Resultados proporcionados por O. Cabellos UPM

Incertidumbre en k_{eff} (%)					
Isótopo 1	Reacción 1	Isótopo 2	Reacción 2	PRIOR	POSTERIOR
^{235}U	(n,n')	^{235}U	(n,n')	0.699	0.536
^{235}U	(n,n')	^{235}U	(n,f)	0.697	0.127
^{235}U	(n,f)	^{235}U	(n,f)	0.657	0.396
^{235}U	ν_p	^{235}U	ν_p	0.508	0.471
^{235}U	(n,n')	^{235}U	(n, γ)	-0.424	-0.526
^{235}U	(n,f)	^{235}U	ν_p	-	-0.446

Xula

Xula es la máquina de supercomputación del CIEMAT:

- 88 nodos de proceso Intel Gold 6148 (1,760 núcleos)
- 112 nodos de proceso Intel Gold 6254 (2,016 núcleos)
- Memoria RAM DDR4 de ~19.2 TB
- Interconectado mediante InfiniBand HDR100
- Totalmente dedicado a la ejecución de trabajos
- 440 TB de almacenamiento (~352 RAID6)
- Rpeak~335.2 Tflops

Conclusiones

- Diversas capacidades de cálculo para simulación de reactores nucleares.
- Se investigan problemas relacionados con:
 - Neutrónica
 - Quemado
 - Termohidráulica
 - Ciclos de combustible
 - Detectores
 - Propagación de incertidumbres
 - Datos nucleares
 - Ajuste de datos

Gracias por su atención