



Universidad Europea

UNIVERSIDAD EUROPEA DE MADRID

ESCUELA DE ARQUITECTURA, INGENIERÍA Y DISEÑO

GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

SISTEMAS SUBCRÍTICOS

VIOLETA GARCÍA GARRIDO

Dirigido por

LUIS PODEROSO LABRADOR

CURSO 2024-2025

TÍTULO: SISTEMAS SUBCRÍTICOS

AUTOR: VIOLETA GARCÍA GARRIDO

TITULACIÓN: GRADO EN FÍSICA

DIRECTOR/ES DEL PROYECTO: LUIS PODEROSO LABRADOR

FECHA: JUNIO de 2025

RESUMEN

El tratamiento de residuos radiactivos de alta actividad, sobre todo aquellos que contienen actínidos menores, consiste en uno de los mayores retos tecnológicos y medioambientales que enfrenta la energía nuclear. Este Trabajo de Fin de Grado estudia el potencial de los sistemas subcríticos impulsados por aceleradores de partículas (ADS, por sus siglas en inglés) como solución a esta problemática mediante la transmutación de residuos. Para ello, se realiza un análisis comparativo de diferentes combustibles que contienen actínidos menores, simulando su comportamiento neutrónico en un entorno teórico utilizando OpenMC, una plataforma basada en los métodos Monte Carlo.

El proyecto se enmarca en una línea de investigación académica enfocada en el estudio de tecnologías nucleares más seguras y sostenibles. Se modela una geometría simplificada con fuente externa, y se evalúan parámetros clave para la naturaleza subcrítica del reactor.

Los resultados muestran que la composición del combustible y su matriz de soporte influyen significativamente en el rendimiento del sistema. Los combustibles sin materiales fértiles presentan mejor capacidad transmutadora, mientras que aquellos con uranio maximizan la fisión. Se concluye que los sistemas ADS conforman una vía prometedora para la reducción de la toxicidad a largo plazo causada por combustible nuclear residual, permitiendo el avance hacia una gestión más responsable y ecológica de estos.

Palabras clave: transmutación nuclear, actínidos menores, sistemas subcríticos, OpenMC, energía nuclear, simulación Monte Carlo

ABSTRACT

The treatment of high-level radioactive waste, especially that containing minor actinides, represents one of the greatest technological and environmental challenges faced by nuclear energy. This Bachelor's Thesis explores the potential of Accelerator-Driven Systems (ADS) as a solution to this issue through the transmutation of waste. To this end, a comparative analysis of different fuels containing minor actinides is carried out, simulating their neutronic behavior in a theoretical environment using OpenMC, a Monte Carlo-based simulation platform.

The project is framed within an academic research line focused on studying safer and more sustainable nuclear technologies. A simplified geometry with an external source is modeled, and key parameters related to the subcritical nature of the reactor are evaluated.

The results show that the composition of the fuel and its supporting matrix significantly influence the system's performance. Fuels without fertile materials exhibit better transmutation capabilities, while those containing uranium maximize fission. It is concluded that ADS systems constitute a promising pathway for reducing the long-term toxicity caused by spent nuclear fuel, enabling progress toward a more responsible and environmentally friendly management of such waste.

Keywords: nuclear transmutation, minor actinides, subcritical systems, OpenMC, nuclear energy, Monte Carlo simulation

*A Max, por acompañarme todas esas largas noches
en las que la física se me hacía un poco más
complicada que de costumbre.*

TABLA RESUMEN

	DATOS
Nombre y apellidos:	VIOLETA GARCÍA GARRIDO
Título del proyecto:	SISTEMAS SUBCRÍTICOS
Directores del proyecto:	LUIS PODEROSO LABRADOR
El proyecto se ha realizado en colaboración de una empresa o a petición de una empresa:	NO
El proyecto ha implementado un producto: (esta entrada se puede marcar junto a la siguiente)	NO
El proyecto ha consistido en el desarrollo de una investigación o innovación: (esta entrada se puede marcar junto a la anterior)	SI
Objetivo general del proyecto:	Comparación de combustibles nucleares en un reactor ADS

Índice

RESUMEN	3
ABSTRACT	4
TABLA RESUMEN	6
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN.....	11
1.1. Estado del Arte	11
1.2. Contexto y Justificación.....	13
1.3. Planteamiento del Problema	14
Capítulo 2. OBJETIVOS.....	15
2.1. Objetivo General	15
2.2. Objetivos Específicos.....	15
Capítulo 3. MARCO TEÓRICO	16
3.1. Fundamentos de la Física Nuclear.....	16
3.2. Principios de Operación de los Reactores Nucleares	16
3.3. ¿Qué es un Accelerator Driven System (ADS)?	20
3.4. Seguridad en los Sistemas ADS	20
3.5. Componentes de un Sistema ADS.....	22
Capítulo 4. METODOLOGÍA	27
4.1. Métodos Monte Carlo en Reactores Nucleares	27
4.2. OpenMC: Acceso Gratuito a los Métodos Monte Carlo.....	27
Capítulo 5. RESULTADOS	31
5.1. Geometría base y condiciones de simulación.....	31
5.2. Composición de combustibles simulados	32
5.3. Resultados Globales	34
Capítulo 6. DISCUSIÓN	41
6.1. Implicaciones para el Diseño de los Sistemas ADS	42
6.2. Limitaciones del Estudio y Propuestas de Mejora	42
Capítulo 7. CONCLUSIONES.....	44
7.1. Conclusiones del trabajo	44

7.2. Conclusiones personales	44
REFERENCIAS.....	45
ANEXO I - Código de simulación en OpenMC.....	50
I.1 Simulación en Modo <i>eigenvalue</i>	50
I.2 Simulación en Modo <i>fixed source</i>	52

Índice de Figuras

Figura 1: Evolución de la radiotoxicidad del combustible nuclear.....	12
Figura 2: Esquema representativo de un sistema ADS refrigerado por (LBE).....	22
Figura 3: Esquema conceptual de un ADS.....	24
Figura 4: Representación esquemática del proceso de espalación	25

Índice de Tablas

Tabla 1: Composición inicial (BOL) y en equilibrio (EQU) del combustible INCAD-I	33
Tabla 2: Distribución isotópica de las fracciones de americio y plutonio	34
Tabla 3: Resultados de absorción, fisión y captura (Combustible A)	35
Tabla 4: Resultados de absorción, fisión y captura (Combustible B)	37
Tabla 5: Resultados de absorción, fisión y captura (Combustible C)	38
Tabla 6: Resultados de absorción, fisión y captura (Combustible D)	39
Tabla 7: Comparativa de parámetros clave obtenidos en la simulación de los cuatro combustibles analizados	41

Capítulo 1. INTRODUCCIÓN

1.1. Estado del Arte

La demanda global de electricidad ha mostrado una tendencia creciente en los últimos años. Según el informe Global Energy Review 2025 de la Agencia Internacional de la Energía (IEA), la demanda internacional de energía eléctrica creció un 4,3% en 2024 (International Energy Agency, 2025). Este incremento puede deberse a numerosos factores, como el aumento en el uso de aires acondicionados debido a diversas olas de calor, la cada vez más popular electrificación del transporte o la expansión de centros de datos y tecnologías de inteligencia artificial.

Como consecuencia de este aumento de la demanda, las políticas energéticas de numerosos países se han visto afectadas. El objetivo principal de estos es conseguir una fuente de energía que cumpla tres requisitos fundamentales: seguridad, sostenibilidad y asequibilidad (Liu et al., 2022). Hoy en día, ninguna de las fuentes energéticas que sean lo suficientemente razonables como para tenerse en cuenta cumple estos tres parámetros. Por ejemplo, las energías fósiles son relativamente seguras y su extracción y posterior procesamiento es relativamente económico. El problema, el cual ya es conocido a nivel mundial, es que los combustibles fósiles son lo opuesto a sostenible (Martins et al., 2021), por lo que su uso comprometería los esfuerzos globales de reducción de los niveles de CO₂. Por otro lado, se tienen las energías renovables, que por definición son sostenibles. A pesar de ello, el uso de estas fuentes energéticas viene acompañado de dos obstáculos infranqueables: su naturaleza intermitente (Cosgrove et al., 2023) y el elevado coste de su producción (Liebensteiner et al., 2025).

Por tanto, parece evidente que la energía nuclear emerja como una alternativa ante la elevada demanda de electricidad de estos últimos años. Su capacidad para suministrar grandes cantidades de electricidad de forma continua, con bajas emisiones de CO₂, la posiciona como un pilar clave en todo el proceso de la transición energética, especialmente cuando las renovables por sí solas aún no son capaces de cubrir toda la demanda de forma estable. Esto pudo comprobarse en 2024, año en el que las energías renovables y la nuclear cubrieron el 80% del incremento en la generación eléctrica global. Por primera vez, estas fuentes representaron el 40% de la generación total de electricidad a nivel mundial (International Energy Agency, 2025).

Actualmente, la mayor parte de los reactores que se encuentran en funcionamiento son de espectro térmico, es decir, se basan en neutrones lentos (IAEA, 2024). Estos reactores producen energía a partir de la fisión de elementos pesados como el uranio o el plutonio, de los cuales hay pocas existencias sobre la superficie terrestre. Debido a ello, el avance hacia otro tipo de reactores, como los de espectro rápido (basados en neutrones rápidos), se presenta como una opción muy prometedora para mejorar la eficiencia energética de los combustibles nucleares. Además, otro de los posibles avances que estos reactores podrían proporcionar se da en uno de los sectores más controversiales que enfrenta la energía nuclear: la gestión de residuos radiactivos de larga vida.

Las reacciones nucleares basadas en uranio producen como residuo unos elementos que generalmente se conocen como elementos transuránicos (TRU). Algunos ejemplos podrían ser el plutonio o los actínidos menores (MA) como el neptunio, americio o curio. Dentro de los TRU, el plutonio puede utilizarse junto al uranio para conformar combustible nuclear MOX (óxido mixto), que es utilizado con frecuencia en reactores térmicos (Nifenecker et al., 2001). El principal problema de los TRU son los MA y su larga vida, que genera problemas a la hora de gestionarlos y almacenarlos. Para poner un ejemplo representativo, el isótopo Am-241 posee una vida media de 432,2 años. Aunque los MA representan apenas el 1% de la masa total de los residuos nucleares, su toxicidad pasados 1000 años es unas 20000 veces superior a la de los productos de fisión (Kapoor, 2002).

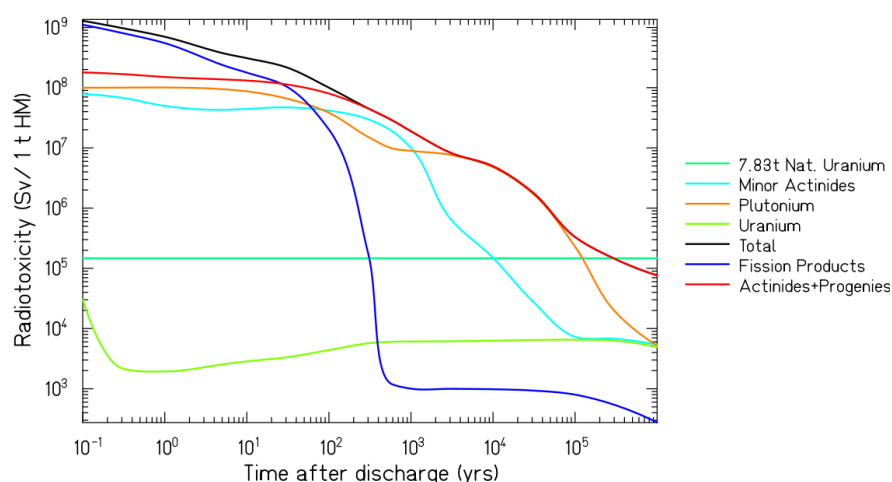


Figura 1: Evolución de la radiotoxicidad del combustible nuclear, desglosada por componentes. Se destaca la contribución de los actínidos menores y el plutonio. Imagen extraída de Junghans et al. (2014).

Los reactores ADS (Accelerator Driven System) surgen como consecuencia de la necesidad de una nueva forma de gestionar los residuos nucleares. Este tipo de reactores operan en lo que se conoce como régimen subcrítico, por lo que no se rigen por los mismos principios de seguridad que el resto de los reactores críticos (reactores que mantienen la reacción en cadena de fisión por sí mismos) han de seguir (Nifenecker et al., 2001; Junghans et al., 2014). Para poder mantener el proceso, se valen de fuentes externas de neutrones que les permiten sostener las reacciones en cadena de fisión sin necesidad de alcanzar la criticidad. A partir de dicha arquitectura, los ADS obtienen ventajas significativas en términos de seguridad nuclear y flexibilidad operativa, ya que solo con detener el haz de protones se detiene por completo la producción de neutrones y, por tanto, la fisión (Hossain et al., 2015).

Gracias a la seguridad aumentada de estos sistemas subcríticos y a la mayor flexibilidad con los requerimientos mencionados, es posible incluir fracciones relevantes de actínidos menores en la composición del combustible que los reactores de tipo ADS utilizan. Esto permite la incineración y transmutación de los MA sin llegar comprometer la seguridad del sistema, lo cual es imprescindible a la hora de reducir el inventario radiotóxico de MAs generado por las reacciones

nucleares previas (Nifenecker et al., 2001). Al transmutar o fisionar actínidos menores conseguimos eliminar su presencia y sustituirla por la de otros elementos cuya vida media es mucho menor y más manejable.

Se ha planteado el uso de los ADS (además de para la incineración de desechos radiactivos como los MA) para otros fines, como lo son la producción de energía o la generación de neutrones de alta intensidad para la investigación (Bowman et al., 1992; Yoshiie et al., 2014). A lo largo de los últimos años, se han realizado varios proyectos experimentales con el fin de confirmar que su implementación técnica es factible. Un ejemplo relativamente destacable es el proyecto MYRRHA del SCK CEN (De Bruyn et al., 2015), un reactor híbrido subcrítico que emplea plomo-bismuto como refrigerante, el cual se conecta a un acelerador de protones de 600MeV y actúa como base para el análisis de la transmutación. De igual manera, son de gran importancia los resultados experimentales ya obtenidos con el uso de YALINA, un sistema subcrítico de baja potencia que opera en modo pulsado con aceleradores de deuterones, que proporcionaron datos esenciales sobre la dinámica y el comportamiento cinético de los ADS (Bécares et al., 2013).

1.2. Contexto y Justificación

El manejo seguro y eficaz los desechos radiactivos de larga duración supone un gran reto para la industria nuclear (OECD & Nuclear Energy Agency, 2020; Kvashnina et al., 2024). En especial, la presencia de actínidos menores (los cuales pueden mantener su radioactividad durante muchos años) dificulta la tarea. Si bien es cierto que algunos países optan por almacenar este tipo de residuos en repositorios geológicos profundos (Blue Ribbon Commission on America's Nuclear Future, 2012), esta solución es considerada inaceptable por muchos otros debido al inconcebible tiempo necesario para que estos materiales se estabilicen. Por ello, la transmutación de residuos de alta actividad (HLW, por las siglas de high-level-waste) se convierte en la opción de mayor interés (Junghans et al., 2014). Este modelo de gestión de residuos nucleares se basa en convertir aquellos isótopos residuales con una larga vida a otros que posean una vida más corta, haciéndolos más manejables.

Dentro de esta problemática, este Trabajo de Fin de Grado se centra en valorar una variedad de composiciones de combustible existentes en la literatura de los sistemas ADS, buscando analizar cómo actúan los neutrones, su potencial de transmutación y su eficiencia práctica. Para conseguirlo, se ha empleado el programa de simulación Monte Carlo OpenMC, una herramienta de código abierto que facilita la creación de modelos sobre el movimiento de neutrones en diversas estructuras y materiales.

La finalidad de este estudio es ofrecer una comparación objetiva y transparente entre diferentes clases de combustibles con gran contenido de actínidos menores, tanto los obtenidos de diseños existentes (como el INCAD-I) (Salvatores et al., 1998) como otros que se han sugerido en estudios recientes (Sobolev et al., 2003). Todo el proyecto se desarrolla dentro de una estructura geométrica estándar, simplificada y teórica, que permite examinar el comportamiento del combustible sin tener que modular o depender de elementos externos que influyan en él.

1.3. Planteamiento del Problema

Existen numerosos estudios sobre el análisis y diseño de combustibles para sistemas ADS, aunque cada uno se ejecuta en condiciones diferentes, lo que dificulta la comparativa directa entre las diferentes opciones disponibles. Por lo general, las diferencias en la forma, los materiales que moderan la reacción o los tipos de neutrones dificultan la visualización de cómo la composición de los isótopos afecta a valores como la eficiencia de la fisión o la capacidad de retención de neutrones del sistema.

Este proyecto nace para solucionar ese problema: ofrecer una comparación de diferentes combustibles de reactores ADS utilizando un modelado sencillo e igual para todos, enfocándose únicamente en las características del combustible. Así, se espera crear una herramienta útil tanto para diseñar sistemas de transmutación como para hacer una evaluación inicial de las mezclas de neutrones con diferentes cantidades de MA, Pu y matrices de soporte.

Capítulo 2. OBJETIVOS

Este Trabajo de Fin de Grado se enmarca en el estudio de sistemas subcríticos avanzados, en específico los Accelerator Driven Systems (ADS, por sus siglas), con el objetivo de estudiar la viabilidad de estos para encargarse de la transmutación de residuos nucleares de alta reactividad. Para ello se realizarán una serie de simulaciones sobre el comportamiento neutrónico en distintos escenarios, variando los combustibles de los que el reactor se nutrirá. Con ello se busca comprender mejor cuál es el papel que las composiciones de dichos combustibles juegan a la hora del rendimiento y la reactividad de estos sistemas.

Para ello, se plantean unos objetivos que marcan el desarrollo del proyecto, desde el análisis teórico hasta la implementación práctica mediante herramientas de simulación de neutrones.

2.1. Objetivo General

El principal objetivo de este proyecto consiste en analizar el comportamiento neutrónico de un sistema subcrítico de tipo ADS mediante simulaciones con OpenMC, evaluando el impacto de distintas formulaciones de combustible nuclear (basadas principalmente en uranio, plutonio y actínidos menores). A partir de esa evaluación, se estudiarán parámetros clave como el factor de multiplicación efectivo (k_{eff}), el flujo neutrónico, la tasa de fisión y la absorción de isótopos específicos. Este análisis se orienta a contribuir al estudio de la gestión avanzada de residuos nucleares mediante su transmutación.

2.2. Objetivos Específicos

- Realizar una revisión bibliográfica sobre los fundamentos físicos de los sistemas subcríticos y, en particular, de los ADS.
- Estudiar el concepto de subcriticidad y la relevancia del parámetro k_{eff} como indicador de comportamiento del sistema.
- Construir y simular modelos ideales de núcleos subcríticos con distintas composiciones de combustible, utilizando el código OpenMC.
- Integrar datos nucleares evaluados (ENDF/B-VII.1) en formato legible y aplicar métodos Monte Carlo para calcular magnitudes clave del sistema.
- Comparar el rendimiento de varias formulaciones de combustible (con y sin materiales fértiles) en términos de criticidad, eficiencia de fisión y capacidad de transmutación.
- Evaluar las implicaciones operativas y de seguridad asociadas al uso de cada tipo de combustible en sistemas ADS.

Capítulo 3. MARCO TEÓRICO

3.1. Fundamentos de la Física Nuclear

La física nuclear es una rama de la física que se encarga del estudio de las propiedades y del funcionamiento de los núcleos atómicos. Un núcleo atómico está constituido por la combinación de protones y neutrones, a los que colectivamente se les conoce como nucleones. Estos se encuentran confinados en el núcleo atómico, interaccionando entre sí a través de fuerzas electrostáticas y gravitatorias. Para evitar que las fuerzas electrostáticas entre protones separen el núcleo, otra fuerza mayor ha de aparecer. Esta se trata de la fuerza (o interacción) nuclear fuerte, una fuerza de corto alcance que mantiene unidos los pares de nucleones (Abdullah, 2014, sec. 1.9.3).

Uno de los aspectos más interesantes de la física nuclear es la estabilidad del núcleo. Todos los elementos tienen una serie de isótopos y cada uno de ellos puede ser (o no) estable. Los núcleos inestables tienden a transformarse en busca de dicha estabilidad a través de procesos como la desintegración radiactiva o las reacciones nucleares inducidas. En el contexto energético, estos procesos presentan una importancia muy destacable, puesto que esa búsqueda de la estabilidad se basa en la liberación de energía, lo cual puede explotarse con fines de generación como lo hacen los procesos de fisión nuclear (Abdullah, 2014, sec. 3.3).

La fisión nuclear es un proceso de transmutación en el cual los núcleos pesados inestables se dividen en núclidos más ligeros, emitiendo neutrones libres en el proceso. Hay dos tipos de reacciones de fisión posibles: fisión espontánea y fisión inducida. Para este caso de estudio, la más relevante sería la segunda, en la cual un núclido fisible (con un número másico elevado) absorbe un neutrón que ha sido enviado a propósito. El núclido resultante, con un neutrón de más, se divide en lo que se conoce como fragmentos de fisión, que serían aquellos núclidos resultantes de menor masa. Los neutrones libres liberados en esta reacción de fisión podrían inducir nuevas fisiones en otros núcleos fisibles, creando una reacción en cadena (Abdullah, 2014, sec. 10.3.1).

Los neutrones, al no poseer carga eléctrica, son muy eficaces en este tipo de reacciones ya que pueden entrar en los núcleos atómicos sin llegar a verse afectados por las fuerzas electromagnéticas que allí se den. Por ello, el estudio de sus propiedades (energía, sección eficaz de interacción) es fundamental para determinar el comportamiento del sistema y para el diseño de cualquier reactor nuclear existente.

3.2. Principios de Operación de los Reactores Nucleares

Si se estudia el comportamiento de los neutrones dentro de un reactor nuclear, se observa que no todos ellos provocan nuevas fisiones: algunos de ellos son absorbidos por materiales no fisibles mientras que otros se fugan del reactor. Esto no es alarmante, puesto que para que la reacción en cadena que sustenta el reactor se mantenga no es necesario que todos los neutrones producidos en procesos de fisión provoquen otras fisiones. En promedio, la mínima condición

necesaria que ha de cumplir cada núcleo para seguir funcionando es que cada neutrón producido provoque al menos la fisión de otro núcleo (U.S. Department of Energy, 1993). Será el factor de multiplicación k quien cuantice esa condición, en función del número de neutrones absorbidos o fugados del reactor.

El factor de multiplicación k también determinará cómo será la nueva generación de neutrones: mayor, menor o igual a la anterior. Es decir, definirá el crecimiento del flujo neutrónico. Cuanto mayor es el reactor, menor es la cantidad de neutrones fugados de este (U.S. Department of Energy, 1993). Por ello, y de forma ideal, se define el factor de multiplicación infinito k_{∞} , que considera las dimensiones del reactor como infinitas para así anular el valor de la fuga neutrónica. El factor de multiplicación infinito k_{∞} viene definido como:

$$k_{\infty} = \frac{\text{neutrones producidos por fisión en una generación}}{\text{neutrones absorbidos en la generación anterior}} \quad (1)$$

Para describir realmente el ciclo neutrónico, es necesario definir un reactor finito que tenga en cuenta la fuga de los neutrones. El factor de multiplicación efectivo k_{eff} , definido como el ratio entre los neutrones producidos en una generación y los perdidos debido a absorciones o fugas, tiene en cuenta los factores asociados a la definición de un espacio no finito y se formula como:

$$k_{\text{eff}} = \frac{\text{neutrones producidos por fisión en una generación}}{\text{neutrones (absorbidos + fugados) en la generación anterior}} \quad (2)$$

Estudiando la expresión anterior, se puede observar de manera sencilla que para que una reacción en cadena se mantenga de forma automática, el valor del factor de multiplicación efectivo debe ser: $k_{\text{eff}} = 1$. Dicho valor asegura que se están perdiendo tantos neutrones como se están generando, luego la población neutrónica se mantiene estable y se alcanza la condición de criticidad en el reactor (U.S. Department of Energy, 1993).

Es interesante el estudio de los otros dos casos posibles: cuando $k_{\text{eff}} < 1$ y cuando $k_{\text{eff}} > 1$. En función de la población de neutrones, se agrupan y definen los tres casos posibles de reactores:

- Crítico ($k_{\text{eff}} = 1$): La población de neutrones permanece constante en el tiempo.
- Subcrítico ($k_{\text{eff}} < 1$): La población de neutrones disminuye progresivamente.
- Supercrítico ($k_{\text{eff}} > 1$): La población de neutrones crece exponencialmente.

Utilizando la que se conoce como la fórmula de los seis factores, se puede determinar el valor de la fracción de neutrones que permanece en el reactor tras cada generación (el factor de multiplicación efectivo). La fórmula en cuestión se expresa como:

$$k_{\text{eff}} = \epsilon \mathcal{L}_f p \mathcal{L}_t f \eta \quad (3)$$

A continuación, y en base al manual *U.S. Department of Energy* (1993), se explica cada término en mayor profundidad.

3.2.1. Factor de Fisión Rápida (ϵ)

Al iniciar una nueva generación, el primer proceso al que se pueden someter los neutrones existentes es a la fisión rápida, provocada por neutrones que se encuentran en el rango de energías rápidas. Este tipo de fisiones aumenta la población de neutrones rápidos en el reactor.

Elementos como el U-238 o el U-235 tienen una sección eficaz de neutrones rápidos muy pequeña, es decir, que sólo una pequeña parte de los neutrones rápidos que los alcancen hará que fisionen. El factor de fisión rápida ϵ se define como:

$$\epsilon = \frac{\text{nº de neutrones rápidos producidos en todas las fisiones}}{\text{nº de neutrones rápidos producidos en las fisiones térmicas}} \quad (4)$$

3.2.2. Probabilidad de escape por Resonancia (p)

Tras el proceso anterior, los neutrones continúan su ciclo en el interior del reactor. Según se van desplazando, es probable que choquen con núcleos atómicos, ya sea con los núcleos combustibles o con aquellos que no lo sean. Con cada colisión pierden energía y velocidad (frenan).

Durante este proceso de frenado existe la posibilidad de que alguno de los neutrones sea capturado al atravesar la región de resonancia de algún elemento. La probabilidad de escape por resonancia p es la probabilidad de que un neutrón no sea absorbido en uno de esos picos de resonancia y se define como:

$$p = \frac{\text{nº de neutrones que alcanzan energías térmicas}}{\text{nº de neutrones rápidos que empiezan a ralentizarse}} \quad (5)$$

3.2.3. Factor de Utilización Térmica (f)

Una vez que los neutrones han sido moderados (es decir, cuando alcanzan energías térmicas), continúan su ciclo en el reactor y pueden ser absorbidos tanto por el combustible como por otros elementos presentes. El factor de utilización térmica f describe qué tan eficazmente los neutrones térmicos son absorbidos por el combustible y se expresa así:

$$f = \frac{\text{nº de neutrones térmicos absorbidos por el combustible}}{\text{nº de neutrones térmicos absorbidos por los materiales del reactor}} \quad (6)$$

3.2.4. Factor de Reproducción (η)

La mayoría de los neutrones que son absorbidos por el combustible provocan fisión, aunque no todos lo hacen. El factor de reproducción (η) se define tal que:

$$\eta = \frac{\text{nº de neutrones rápidos producidos por fisión térmica}}{\text{nº de neutrones térmicos absorbidos por el combustible}}$$

Este factor indica cuántos neutrones rápidos se generan, en promedio, por cada neutrón térmico que es absorbido por el combustible. La tasa de producción de neutrones rápidos debida a la

fisión térmica se puede calcular como el producto de la tasa de reacción de fisión ($\sum_f^u \phi^u$) y el número promedio de neutrones generados por fisión (ν). En los casos en los que el combustible contiene varios materiales fisibles, se debe tener en cuenta a cada uno de ellos por separado para determinar el valor de η .

3.2.5. Probabilidad de No Fuga de Rápida ($\mathcal{L}_f$)

En un reactor tamaño finito, una parte de los neutrones rápidos se escapa de los límites del núcleo antes de comenzar el proceso de moderación. La probabilidad de no fuga de neutrones rápidos ($\mathcal{L}_f$) representa la fracción de neutrones rápidos que permanecen en el núcleo y, por tanto, pueden contribuir al ciclo de reproducción. Se define como:

$$\mathcal{L}_f = \frac{\text{n}^\circ \text{ de neutrones rápidos que no se fugan}}{\text{n}^\circ \text{ de neutrones rápidos que producen todas las fisiones}} \quad (7)$$

3.2.6. Probabilidad de No Fuga de Térmica ($\mathcal{L}_t$)

Los neutrones también pueden escapar de un reactor de tamaño finito después de haber alcanzado energías térmicas. La probabilidad de no fuga térmica ($\mathcal{L}_t$) indica qué fracción de los neutrones térmicos permanece en el núcleo (está disponible para ser absorbida). Se define como:

$$\mathcal{L}_t = \frac{\text{n}^\circ \text{ de neutrones térmicos que no se fugan}}{\text{n}^\circ \text{ de neutrones que alcanzan energías térmicas}} \quad (8)$$

Las probabilidades de no fuga rápida ($\mathcal{L}_f$) y no fuga térmica ($\mathcal{L}_t$) pueden combinarse en un único término que representa la fracción total de neutrones que no se escapan del núcleo del reactor. Este término se conoce como probabilidad total de no fuga y se denota como $\mathcal{L}_T$, siendo:

$$\mathcal{L}_T = \mathcal{L}_f \cdot \mathcal{L}_t \quad (9)$$

En reactores rápidos (como en el caso de los reactores ADS), el ciclo de vida del neutrón difiere al ciclo en reactores térmicos. La principal diferencia radica en que en los reactores rápidos se busca minimizar la moderación (termalización) de los neutrones. Así, la mayoría de las reacciones de fisión que se den en ellos serán causadas por neutrones rápidos.

Debido a ello, varios de los elementos que componen la regla de los seis factores carecen de importancia. La probabilidad de escape por resonancia p , por ejemplo, no es relevante ya que existen muy pocos neutrones en el rango de energías donde la absorción por resonancia lo sea. De igual forma, la probabilidad de no fuga térmica no se tiene en cuenta, ya que el diseño del reactor evita de manera deliberada que los neutrones se moderen hasta energías térmicas.

Como toda la fisión es rápida, el factor de fisión rápida ϵ pierde sentido, ya que su información ya está incluida en el factor de reproducción η . Además, el factor de utilización térmica f se adapta para describir cómo se aprovechan los neutrones rápidos (en vez de los térmicos).

3.3. ¿Qué es un Accelerator Driven System (ADS)?

Un Accelerator Driven System (ADS) es un tipo de reactor nuclear subcrítico que emplea una fuente externa de neutrones, generada por un acelerador de partículas, para mantener su operación. A diferencia de los reactores críticos tradicionales, en los que la reacción en cadena de fisiones puede sostenerse por sí misma ($k_{\text{eff}} = 1$), los ADS están diseñados específicamente para operar en condiciones subcríticas ($k_{\text{eff}} < 1$).

El principio básico de un ADS consta de tres elementos fundamentales:

- Un acelerador de partículas, que produce un haz de protones de alta energía.
- Un blanco de espalación, donde los protones interactúan con núcleos pesados (típicamente plomo o plomo-bismuto (Hill et al., 1999)), liberando neutrones.
- Un núcleo subcrítico, que utiliza los neutrones producidos para sostener reacciones de fisión controladas.

El flujo de neutrones producido a través de la espalación sustituye a la autosuficiencia de la reacción en cadena, permitiendo operar el reactor de forma continua en condiciones subcríticas. Si el acelerador se detiene, la producción de energía se detiene de forma rápida, eliminando el riesgo de posibles accidentes causados por supercriticalidad. Esta arquitectura introduce propiedades únicas en términos de seguridad y funcionalidad, que se analizan a continuación.

3.4. Seguridad en los Sistemas ADS

Los sistemas ADS ofrecen una vía atractiva y diferente a los reactores convencionales para abordar el manejo de desechos nucleares y la transmutación de actínidos. Su seguridad mejorada resalta como un beneficio clave, la cual proviene de su diseño subcrítico.

A diferencia de los reactores críticos, donde el control del sistema depende de factores como el coeficiente de reactividad, los ADS no se basan únicamente en la fisión en cadena autosostenida. Estos requieren una fuente de neutrones externa, creada a partir de un haz de protones de alta energía que impacta contra un blanco de metal pesado. El hecho de que la potencia del reactor y la reactividad del núcleo sean independientes entre sí permite la detención rápida y segura del sistema, si así se necesita: al cortar el haz de protones se elimina la fuente de neutrones y se frena la reacción.

Esta mejora se evidencia al observar los resultados que exponen Rief y Takahashi (1995). En ellos, se puede ver cómo cambia la fuerza en un reactor crítico y un sistema ADS al recibir un aumento repentino de actividad. Según sus observaciones, un reactor crítico puede alcanzar potencias transitorias de hasta 700GW en cuestión de milésimas de segundo. En cambio, un sistema ADS, aun recibiendo una inserción de reactividad de 2\$, se mantiene bajo los 2GW.

El comportamiento inherentemente seguro de los sistemas ADS se ve reforzado en el análisis comparativo realizado por Luo et al. (2021), que examina simulaciones acopladas neutrónicas y

termohidráulicas de un ADS refrigerado por plomo-bismuto eutéctico (LBE) y un reactor crítico tradicional (CNES). Para ello, se consideran tres clases de accidentes: inserción de reactividad (RIA), pérdida de flujo (LOFA) y pérdida del sumidero térmico (LOHS). El ADS demuestra una reacción mucho más moderada frente a la inserción de reactividad, pudiendo detenerse el sistema con solo desactivar el acelerador. Sin embargo, en accidentes térmicos como LOFA y LOHS, el reactor crítico se beneficia de una mayor retroalimentación negativa por temperatura, mientras que el ADS muestra una mayor dependencia de los sistemas de protección en tiempo real.

En conjunto, estos estudios muestran que los sistemas ADS muestran una mayor seguridad frente a accidentes dependientes de la reactividad, ya que al ser reactores subcríticos basta con detener el haz externo para frenar la reacción en cadena. La configuración de estos sistemas facilita una interrupción directa y esperable, por lo que son particularmente interesantes. En específico lo son para su uso en escenarios donde los combustibles son complicados de regular, sobre todo aquellos que incluyen proporciones elevadas de actínidos menores.

No obstante, los sistemas ADS demandan de estrategias de control activas en tiempo real que aseguren una respuesta equilibrada ante cambios bruscos de temperatura, alteraciones en la potencia o fluctuaciones en la intensidad del haz. La fiabilidad de los ADS no se basa únicamente en su imposibilidad física de llegar a ser críticos (o sea, en mantener un valor de $k_{\text{eff}} < 1$), sino también en la puesta en marcha de sistemas de regulación dinámica que certifiquen el desempeño adecuado del reactor en diversas situaciones.

Un ejemplo relevante es el sistema CLEAR-IB, desarrollado en China, donde se ha implementado una arquitectura de control basada en reguladores PI (Proporcional-Integral). Según indican los modelos presentados por Luo et al. (2021) y Yan et al. (2014), este sistema emplea dos bucles de control independientes que aseguran la operación del reactor. Estos consisten en:

- Un controlador PI de potencia, que se encarga de asignar el valor de potencia del sistema a un valor deseado en el menor tiempo posible. Esto permite la reacción rápida ante cambios de la carga térmica o a modificaciones operativas, reduciendo al mínimo las variaciones peligrosas.
- Un controlador de temperatura del refrigerante, encargado de mantener la temperatura de entrada del LBE (plomo-bismuto eutéctico) al núcleo de forma estable. Esto es algo imprescindible, ya que el LBE puede volverse sólido si su temperatura baja de aproximadamente $123,5\text{ }^{\circ}\text{C}$, lo cual provocaría un fallo grave debido a la obstrucción del flujo refrigerante.

Ambos controladores se engloban dentro de lo que se conoce como la seguridad activa del reactor: requieren sensores, actuadores y controladores que operen en tiempo real para corregir desviaciones y mantener el sistema dentro de los márgenes seguros. Si bien un ADS no corre el riesgo de estallar debido a una reactividad descontrolada (debido a su condición subcrítica), sí que podría experimentar fallos térmicos si el calor producido por la fisión no se gestiona correctamente. Por lo tanto, la mezcla de seguridad pasiva (subcriticidad) junto con la seguridad activa (como el control PI) resulta fundamental para asegurar la solidez operativa del sistema.

Este enfoque de seguridad integrada refleja una ventaja operativa para los ADS: al separar el control de la potencia del control de la reactividad, el sistema se puede regular con mayor precisión y flexibilidad que en otros casos, incluso si se utilizan combustibles no convencionales como lo son los actínidos menores.

Por otro lado, es importante considerar que los reactores ADS son capaces de controlar el valor del factor de multiplicación efectivo k_{eff} y mantenerlo constante cambiando el valor de intensidad con el que el haz de protones incide contra el blanco de espalación. Si bien es cierto que haciendo esto se consigue el objetivo esperado, no es la forma más segura de lograrlo, puesto que el riesgo de daño por irradiación aumenta significativamente. Por ello, algunos artículos como Abe et al. (2009) proponen el uso de barras de control de hidruro metálico de hafnio para conseguir que el valor de k_{eff} se mantenga constante.

3.5. Componentes de un Sistema ADS

Un sistema ADS une tecnologías de aceleradores de partículas, física de espalación y reactores nucleares subcríticos con el fin producir energía o la transmutar desechos radiactivos. Su estructura se basa en la interrelación entre varios componentes funcionales, cada uno desempeñando un rol crucial en el funcionamiento del sistema.

La Figura 2 presenta una ilustración simplificada de un sistema ADS común. En ella se muestra cómo un haz de protones de gran energía, generado por un acelerador, impacta sobre un blanco de metal pesado (el blanco de espalación), generando una corriente de neutrones dirigida al núcleo subcrítico del reactor. Es allí donde se provocarán las reacciones de fisión del combustible nuclear. El sistema se refrigera a través de un circuito de LBE (Lead-Bismuth Eutectic), que lleva el calor a un intercambiador térmico, y su circulación garantiza mantener condiciones estables de funcionamiento.

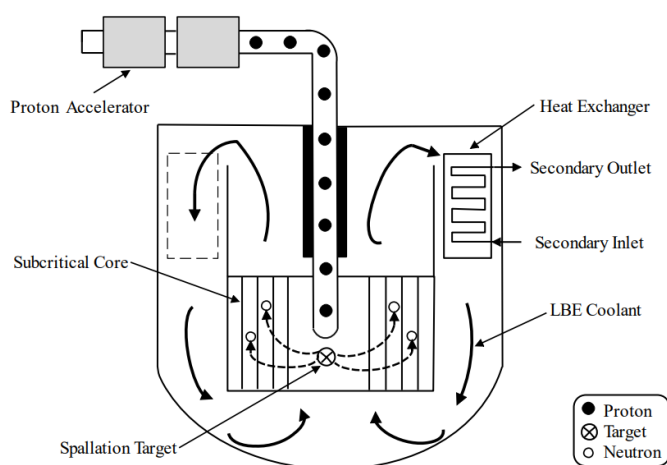


Figura 2: Esquema representativo de un sistema ADS refrigerado por eutéctico plomo-bismuto (LBE). Imagen adaptada de Luo et al. (2021).

En las siguientes secciones se especificarán los elementos clave del sistema ADS, examinando su función, atributos técnicos y rol en la seguridad y factibilidad del sistema en su totalidad.

3.5.1. Acelerador de Protones

El acelerador de protones consiste en el primer componente para tener en cuenta de un sistema ADS. Su función principal es la de generar un haz de protones de alta energía que impacta contra un blanco de metal pesado en estado sólido o líquido que se conoce como blanco de espalación, desencadenando así la liberación de neutrones. Estos neutrones irán a parar a otros núcleos, dando lugar a la reacción en cadena que se dará en el interior del reactor subcrítico (Haj Tahar, 2017).

A diferencia de los reactores nucleares al uso, en los que la reacción de fisión en cadena se mantiene por sí sola, los ADS necesitan un flujo constante de neutrones externos para realizar la misma fisión. En este caso, el acelerador suministra este flujo de forma directa. Por tanto, la fiabilidad y continuidad del haz de protones son vitales para la operación segura del sistema. Si el haz se detiene, el sistema se detendrá al instante, añadiendo una seguridad pasiva muy atractiva al reactor (Li et al., 2013).

Normalmente, el acelerador integrado en un ADS moderno se trata de un *linac* (acelerador lineal) de protones en modo continuo (CW). Según Yee-Rendón (2022), los aceleradores ADS contemporáneos deben atenerse a los siguientes requerimientos técnicos rigurosos:

- Operación en onda continua (CW), con potencias de haz del orden de varios megavatios (MW).
- Energías finales de entre 1 y 2 GeV para maximizar la eficiencia en la producción de neutrones por espalación.
- Corrientes de haz que oscilan entre unos pocos mA hasta decenas de mA.
- Tolerancia extremadamente baja a interrupciones de haz (*beam trips*), ya que podrían inducir estrés térmico en los componentes del reactor.
- Baja pérdida de haz ($< 1\text{W/m}$) para permitir el mantenimiento y evitar activación radiactiva fuera de las zonas deseadas.
- Diseño orientado a la fiabilidad, con estructuras redundantes, sistemas de recuperación rápida y módulos fácilmente reemplazable

Aparte del *linac*, es común que los sistemas ADS avanzados cuenten con líneas de transferencia y sistemas magnéticos de guiado que redirigen el haz de protones hacia el blanco de espalación. La Figura 3 ilustra de forma gráfica esta ruta, permitiendo observar la disposición general del sistema: desde el acelerador lineal, pasando por la línea de transferencia (*Transfer line*), hasta llegar al núcleo subcrítico (*Target & Blanket*). En esta última parte se encuentran el blanco de espalación, el material fisible y los sistemas de moderación y reflexión, todo ello rodeado de refrigerante y protección.

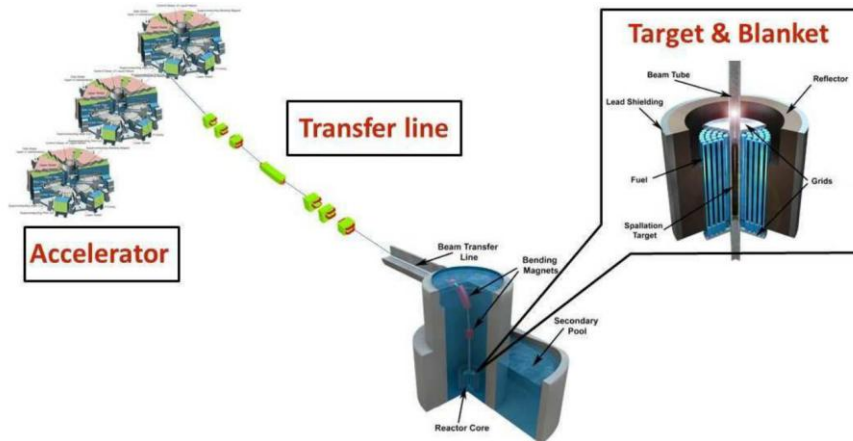


Figura 3: Esquema conceptual de un ADS en el que se distinguen sus tres componentes principales: el acelerador de protones, la línea de transferencia del haz y el conjunto Target & Blanket. Imagen extraída de Haj Tahar (2017).

Una implementación relevante de este tipo de aceleradores es el China ADS (C-ADS), cuyo diseño físico ha sido detallado por Li et al. (2013). El sistema está compuesto por un *linac* en modo continuo capaz de acelerar protones hasta 1,5GeV con una corriente de 10mA, lo que representa una potencia de haz del orden de 15MW. Este diseño no solo maximiza la eficiencia de generación de neutrones, sino que garantiza la operación segura y continuada, minimizando así el riesgo de interrupciones (*beam trips*).

3.5.2. Blanco de Espalación

La espalación puede definirse como una reacción nuclear violenta que se da cuando partículas de alta energía, como los protones acelerados, bombardean un conjunto de núcleos pesados (Abdullah, 2014, sec. 10.2.2). Debido a una serie de interacciones inelásticas, los núcleos se fragmentan y emiten múltiples partículas, entre las que se pueden encontrar neutrones, protones o partículas alfa. Una reacción de espalación general puede describirse como:

$$p + ST \rightarrow SF1 + SF2 + \dots + SFm + k(n) \quad (10)$$

Aquí, p representa la partícula incidente (que suelen ser protones), ST el blanco de espalación, SF_i el conjunto de fragmentos resultantes y k el número de neutrones emitidos en el proceso. El valor de k dependerá del material que componga al blanco y de la energía incidente de los protones. La fuente de neutrones resultante cubre un amplio espectro electromagnético (desde los eV hasta los GeV), por lo que es especialmente atractiva como fuente de alimentación de los reactores subcríticos (Abdullah, 2014, sec. 10.2.2).

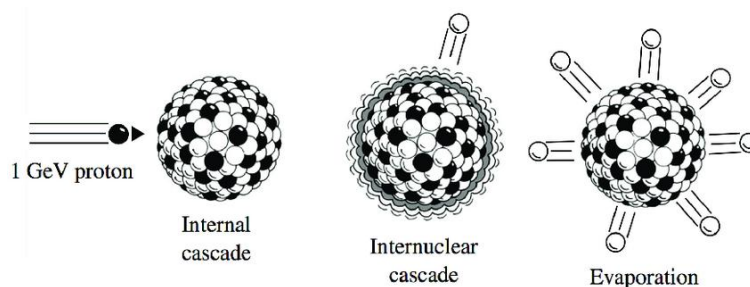


Figura 4: Representación esquemática del proceso de espalación inducido por un protón de alta energía, con las distintas fases implicadas. Imagen extraída de Experimental Neutron Scattering de Willis y Carlile (2009).

En un reactor de tipo ADS, el elemento que recibe el haz de protones incidente generado por el acelerador se conoce como blanco de espalación. Se encarga de producir la fuente de neutrones externa que alimenta la reacción de fisión que se da en el núcleo subcrítico del reactor (Hossain et al., 2015).

En la actualidad, el blanco de espalación puede encontrarse tanto en estado líquido como en estado sólido en los diferentes sistemas ADS existentes. Principalmente, los blancos elegidos suelen ser aquellos elementos con alto número atómico (alto Z), como lo son el plomo (Pb), el bismuto (Bi) o el tungsteno (W), ya que estos son los que liberan un mayor número de neutrones (Nifenecker et al., 2001; Hossain et al., 2015).

Por definición, el blanco de espalación se sitúa en el centro del núcleo del reactor, rodeado por el combustible subcrítico que alimentará el sistema. Una vez los protones acelerados alcanzan el blanco, se produce la liberación de neutrones a causa de la reacción de espalación. Estos neutrones se van a dispersar hacia el combustible, provocando fisiones secundarias que liberan energía y más neutrones que activarán la ya conocida reacción en cadena. El blanco debe estar diseñado para soportar elevadas densidades de potencia, flujos de partículas y gradientes térmicos, lo que exige una ingeniería muy precisa (Yan et al., 2014; Kapoor, 2002).

3.5.3. Núcleo Subcrítico

La base de los reactores ADS consiste en su núcleo subcrítico, en el cual se produce la reacción en cadena sostenida. A diferencia de los reactores críticos convencionales, el núcleo de un ADS opera con un factor de multiplicación efectivo $k_{\text{eff}} < 1$, luego necesita la presencia de una fuente externa de neutrones para mantener la actividad fisible. Como ya se ha mencionado en la Sección 3.4, esta condición subcrítica actúa como barrera pasiva ante reacciones descontroladas, ya que la fisión no se puede sostener por sí sola sin el aporte externo.

El diseño del núcleo suele favorecer un espectro neutrónico rápido, ya que los actínidos menores (como el americio o el curio) tienen secciones eficaces de fisión más altas a altas energías. A continuación, se presenta una breve sección que define qué es una sección eficaz.

3.5.3.1. Breve Explicación de la Sección Eficaz Nuclear

En física nuclear, la sección eficaz es una magnitud que determina la probabilidad de que un tipo en específico de reacción nuclear ocurra entre una partícula incidente y núcleo diana. En ocasiones se recurre a una analogía geométrica que representa al núcleo como una esfera con una cierta superficie, aunque en realidad la sección eficaz no describe un área real, sino una medida estadística de interacción. Matemáticamente, la sección eficaz σ se expresa en barns ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$), y puede hacer referencia a distintos tipos de procesos como la fisión (σ_f), la absorción (σ_a) o la dispersión (σ_s).

Una de las propiedades de la sección eficaz es que su valor varía en función de la energía de la partícula incidente. Como recoge la biblioteca de datos nucleares ENDF/B-VIII.0 (Chadwick et al., 2011), las secciones eficaces de fisión de actínidos menores como Am-241 y Cm-244 son más altas en el rango de energía de los neutrones rápidos, mientras que las de elementos como el U-235 son mucho mayores en el rango de los neutrones térmicos.

Por ello, a la hora de diseñar un sistema ADS con la finalidad de transmutar residuos nucleares para reducir así la cantidad de ellos, es imprescindible considerar cómo varían estas secciones eficaces. En este caso, un espectro rápido permite el máximo aprovechamiento de los actínidos menores, logrando el objetivo marcado.

Continuando con la sección anterior, se puede decir que hay una gran variedad de combustibles disponibles. Un ejemplo de ellos sería el propuesto por Salvatores et al. (1998), que se constituye prácticamente en su totalidad por una mezcla de actínidos menores y por lo tanto es un candidato ideal para el estudio de la transmutación de estos. Otro posible combustible es aquel que combina óxidos de actínidos menores (MA) y plutonio con diferentes matrices, como UO_2 , ThO_2 o zirconia estabilizada con itrio (YSZ) (Sobolev et al., 2003).

Aunque por definición un reactor subcrítico posee un valor de factor de multiplicación efectivo $k_{\text{eff}} < 1$, por norma general suelen escogerse valores inferiores pero cercanos a 1 (del orden de entre 0,95 y 0,98 (Sheffield, 2010)). Esto permite mejorar la eficiencia del reactor sin perder los beneficios de seguridad que proporciona la subcriticidad. La ganancia de energía (o potencia) que obtiene el reactor tras la reacción de fisión que se da en su núcleo se representa como G y se define como el ratio entre la potencia total de fisión y la del rayo incidente (Kapoor, 2002), es decir:

$$G = \frac{k}{1 - k} \cdot \frac{\text{energía de liberada promedio por neutrón fisionado}}{\text{coste energético promedio por producir neutrones de espalación}} = G_0 \cdot \frac{k}{1 - k} \quad (11)$$

Para mantener la seguridad del sistema, suelen utilizarse refrigerantes como el LBE (Yan et al., 2014), que concede al sistema una serie de propiedades como la buena transferencia térmica o la mayor resistencia a temperaturas elevadas. Su uso condiciona el diseño del reactor, por lo que la decisión de utilizarlos o no es un factor crucial en su planificación.

Capítulo 4. METODOLOGÍA

4.1. Métodos Monte Carlo en Reactores Nucleares

Para poder comprender cómo se comportan los neutrones dentro de los reactores nucleares hay que resolver lo que se conoce como la ecuación de transporte de neutrones. Esta ecuación integral-diferencial describe la propagación, colisión y absorción de los neutrones en el sistema. El problema radica en que esta expresión depende de la posición espacial $\mathbf{r}$, la dirección angular Ω y la energía E de manera simultánea. Debido a esa naturaleza acoplada y a la multidimensionalidad de las variables, la obtención de soluciones analíticas exactas se vuelve una tarea prácticamente imposible (Cai, 2014). Por eso, se han desarrollado una serie de métodos numéricos alternativos que tratan de resolver la cuestión sin llegar a analizarla. Dentro de dichos métodos es interesante destacar dos grupos: los métodos deterministas y los métodos estadísticos.

Los métodos deterministas se basan en la discretización de las variables problemáticas (espacio, ángulo y energía) para así poder solucionar la ecuación de transporte para todas las partículas en promedio (X-5 Monte Carlo Team, 2008). Esta aproximación suele requerir sacrificar algo de rigurosidad, ya sea por simplificaciones en la geometría o la homogenización del medio.

Por otro lado, los métodos Monte Carlo (MC) abordan la idea de una forma distinta: en vez de promediar las partículas del sistema para resolver la ecuación de transporte, simulan el comportamiento individual de numerosas de partículas a través de algoritmos estocásticos (X-5 Monte Carlo Team, 2008). A partir de las secciones eficaces de cada elemento, se simula la generación, propagación y colisión de cada neutrón con los elementos que haya en el reactor. Todas las magnitudes relevantes de estudio deben indicarse como *tallies* para poder acumular sus estadísticas (Romano et al., 2015).

Una de las principales ventajas que presenta el uso de los métodos MC es que no necesita homogenizarse la geometría o los materiales del reactor, lo cual permite modelar escenarios más complejos como puede serlo un reactor ADS. Otra de las posibilidades que presentan es que usándolos se puede calcular directamente el valor del factor de multiplicación efectivo k_{eff} , pudiendo así evaluar la criticidad del sistema de forma sencilla usando estimadores como el de colisión, longitud de trayectoria o absorción (Romano et al., 2015; Leppänen, 2007).

A lo largo de los últimos años se han desarrollado una gran variedad de algoritmos que se basan en los métodos Monte Carlo y que permiten realizar cálculos nucleares. Como ejemplos están MCNP, TRIPOLI o SERPENT, que conforman algunos de los más conocidos del sector. En este proyecto, en cambio, se usará OpenMC, un código MC gratuito que permite el cálculo de valores como el k_{eff} , la distribución de flujo o generar secciones eficaces multigrupo.

4.2. OpenMC: Acceso Gratuito a los Métodos Monte Carlo

OpenMC es un código de simulación de transporte de partículas que emplea el método de Monte Carlo, ideado principalmente para realizar cálculos de criticidad neutrónica. Fue lanzado

en diciembre de 2012, como proyecto del Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) dedicado a la creación de algoritmos paralelos adaptables a superordenadores. Este software, programado en Fortran 2008 estándar (hasta la versión 0.10.0), provee de una serie de ventajas de especial interés para el usuario. En primer lugar, es un programa de código abierto, lo cual permite que muchos investigadores con escasos recursos se puedan beneficiar del potencial de un programa Monte Carlo. Además, posee una gran variedad de funciones en Python, tal como la API de Python, que simplifica la elaboración de archivos ejecutables y el tratamiento de los resultados (Romano et al., 2015).

Una simulación típica de OpenMC se construye a partir de una serie de bloques de código representativos de las entradas físicas fundamentales para resolver la ecuación de transporte usando los métodos MC. A continuación, se explica en qué consiste cada uno de estos bloques y cómo se han implementado para este caso de estudio, así como algunos ejemplos ilustrativos del código en cuestión.

4.2.1. Materiales

En primer lugar, hay que declarar los materiales nucleares que conforman el combustible del reactor, especificando qué porcentaje representa cada isótopo y la densidad global (en g/cm^3 o átomos/barn · cm). Para este trabajo se utilizarán mezclas complejas que incluyan actínidos menores, para así estudiar su efecto en el rendimiento del reactor. Una vez se declaran los materiales, estos se almacenan en un archivo XML llamado materials.xml.

El primer paso consiste en declarar los materiales nucleares implicados, especificando la composición isotópica y la densidad. En el presente trabajo se definen materiales avanzados como mezclas de óxidos MOX con actínidos menores (Am, Np, Cm), permitiendo estudiar su efecto en el rendimiento del reactor.

4.2.2. Geometría

Para definir la geometría del reactor se utilizan lo que se conoce como geometría constructiva sólida (CGS), también conocida como geometría combinatoria. Esto consiste en agrupar formas sencillas como esferas o cubos y, a partir del uso de operadores booleanos, combinarlas para formar regiones más complejas (OpenMC Development Team, 2025).

Después de definir la geometría se ha de definir una celda (Cell) con dichas dimensiones y se procede al llenado de esta con el combustible declarado en materials.xml. Tras eso, y al igual que en otros programas como SERPENT, se crea un universo (Universe) al que se añaden las celdas y en el que se realizarán las simulaciones (OpenMC Development Team, 2025). OpenMC procesa toda esta información y la incluye en otro archivo XML que recoge todos esos datos, conocido como geometry.xml.

4.2.3. Fuente de Neutrones

Como ya se ha desarrollado en secciones previas, en los sistemas ADS la fuente de neutrones externa es de vital importancia para mantener la reacción en cadena. Esta proviene de la espalación que se provoca cuando un haz de protones acelerados bombardea un blanco compuesto por núcleos pesados. En OpenMC es necesario definir cómo las variables posición espacial $\mathbf{r}$, dirección angular $\boldsymbol{\Omega}$ y energía E (de las que la ecuación de transporte de neutrones depende) influyen en la fuente neutrónica. Para la simulación realizada en este proyecto, la fuente se sitúa en el origen de coordenadas y se asume que los neutrones del blanco de espalación salen de manera isotrópica. Además, como se trata de neutrones rápidos, se les asigna un valor energético de 14MeV, que coincide con el asociado a neutrones de este tipo en las secciones eficaces de fisión registradas en la biblioteca de datos de Shibata et al. (2011).

4.2.4. Parámetros de Simulación (*settings*)

En el bloque de settings.xml se recogen las instrucciones de control del cálculo. En este se incluyen el número de partículas simuladas por *batch*, el número de ciclos activos e inactivos, el modo de cálculo (*eigenvalue* o *fixed source*) y la configuración de la fuente. En el modo *eigenvalue* se calcula el valor del factor de multiplicación efectivo k_{eff} , midiendo así la criticidad del sistema. Por otro lado, en el modo *fixed source* se simula la propagación de neutrones provenientes de una fuente fija, permitiendo estudiar cómo se comporta el reactor ante distintos escenarios (OpenMC Development Team, 2025).

4.2.5. Medidas (*tallies*)

Formalmente, un *tally* en OpenMC representa el valor esperado de cualquier magnitud física X que quiera medirse (OpenMC Development Team, 2025). Para ello, se define como la siguiente integral sobre el espacio de fase del flujo neutrónico:

$$X = \int d\mathbf{r} \int d\boldsymbol{\Omega} \int dE f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \quad (12)$$

En esa expresión se tiene que $\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$ es la función de flujo neutrónico que depende de la posición $\mathbf{r}$, dirección $\boldsymbol{\Omega}$ y energía E y que $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$ es una función característica que define al observable que se quiere cuantizar. Con esta formulación puede verse que OpenMC no calcula directamente el flujo neutrónico, sino que estima el valor de los observables mediante el muestreo estocástico de las trayectorias individuales de las partículas. Haciendo esto se consigue que los *tallies* obtengan información detallada del sistema sin llegar a resolver de manera explícita la compleja ecuación de transporte de neutrones (OpenMC Development Team, 2025).

En este proyecto se utilizan distintos *tallies* para medir valores como: el flujo neutrónico total, la tasa de fisión global, las absorciones para núclidos seleccionados (TRU). Los resultados obtenidos se guardarán en formato HDF5 y podrán ser visualizados y tratados utilizando librerías como Pandas en Python.

Una visualización completa del flujo de simulación, incluyendo la definición de materiales, la geometría, la configuración de la fuente, los parámetros de ejecución y los *tallies*, puede consultarse en el Anexo I.

4.2.6. Procesamiento de Bibliotecas Nucleares

Para poder trabajar con OpenMC se necesitan datos nucleares reales y evaluados correctamente. Algunos de los datos necesarios serían los relativos a las secciones eficaces de cualquier interacción entre núcleos y neutrones o los asociados a las distribuciones angulares y energéticas. Habitualmente, estos datos suelen extraerse de bibliotecas oficiales como lo es ENDF/B-VII.1 (la que se ha utilizado para este proyecto), que contienen resultados experimentales y modelos teóricos avanzados a disposición de la comunidad científica.

No obstante, OpenMC no puede trabajar directamente con los archivos de esta biblioteca ya que no poseen el formato correcto para hacerlo. Para ello, han de procesarse a través de códigos especializados como NJOY, que convierten los datos a formato ACE, adaptándolos para la realización de simulaciones Monte Carlo. Más tarde, y ya desde OpenMC, se podrán convertir los datos a formato HDF5, generando un archivo XML conjunto (llamado *cross_sections.xml*) en el que se encontrarán las bibliotecas físicas asociadas a las secciones eficaces de cada isótopo en formato .h5. La estructura de estos datos incluye las secciones eficaces dependientes de la energía, distribuciones de energía secundaria y ángulo, además de los datos de fisión. Este procesamiento permite a OpenMC modelar correctamente los procesos físicos involucrados en la propagación y absorción de neutrones.

Capítulo 5. RESULTADOS

En esta fase del trabajo, nos enfocamos en la evaluación comparativa del comportamiento de los neutrones en diferentes combustibles que se han diseñado para su posible uso en sistemas subcríticos de tipo ADS. Para poder aislar el efecto de la composición del combustible, hemos decidido establecer una geometría común para todos los casos de estudio. De esta manera, cualquier diferencia que observemos en las magnitudes físicas simuladas podrá atribuirse únicamente a las características nucleares del material activo.

Para simular de manera realista la espalación en el entorno de simulación, hemos implementado una fuente externa de neutrones rápidos con una energía de 14MeV, distribuida isotrópicamente y ubicada en el centro geométrico de coordenadas. Esta fuente representa de manera idealizada la llegada de neutrones generados por el proceso de espalación, sin simular expresamente el impacto entre protones y el blanco de espalación, pero aun así manteniendo el efecto generado sobre el sistema.

A lo largo del capítulo, se contemplan distintas formulaciones de combustible que incluyen actínidos menores como el americio y el curio, así como plutonio y, en algunas ocasiones, uranio natural. Estas combinaciones se inspiran en propuestas que se encuentran en la literatura científica sobre la gestión avanzada de residuos radiactivos (International Atomic Energy Agency, 2009). Para cada una de ellas, se han evaluado magnitudes de interés, como el flujo neutrónico medio, la tasa de fisión, las absorciones totales y parciales, y la proporción de reacciones útiles en comparación con las transmutaciones que no generan energía.

5.1. Geometría Base y Condiciones de Simulación

La geometría que se ha utilizado ha sido diseñada con un enfoque que, aunque simplificado, es físicamente representativo. Se ha optado por un volumen cilíndrico homogéneo, formado únicamente por el material combustible, con un radio y una altura de 60cm. Esta elección busca lograr un balance entre el realismo físico y la viabilidad computacional, lo que permite investigar el transporte de neutrones en una configuración geoméricamente sencilla, pero lo suficientemente grande como para captar efectos relevantes de reactividad y fuga. El dominio está rodeado por condiciones de contorno de tipo "vacío" (*vacuum*) en todas sus superficies. Esto significa que los neutrones que llegan al límite del dominio se consideran perdidos, simulando así la posibilidad de fuga hacia el exterior. Esta condición es coherente con la realidad de que, en los ADS reales, el reactor es subcrítico y, por lo tanto, no se busca retener todos los neutrones, sino evaluar su impacto en términos de tasas de reacción internas.

La celda combustible se considera como un medio continuo y homogéneo, sin la estructura interna de barras ni moderadores. Aunque esta aproximación es un poco idealizada, resulta útil para llevar a cabo estudios comparativos de diferentes mezclas isotópicas, ya que elimina el impacto de posibles heterogeneidades espaciales que pudiesen afectar a los parámetros que se pretenden medir. De esta manera, el enfoque se centra en cómo cada formulación química

afecta el comportamiento del sistema cuando hay una fuente de neutrones externa presente. Como se mencionó anteriormente, la fuente se ha modelado como un punto central que emite neutrones con una energía fija de 14MeV, lo que representa la entrada de partículas desde el sistema de espalación vinculado al acelerador. Esta configuración permite reproducir de manera simplificada las condiciones de operación de un reactor ADS, sin la complejidad de simular el propio acelerador o el blanco de espalación.

5.2. Composición de Combustibles Simulados

En esta sección, vamos a explorar las características de los combustibles utilizados en el estudio. Todos ellos han sido seleccionados a partir de propuestas documentadas en la literatura científica sobre sistemas ADS y la transmutación de residuos (International Atomic Energy Agency, 2009). Se han considerado un total de cuatro formulaciones diferentes, enumerados utilizando las letras A-D. En este caso, el llamado Combustible A se corresponde al escenario 1 del sistema INCAD-I propuesto por el CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives) (Salvatores et al., 1998), mientras que los Combustibles B-D incluyen una variedad de mezclas actínidas que investigan diferentes matrices, todas basadas en las propuestas de Sobolev et al. (2003) para aplicaciones en transmutación avanzada. La razón por la que se ha optado por estas configuraciones específicas es que representan dos enfoques claramente distintos en el diseño de combustibles para ADS.

- Combustible A (INCAD-I): ofrece una opción homogénea compuesta casi en su totalidad por actínidos menores, lo que lo hace perfecto para evaluar la capacidad máxima de transmutación de residuos.
- Combustibles B-D (en sus diferentes variantes): presenta una mezcla más realista de actínidos menores y plutonio, que se diluyen en diversas matrices como uranio, torio o materiales inertes como Zr-Y. Esto permite analizar el equilibrio entre el rendimiento energético, la estabilidad física y la eficiencia en la transmutación.

5.2.1. Combustible A

Este combustible está basado en la formulación del escenario 1 del sistema INCAD-I, desarrollada en el marco de estudios europeos sobre transmutación de residuos radiactivos (Salvatores et al., 1998). Su composición refleja un escenario extremo: un combustible formado exclusivamente por actínidos menores (americio y curio), sin la presencia de materiales fértiles ni portadores convencionales. El objetivo de esta formulación es maximizar la eliminación directa de radionucleidos de larga vida, aunque esto se traduce en una mayor dificultad de operación debido a la baja reactividad intrínseca del sistema.

La composición isotópica considerada en el inicio de vida (BOL) se representa en la siguiente tabla extraída del artículo original (valores en % masa):

	Am ²⁴¹	Am ^{242m}	Am ²⁴³	Cm ²⁴²	Cm ²⁴³	Cm ²⁴⁴	Cm ²⁴⁵	Cm ²⁴⁶	Pu ²³⁸	Pu ²³⁹	Pu ²⁴⁰	Pu ²⁴²	M _{tot} (t)
BOL	22.9	0.433	23.4	0	0.121	8.45	0.999	0	0	0	0	0	56.3
(%)	40.9	0.8	41.5		0.2	14.9	1.7						
EQU	3.91	0.285	5.68	0.044	0.008	2.50	0.537	0.162	3.26	0.562	8.50	1.41	29.6
(%)	13.2	1.0	19.0	0.2	0.03	8.3	1.8	0.5	11.1	1.9	28.8	4.7	

Tabla 1: Composición inicial (BOL) y en equilibrio (EQU) del combustible INCAD-I, con distribución en masa de actínidos y plutonio. Imagen extraída de Salvatores et al., 1998.

Para este análisis, el combustible empleado consiste en una combinación de MA (Am, Cm), tomando como referencia las configuraciones planteadas para reactores rápidos de sales fundidas (MSFR). Tal y como se describe en Heuer et al. (2014), estos componentes pueden obtenerse al reprocesar el combustible gastado en reactores PWR, sin necesidad de reciclaje, y tras varios años de enfriamiento. La proporción de isótopos como Am-241, Am-243 o Cm-244 registrada en ese estudio es bastante parecida a la composición que se utiliza aquí. Si bien este combustible se disuelve en una sal fundida, para la simulación en OpenMC se representa como un material uniforme con una densidad efectiva de 4,1g/cm³, similar al valor usado por Heuer et al. (2014) para el núcleo del MSFR. Esta asunción se realiza debido a que en el artículo de Salvatores et al. (1998) no se especifica la densidad del combustible.

5.2.2. Combustibles B-D

El segundo grupo de combustibles utilizados en este trabajo, referenciados como Combustibles B-D, se basan en las formulaciones desarrolladas por Sobolev et al. (2003) que han explorado distintos soportes materiales para la transmutación de actínidos en sistemas ADS. En todos los casos se considera una fracción de 25% de americio y 25% de plutonio, combinados con diferentes matrices que pueden ser:

- **Uranio natural** (APU)
- **Torio natural** (APT)
- **Material inerte Zr-Y** (APZ)

Estas opciones nos dan la posibilidad de entender mejor cómo la matriz afecta al desempeño del combustible en un sistema subcrítico. Si bien el uranio sirve como una base fértil que favorece la fisión y la creación de nuevos actínidos (lo cual añade valores de reactividad positiva), el torio también funciona como material fértil, con una tasa de conversión más gradual y constante, lo que ayuda a tener un espectro más moderado y una progresión más maleable de los isótopos presentes. En cambio, para las bases inertes, como el óxido de circonio (ZrO₂) o la mezcla de óxidos Zr-Y, no se involucran reacciones nucleares importantes, lo que permite así analizar la transmutación directa de los actínidos menores sin crear elementos pesados adicionales. Según se explica en Sobolev et al. (2003), esta última alternativa es la más eficaz para eliminar actínidos sin regenerarlos, comparando cómo evolucionan estos combustibles en sistemas ADS con diferentes bases.

La composición isotópica interna de las fracciones de americio y plutonio es la misma en las tres variantes, y ha sido extraída directamente de los vectores isotópicos citados en la bibliografía:

	Americio (25%)			Plutonio (25%)				
Compo- nente	Am- 241	Am-242m	Am-243	Pu-238	Pu-239	Pu-240	Pu-241	Pu-242
% del total	84,5%	0,25%	15,25%	1,27%	61,88%	23,50%	8,95%	4,40%

Tabla 2: Distribución isotópica de las fracciones de americio y plutonio utilizadas en la formulación de los combustibles del grupo B–D.

A esto se le suma el componente de la matriz, que completa el 100% en masa del combustible:

- **APU:** 50% U-238 + U-235 (natural)
- **APT:** 50% Th-232
- **APZ:** 40% Zr + 10% Y, representando una matriz inerte (YSZ)

Las densidades utilizadas son las que figuran en los artículos originales: 7,07g/cm³ para APU, 10,5g/cm³ para APT, y 8,65g/cm³ para APZ. Estas formulaciones representan un abanico razonable de diseños propuestos para el ciclo cerrado del combustible, orientado a reducir la radiotoxicidad a largo plazo de los residuos, y constituyen una base sólida para analizar diferencias en comportamiento neutrónico y capacidad de transmutación.

5.3. Resultados Globales

5.3.1. Combustible A

Los resultados obtenidos para el Combustible A, correspondiente al escenario 1 del diseño IN-CAD-I desarrollado por el CEA, reflejan el comportamiento característico de un combustible altamente cargado en actínidos menores (MA) en un sistema subcrítico impulsado por fuente externa. Este combustible presenta una composición sin materiales fértiles ni diluyentes, lo que permite evaluar de forma directa su capacidad de transmutación y su contribución a la generación de energía a través de fisión. El valor combinado de la k efectiva se sitúa en:

$$k_{\text{eff}} = (9710 \pm 9) \cdot 10^{-4}$$

lo que confirma la naturaleza subcrítica del sistema, respaldando el uso de una fuente externa de neutrones para su funcionamiento. Este valor se alinea con lo que se espera de un ADS bien diseñado, ya que un rango típico aceptable para una transmutación segura se sitúa entre 0,95 y 0,98 (Sheffield, 2010).

El flujo de neutrones promedio en la celda de combustible fue de aproximadamente $3,58 \times 10^3$ partículas/cm² por partícula fuente lo que representa una magnitud moderada, reflejando las altas tasas de fuga observadas. En concreto, la fracción de fuga alcanza un notable

85,86%, lo cual es coherente con una geometría abierta y sin reflexión, y confirma que una gran parte de los neutrones generados se escapan del sistema sin interactuar.

En cuanto a la actividad nuclear interna, se observó una tasa total de fisión de 38,3 eventos por partícula fuente, con una distribución bastante desigual entre los diferentes isótopos de actínidos. La absorción total en MA fue alta, lo que demuestra que el combustible tiene una buena capacidad para atrapar neutrones que inciden, aunque no todas las absorciones se convierten en fisión directa.

Reacciones por isótopo MA

A continuación, se resume para los actínidos considerados la tasa de absorción, fisión y captura no fisionable. Se opera c (*capture*) = a (*absorption*) – f (*fission*) en base a los parámetros dados, obteniendo:

Núclido	Absorción ($a \pm \Delta a$)	Fisión ($f \pm \Delta f$)	Captura ($c \pm \Delta c$)	($f/a \pm \Delta f/a$)%
Am-241	$22,7 \pm 0,2$	$15,9 \pm 0,2$	$6,8 \pm 0,4$	(70 ± 1)%
Am-242m	$1,40 \pm 0,01$	$1,33 \pm 0,01$	$0,07 \pm 0,03$	(95 ± 1)%
Am-243	$17,6 \pm 0,2$	$12,4 \pm 0,1$	$5,2 \pm 0,3$	(70 ± 1)%
Cm-242	$0,309 \pm 0,003$	$0,269 \pm 0,003$	$0,040 \pm 0,006$	(87 ± 1)%
Cm-243	$0,184 \pm 0,002$	$0,176 \pm 0,002$	$0,007 \pm 0,004$	(96 ± 1)%
Cm-244	$8,53 \pm 0,09$	$7,69 \pm 0,08$	$0,8 \pm 0,2$	(90 ± 1)%
Cm-245	$0,481 \pm 0,005$	$0,453 \pm 0,005$	$0,03 \pm 0,01$	(94 ± 1)%

Tabla 3: Resultados de absorción, fisión y captura para los actínidos menores del Combustible A (INCAD-I), expresados en reacciones por partícula fuente y sus respectivas desviaciones estándar.

Los valores presentados en la tabla incluyen tanto las medias como las desviaciones estándar (incertidumbres) asociadas, proporcionadas directamente por OpenMC a partir del tratamiento estadístico del muestreo Monte Carlo. En el caso de la tasa de captura, la incertidumbre se ha estimado mediante propagación de errores, sumando las desviaciones estándar de absorción y fisión tal que:

$$\Delta c = \Delta a + \Delta f \quad (13)$$

El porcentaje de fisión sobre absorción se calcula de la siguiente forma:

$$f/a = \frac{f}{a} \cdot 100 \quad (14)$$

Y su error se calcula propagando los errores, tal que:

$$\Delta f/a = \sqrt{\left(\frac{\partial f/a}{\partial f} \Delta f\right)^2 + \left(\frac{\partial f/a}{\partial a} \Delta a\right)^2} = 100 \sqrt{\left(\frac{\Delta f}{a}\right)^2 + \left(-\frac{f \cdot \Delta a}{a^2}\right)^2} \quad (15)$$

El conjunto de estos datos permite extraer varias conclusiones relevantes:

- Am-241 y Am-243 son los principales responsables de la actividad del combustible, con tasas de absorción y fisión comparativamente elevadas.

- Los isótopos de curio también presentan buen rendimiento fisionable, con eficiencias de fisión superiores al 90% en la mayoría de los casos.
- El Am-242m, aunque minoritario en masa, muestra una elevada probabilidad de fisión por absorción, lo que lo convierte en un isótopo especialmente interesante desde el punto de vista de la recuperación energética.

En conjunto, los resultados de este Combustible A validan su diseño como combustible de alta capacidad transmutadora, adecuado para reducir el inventario de actínidos menores mediante irradiación en un entorno subcrítico. No obstante, la ausencia de elementos fértiles y la alta fracción de fuga sugieren que este tipo de combustible debe gestionarse con especial cuidado en el diseño global del reactor ADS para mantener una eficiencia adecuada.

5.3.2. Combustible B

El Combustible B, conocido como APU (americio + plutonio + uranio), representa una mezcla de actínidos menores (principalmente americio), plutonio y uranio natural como soporte fértil. Este tipo de composición representa a las estrategias de transmutación con recuperación energética parcial. El valor combinado de la constante de multiplicación efectiva calculado es:

$$k_{\text{eff}} = (9571 \pm 7) \cdot 10^{-4}$$

Valor el cual le sitúa dentro del rango de criticidad esperado, en línea con los valores esperados según la teoría de las configuraciones ADS en la que se basa (Sobolev et al., 2003). En comparativa con el Combustible A, se puede observar que el sistema muestra un valor de criticidad ligeramente más alto. Quizá esto pueda deberse a la presencia de uranio natural, ya que el nivel de reactividad de este difiere con el de los actínidos menores que abundan en el primer combustible.

El flujo neutrónico promedio observado fue $3,11 \times 10^3$ partículas/cm² por partícula fuente y la fracción de fuga se mantuvo en un 59,65%, relativamente inferior a la observada con el Combustible A. Esta mejoría sugiere una mayor retención de neutrones en el sistema, favorecida posiblemente por una composición más eficiente en los procesos de moderación o absorción.

El valor obtenido para la tasa de fisión global promedio de todo el proceso fue de 31,2 eventos por partícula fuente, algo menos que lo obtenido para el Combustible A. En particular, se puede ver que el Pu-239 representa la mayor fuente de fisión en el sistema, lo cual es de esperar debido a su alta sección eficaz en el espectro de neutrones rápidos.

A continuación, se muestran en detalle los resultados obtenidos para cada isótopo, de la misma forma que se obtuvieron en la sección previa. Las incertidumbres asociadas a la captura y al porcentaje de fisiones sobre absorciones se calculan en base a Ecuación (13) y Ecuación (15), utilizando los datos correspondientes a este combustible. Este proceso se replicará en los otros dos escenarios restantes.

Reacciones por isótopo MA

Núclido	Absorción ($a \pm \Delta a$)	Fisión ($f \pm \Delta f$)	Captura ($c \pm \Delta c$)	$(f/a \pm \Delta f/a)\%$
Am-241	$15,8 \pm 0,2$	$9,2 \pm 0,1$	$6,6 \pm 0,3$	$(58,2 \pm 0,9)\%$
Am-242m	$0,0683 \pm 0,0008$	$0,0640 \pm 0,0007$	$0,004 \pm 0,001$	$(94 \pm 1)\%$
Am-243	$0,678 \pm 0,008$	$0,394 \pm 0,004$	$0,28 \pm 0,01$	$(58,2 \pm 0,9)\%$
Pu-238	$0,269 \pm 0,003$	$0,236 \pm 0,003$	$0,033 \pm 0,006$	$(88 \pm 1)\%$
Pu-239	$13,1 \pm 0,1$	$12,4 \pm 0,1$	$0,7 \pm 0,3$	$(95 \pm 1)\%$
Pu-240	$2,90 \pm 0,03$	$2,49 \pm 0,03$	$0,40 \pm 0,06$	$(86 \pm 1)\%$
Pu-241	$1,94 \pm 0,02$	$1,79 \pm 0,02$	$0,15 \pm 0,04$	$(92 \pm 1)\%$
Pu-242	$0,452 \pm 0,005$	$0,390 \pm 0,004$	$0,063 \pm 0,009$	$(86 \pm 1)\%$

Tabla 4: Resultados de absorción, fisión y captura para los actínidos menores del Combustible B (APU), expresados en reacciones por partícula fuente y sus respectivas desviaciones estándar.

Los resultados revelan varios aspectos que son relevantes de destacar, como:

- El Pu-239 es el principal generador de fisión, mostrando una eficiencia cercana al 95%, lo que justifica su inclusión como componente clave para sostener la reactividad del sistema.
- Los actínidos menores como el Am-241 y Am-243 tienen eficiencias de fisión moderadas, lo que indica que aún cumplen una función transmutadora importante, aunque menos eficiente en términos energéticos que el Pu.
- La presencia de múltiples isótopos fisibles diversifica el origen de los eventos de fisión, lo cual puede contribuir a una distribución de poder más homogénea y una mayor flexibilidad en el diseño del ciclo de combustible.

El Combustible B, como puede verse, combina de forma adecuada los procesos de transmutación de MA junto con los de recuperación de energía a partir de núcleos más relativamente eficaces (como el plutonio). Gracias a esto, el reactor puede mantener un valor de k_{eff} correcto, pudiendo reducir residuos nucleares a partir de fisiónarlos de manera segura. Desde el punto de vista del aprovechamiento neutrónico y la seguridad operativa, su menor valor de fuga de neutrones lo vuelve más atractivo que el Combustible A para las condiciones ideales dadas.

5.3.3. Combustible C

El Combustible C, conocido como APT (americio + plutonio + torio), se forma a partir de una matriz basada en torio junto a una fracción de plutonio y MA (americio, en este caso). Este diseño combina dos enfoques de interés: la transmutación de residuos nucleares como los MA junto con la fertilidad del torio, que tras varias capturas neutrónicas puede generar isótopos de uranio, abriendo así la posibilidad de un ciclo de combustible regenerativo. El valor combinado de k_{eff} obtenido es de:

$$k_{\text{eff}} = (9775 \pm 7) \cdot 10^{-4}$$

Lo cual lo sitúa en el límite superior del rango aceptable dado para los sistemas ADS (Sheffield, 2010) que permite una transmutación segura. Este dato sugiere una reactividad mayor que la observada en los dos casos previos, lo cual podría deberse a la mayor fertilidad del torio como matriz.

En cuanto al flujo neutrónico, se registra un resultado de $5,69 \times 10^3$ partículas/cm² por partícula fuente, que indica una actividad interna mucho más superior que en los otros combustibles. Además, la fracción de fuga desciende hasta un 55,28%, por lo que se puede entender que los neutrones se retienen mejor y que, por tanto, se aprovecha mejor el campo neutrónico generado por la fuente externa (por el blanco de espalación simulado).

La tasa de fisión global se corresponde con 55,4 eventos por partícula fuente, superando a las tasas medidas en los otros casos. Esto muestra una mayor recuperación energética y un incremento de las reacciones útiles dentro del combustible. Ahora, se detalla la contribución de cada isótopo relevante en el proceso.

Reacciones por isótopo MA

Núclido	Absorción ($a \pm \Delta a$)	Fisión ($f \pm \Delta f$)	Captura ($c \pm \Delta c$)	($f/a \pm \Delta f/a$)%
Am-241	$30,4 \pm 0,5$	$16,8 \pm 0,3$	$13,6 \pm 0,7$	$(55,2 \pm 1,2)\%$
Am-242m	$0,152 \pm 0,002$	$0,142 \pm 0,002$	$0,010 \pm 0,005$	$(93 \pm 2)\%$
Am-243	$4,23 \pm 0,07$	$2,33 \pm 0,04$	$1,9 \pm 0,1$	$(55,0 \pm 1,2)\%$
Pu-238	$9,7 \pm 0,1$	$8,5 \pm 0,1$	$1,3 \pm 0,3$	$(87 \pm 2)\%$
Pu-239	$14,8 \pm 0,2$	$14,0 \pm 0,2$	$0,8 \pm 0,4$	$(94 \pm 2)\%$
Pu-240	$6,11 \pm 0,09$	$5,19 \pm 0,08$	$0,9 \pm 0,2$	$(85 \pm 2)\%$
Pu-241	$4,28 \pm 0,07$	$3,94 \pm 0,06$	$0,3 \pm 0,1$	$(92 \pm 2)\%$
Pu-242	$3,11 \pm 0,05$	$2,64 \pm 0,04$	$0,47 \pm 0,09$	$(85 \pm 2)\%$

Tabla 5: Resultados de absorción, fisión y captura para los actínidos menores del Combustible C (APT), expresados en reacciones por partícula fuente y sus respectivas desviaciones estándar.

Donde se pueden observar algunos resultados destacables, como pueden ser:

- Un notorio incremento de las tasas absolutas de fisión en los actínidos menores, especialmente en Am-241, en comparación con los combustibles previos.
- Una clara dominancia de Pu-239 en términos de eficiencia fisionable, aunque acompañado de contribuciones importantes de otros isótopos de plutonio como Pu-238 y Pu-240 que antes no destacaban.
- El Am-242m mantiene su buena eficiencia (93,5%), a pesar de su bajo porcentaje en la mezcla.

La combinación de actínidos menores y plutonio con una matriz de torio genera una configuración muy activa, provocando un visible equilibrio entre la transmutación y la generación energética. El Combustible C (APT) se presenta entonces como una alternativa firme dentro de los escenarios estudiados, con potencial de ofrecer elevadas tasas de transmutación de MA y una mejorada capacidad de recuperación energética, todo ello manteniéndose en el rango subcrítico

requerido. El torio como matriz aporta fertilidad, pero su inclusión debe acompañarse de mecanismos de control adecuados para evitar un exceso de reactividad en fases avanzadas del ciclo.

5.3.4. Combustible D

Por último, el Combustible D (o APZ) está formado por una mezcla de americio (MA), plutonio y una matriz inerte de óxidos de circonio e itrio ($Y_{\gamma}Zr_{1-\gamma}O_{2-\gamma/2}$) (Sobolev et al., 2003) que no participa de forma activa en las reacciones nucleares (de ahí su naturaleza inerte). Esto hace de este combustible uno ideal para el estudio de los procesos de transmutación de MA sin los efectos generados por los fertilizantes añadidos que pertenecen a la matriz. Al eliminar la posibilidad de reproducción de nuevos actínidos, esta permite evaluar de forma más pura la capacidad de destrucción de MA del sistema. En términos de reactividad, se ha obtenido un valor de k_{eff} de:

$$k_{\text{eff}} = (9846 \pm 8) \cdot 10^{-4}$$

Este valor se sitúa ligeramente por encima del rango de seguridad establecido por Sheffield (2010). Aunque todavía se encuentra por debajo del umbral de la subcriticidad, ya que $k_{\text{eff}} < 1$, la cercanía a dicho límite añade un factor de riesgo extra al sistema. Si se busca recrear este proceso con este combustible, se deberán implementar mecanismos de control y de regulación mucho más estrictos para así evitar situaciones inestables que pongan en peligro la seguridad de la operación.

El flujo neutrónico fue el mayor de todos los casos evaluados, con un valor igual a $8,70 \times 10^3$ partículas/cm² por partícula fuente. Esto se corresponde con un entorno mucho más activo, en el cual es más probable que se den reacciones de transmutación efectivas. La fracción de fuga medida en el modelo cilíndrico ideal es del 60,3% que, aunque elevada, coincide con lo esperado debido a la alta actividad del núcleo.

La tasa de fisión total también es la más alta de los cuatro combustibles estudiados, siendo de 82,3 eventos por partícula fuente, excelente eficiencia energética y una elevada destrucción de actínidos. A continuación, se muestran los resultados obtenidos por cada núclido.

Reacciones por isótopo MA

Núclido	Absorción ($a \pm \Delta a$)	Fisión ($f \pm \Delta f$)	Captura ($c \pm \Delta c$)	($f/a \pm \Delta f/a$)%
Am-241	$48,8 \pm 0,9$	$29,9 \pm 0,5$	19 ± 1	(61 ± 2)%
Am-242m	$0,205 \pm 0,004$	$0,193 \pm 0,003$	$0,012 \pm 0,007$	(94 ± 2)%
Am-243	$2,10 \pm 0,04$	$1,28 \pm 0,02$	$0,81 \pm 0,06$	(61 ± 2)%
Pu-238	$0,84 \pm 0,01$	$0,74 \pm 0,01$	$0,10 \pm 0,03$	(88 ± 2)%
Pu-239	$31,8 \pm 0,6$	$30,2 \pm 0,5$	2 ± 1	(95 ± 2)%
Pu-240	$13,1 \pm 0,2$	$11,4 \pm 0,2$	$1,7 \pm 0,4$	(87 ± 2)%
Pu-241	$7,8 \pm 0,1$	$7,2 \pm 0,1$	$0,6 \pm 0,3$	(92 ± 2)%
Pu-242	$1,45 \pm 0,03$	$1,26 \pm 0,02$	$0,19 \pm 0,05$	(87 ± 2)%

Tabla 6: Resultados de absorción, fisión y captura para los actínidos menores del Combustible D (APZ), expresados en reacciones por partícula fuente y sus respectivas desviaciones estándar.

Los resultados reflejan:

- Una muy alta eficiencia de fisión en los isótopos de plutonio, de nuevo destacando el Pu-239 con una eficiencia del 94,9%.
- Una alta contribución del Am-241, que presenta la mayor tasa absoluta de absorción y fisión entre los MA.
- Una ligera disminución de la eficiencia fisionable en Am-241 y Am-243 respecto a APT, pero compensada por la altísima fisión en el plutonio.

El Combustible D (APZ) muestra el mejor rendimiento energético, además de una elevada capacidad de destrucción de actínidos (incluso sin una matriz fértil). No obstante, la cercanía del valor de k_{eff} al estipulado según los estándares de criticidad impone mayores requerimientos de diseño en términos de seguridad y control. Su implementación real requeriría una monitorización estricta del sistema y una arquitectura ADS robusta y fiable.

Capítulo 6. DISCUSIÓN

Los resultados obtenidos nos permiten hacer una comparación directa entre los cuatro combustibles simulados, todos bajo las mismas condiciones geométricas y de fuente neutrónica. El Combustible A (INCAD-I), que está compuesto únicamente por actínidos menores (MA), fue diseñado con la intención de maximizar la transmutación de residuos sin generar nuevos isótopos pesados. Por otro lado, los combustibles B (APU), C (APT) y D (APZ) incluyen proporciones de MA y plutonio, además de variar la matriz que los contiene (óxidos de uranio, torio o zirconia, respectivamente). A continuación, se resumen los principales resultados obtenidos para cada uno:

Fuel	k_{eff}	Φ	Fisión MA	Abs. MA	Fisión/Abs (MA)	Fuga (%)
A	$(9711 \pm 9) \cdot 10^{-4}$	$3,58 \cdot 10^3$	29,67	41,72	$\approx 71,1\%$	85,86
B	$(9571 \pm 7) \cdot 10^{-4}$	$3,11 \cdot 10^3$	9,64	16,53	$\approx 58,4\%$	59,65
C	$(9775 \pm 7) \cdot 10^{-4}$	$5,69 \cdot 10^3$	19,26	34,81	$\approx 55,3\%$	55,28
D	$(9846 \pm 8) \cdot 10^{-4}$	$8,70 \cdot 10^3$	31,38	51,15	$\approx 61,4\%$	60,33

Tabla 7: Comparativa de parámetros clave obtenidos en la simulación de los cuatro combustibles analizados: valor de k_{eff} , flujo neutrónico Φ , tasas de fisión y absorción en MA, eficiencia de fisión y fracción de fuga. Todos los valores corresponden a resultados normalizados por partícula fuente.

Desde la perspectiva de la multiplicación efectiva (k_{eff}), los valores fluctúan entre 0,957 para el Combustible B y 0,985 para el Combustible D, todos aproximadamente dentro del rango subcrítico aceptable para operar en un sistema ADS. La inclusión de materiales fértiles como el uranio (APU) o el torio (APT) mejora la capacidad de mantener la reacción en cadena, lo que se traduce en valores de k_{eff} más cercanos a la unidad.

En lo que respecta al flujo neutrónico, el APZ (D) alcanza el valor más alto, lo que indica una mayor densidad de neutrones por partícula fuente, favoreciendo tanto la fisión como la transmutación. Este resultado concuerda con sus altas tasas de fisión y absorción.

Si analizamos la eficiencia de transmutación de los actínidos menores, calculada como la fracción de absorciones que resultan en fisión, vemos que el Combustible A logra la mayor eficiencia ($\approx 71,1\%$), seguido por el D (APZ) con aproximadamente un 61,4%. Los combustibles con matrices fértiles (B y C) muestran eficiencias menores ($\approx 58,4\%$ y $\approx 55,3\%$ respectivamente), ya que parte de la absorción ocurre en núclidos no transmutadores o fértiles.

Para terminar, la proporción de neutrones que se liberan del sistema sin interactuar con nada (la fuga) nos da una idea clave de cuán eficiente es la geometría del núcleo y si necesitamos algo que los frene o los haga rebotar. El Combustible A, rodeado de vacío y sin nada que frene los neutrones, pierde el 85,86% de ellos. Por otro lado, los otros combustibles al operar en las mismas condiciones geométricas logran disminuir esa cifra a un rango del 55% al 60%, posiblemente debido a su mayor densidad, a que poseen mezclas de materiales o a la presencia de elementos estructurales que atenúan la dispersión.

6.1. Implicaciones para el Diseño de los Sistemas ADS

Los resultados que hemos obtenido nos permiten hacer una comparación directa entre los cuatro combustibles simulados, todos bajo las mismas condiciones geométricas y de fuente neutrónica. En particular, se ha percibido que los combustibles con matrices fértiles o diluyentes (como UO_2 o ThO_2) tienen un rendimiento transmutador directo de MA más bajo, pero logran valores más altos de k_{eff} , flujo neutrónico y tasas de fisión sostenidas, lo cual puede traer ventajas desde el punto de vista energético y de estabilidad operacional. Por otro lado, configuraciones como el Combustible A, que está compuesto solo por actínidos menores sin materiales fértiles ni moderadores, maximizan la transmutación, pero presentan tasas de fuga más altas y una eficiencia neutrónica inferior (Salvatores et al., 1998).

Esto remarca la necesidad de encontrar un equilibrio en el diseño: los ADS que busquen transmutar una gran fracción de actínidos menores deben contar con un control preciso del flujo neutrónico, una gestión térmica adecuada y un diseño de contención eficaz. Por ejemplo, matrices inertes como YSZ pueden ayudar en esta tarea al no generar nuevos actínidos tras la captura, pero requieren de una geometría y de una fuente externa bien optimizadas para mantener la reactividad necesaria (Sobolev et al., 2003). Además, el uso de materiales fértiles como torio o uranio natural implica una reproducción parcial de nuevos núclidos fisionables, lo cual puede ser deseable en diseños híbridos orientados también a la producción de energía. Desde un punto de vista práctico, se confirma la necesidad de:

- Diseñar geometrías compactas con reflexión eficiente que reduzcan la fracción de fuga (muy elevada en configuraciones idealizadas de vacío).
- Mantener la subcriticidad dentro de un rango óptimo ($k_{\text{eff}} \approx 0,95 - 0,98$) para asegurar tanto la seguridad como la eficiencia del sistema (Sheffield, 2010).
- Seleccionar el combustible teniendo en cuenta no solo la composición isotópica, sino también la matriz estructural, la densidad nuclear efectiva y la compatibilidad con refrigerantes y condiciones operacionales (Sobolev et al., 2003).

6.2. Limitaciones del Estudio y Propuestas de Mejora

A pesar de los resultados obtenidos, este trabajo tiene varias limitaciones que forman parte del alcance académico y de los recursos computacionales disponibles. En primer lugar, las simulaciones se han llevado a cabo en entornos idealizados, utilizando geometrías simples (cilindros) y rodeadas por condiciones de contorno del tipo vacío. Esto hace que los resultados sean más fáciles de interpretar, pero no refleja de manera realista la estructura de un reactor ADS en funcionamiento, donde se encontrarían materiales estructurales, elementos de refrigeración y condiciones de contorno más complejas.

Además, se ha trabajado con una potencia computacional limitada, realizando las simulaciones en plataformas como Google Colab. Esto ha llevado a ejecutar un número relativamente bajo de

partículas por lote y de lotes totales (*batches*, alrededor de 20-100), lo que incrementa la incertidumbre estadística y disminuye la precisión de los parámetros extraídos, especialmente en los *tallies* diferenciados por núclido. Para obtener análisis cuantitativos con la precisión necesaria en la industria, se requerirían simulaciones más extensas, con un mayor número de *batches* y con millones de partículas por ciclo, algo más allá del alcance de este trabajo.

Otra simplificación importante ha sido el uso de una fuente externa de neutrones idealizada, representada por una distribución puntual de neutrones de 14MeV. Aunque esta elección permite simular la energía típica de los neutrones generados por espalación, no representa de manera detallada el espectro de la fuente ni su distribución espacial real, que dependería del diseño específico del blanco, del tipo de haz de protones y de la interacción con la estructura.

Adicionalmente, no se ha llevado a cabo un estudio de la evolución del combustible, lo que implica que la composición isotópica se mantiene constante a lo largo de toda la simulación. Esto dificulta la evaluación de la quema efectiva de actínidos, la generación de nuevos núclidos y la evolución del k_{eff} con el tiempo. Para realizar un estudio de *burnup* dependiente, sería necesario integrar herramientas como SERPENT.

Como sugerencias para mejorar en el futuro, se propone:

- Aumentar la estadística de partículas y *batches* para lograr una mayor precisión.
- Modelar entornos más realistas que incluyan moderadores, blindajes y materiales estructurales.
- Implementar la evolución isotópica del combustible.
- Simular fuentes externas más realistas o incluso acoplar un modelo de espalación.

Estas mejoras permitirían avanzar hacia un análisis más detallado y realista del rendimiento de combustibles MA en sistemas ADS, lo que tendría implicaciones más sólidas para el diseño de reactores del futuro.

Capítulo 7. CONCLUSIONES

7.1. Conclusiones del Trabajo

Este Trabajo de Fin de Grado aborda una comparativa de distintos combustibles nucleares destinados a sistemas subcríticos de tipo ADS, enfocándose en el comportamiento neutrónico, su capacidad para la transmutación y la eficacia de la fisión. Mediante simulaciones Monte Carlo con OpenMC, se analizaron a fondo cuatro composiciones diferentes, incluyendo un diseño rico en actínidos menores (INCAD-I) y tres opciones que mezclan americio y plutonio con diversas bases: uranio, torio y matrices inertes.

Los resultados revelan ciertas diferencias entre los combustibles estudiados. El Combustible A (INCAD-I), sin materiales fértiles y compuesto mayoritariamente por MAs, demostró una gran eficacia en la transmutación de estos, aunque con notables pérdidas por fuga. Por otro lado, el Combustible D (APZ) proporciona un equilibrio adecuado entre la fisión y la contención de neutrones, convirtiéndose entonces en una alternativa factible. Las versiones con matrices de uranio (APU) y torio (APT) exhiben un aprovechamiento energético más alto, aunque una menor eficiencia a la hora de eliminar actínidos vía transmutación.

Considerando el diseño base de los ADS, los resultados confirman que la selección del combustible debe alinearse con las metas del sistema: o dar prioridad a la reducción de desechos radiactivos o maximizar la generación energética. Además, destaca la importancia estudiada de mantener la subcriticidad dentro de un margen seguro (0,95 - 0,98), tal como sugiere la bibliografía experta (Sheffield, 2010), para garantizar tanto la eficiencia como la seguridad del sistema.

En un momento en que la transición energética exige fuentes más limpias, seguras y sostenibles, los ADS emergen como una tecnología con capacidad de contribuir a un modelo nuclear mucho más verde y responsable. Esta línea de investigación no solo abre la puerta a una nueva generación de reactores, sino también a una gestión más inteligente y eficiente tanto de los residuos radiactivos del pasado como de aquellos que está previsto generar.

7.2. Conclusiones Personales

Este proyecto me ha brindado la oportunidad de sumergirme de lleno en el estudio de sistemas nucleares de última generación, enfocándome especialmente en los desafíos técnicos y científicos inherentes al diseño y la simulación de sistemas ADS para la transmutación de desechos altamente radiactivos. Mediante el uso de herramientas como OpenMC, he logrado comprender de manera práctica cómo los diversos isótopos influyen en los parámetros del sistema, así como todas las restricciones impuestas tanto por la física nuclear como por las capacidades de computación y cálculo disponibles.

Además de la consolidación de las bases teóricas sobre fisión, subcriticidad y física neutrónica, esta tarea me ha permitido perfeccionar mis habilidades técnicas en simulación, análisis de datos y procesamiento de resultados. Como alumna, ha representado una ocasión única para aplicar los conocimientos adquiridos a lo largo de la carrera en un ámbito de mayor complejidad científica y tecnológica, con un impacto directo en los retos energéticos y ambientales que enfrentaremos en un futuro no muy lejano.

REFERENCIAS

- Abdullah, K. (2014). FUNDAMENTALS IN NUCLEAR PHYSICS. *University of Duhok Publication*.
- Abe, K., Iwasaki, T., & Tanigawa, Y. (2009). *A study of reactivity control by metallic hydrides for Accelerator Driven System*. International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Challenges and Opportunities (FR09) (ADS/P4-15), Kyoto, Japan. https://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/P1433_CD/datasets/papers/ads_p4-15.pdf
- Bécares, V., Villamarín, D., Fernández-Ordóñez, M., González-Romero, E. M., Berglöff, C., Bournos, V., Fokov, Y., Mazanik, S., & Serafimovich, I. (2013). Validation of ADS reactivity monitoring techniques in the Yalina-Booster subcritical assembly. *Annals of Nuclear Energy*, 53, 331-341. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2012.10.001>
- Blue Ribbon Commission on America's Nuclear Future. (2012). *Report to the Secretary of Energy*. U.S. Department of Energy. https://www.energy.gov/sites/default/files/2022-12/brc_finalreport_jan2012.pdf
- Bowman, C. D., Arthur, E. D., Lisowski, P. W., Lawrence, G. P., Jensen, R. J., Anderson, J. L., Blind, B., Cappiello, M., Davidson, J. W., England, T. R., Engel, L. N., Haight, R. C., Hughes, H. G., Ireland, J. R., Krakowski, R. A., LaBauve, R. J., Letellier, B. C., Perry, R. T., Russell, G. J., ... Wilson, W. B. (1992). Nuclear energy generation and waste transmutation using an accelerator-driven intense thermal neutron source. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 320(1-2), 336-367. [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(92\)90795-6](https://doi.org/10.1016/0168-9002(92)90795-6)
- Cai, L. (2014). *Condensation and homogenization of cross sections for the deterministic transport codes with Monte Carlo method: Application to the GEN IV fast neutron reactors* [Doctoral thesis, Université Paris-Sud]. <https://theses.hal.science/tel-01126922v1/document>
- Chadwick, M. B., Herman, M., Obložinský, P., Dunn, M. E., Danon, Y., Kahler, A. C., Smith, D. L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D. A., Capote, R., Carlson, A. D., Cho, Y. S., Derrien, H., Guber, K., Hale, G. M., Hoblit, S., ... Young, P. G. (2011). ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. *Nuclear Data Sheets*, 112(12), 2887-2996. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002>

- Cosgrove, P., Roulstone, T., & Zachary, S. (2023). Intermittency and periodicity in net-zero renewable energy systems with storage. *Renewable Energy*, 212, 299-307. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2023.04.135>
- De Bruyn, D., Abderrahim, H. A., Baeten, P., & Leysen, P. (2015). The MYRRHA ADS Project in Belgium Enters the Front End Engineering Phase. *Physics Procedia*, 66, 75-84. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2015.05.012>
- Haj Tahar, M. (2017). *High power ring methods and accelerator driven subcritical reactor application* [Doctoral thesis, Université Grenoble Alpes]. <https://doi.org/10.2172/1351800>
- Heuer, D., Merle-Lucotte, E., Allibert, M., Brovchenko, M., Ghetta, V., & Rubiolo, P. (2014). Towards the thorium fuel cycle with molten salt fast reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 64, 421-429. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2013.08.002>
- Hill, D., Van Tuyle, G., Beller, D., Bishop, B., Cotton, T., Finck, P., Halsey, B., Herczeg, J., Stephen Herring, J., Lancaster, D., March-Leuba, J., Ludewig, H., Sanders, T., Savage, B., Schweitzer, E., Smith, C., Stewart, L., Todosow, M., & Walter, C. (1999). *A roadmap for developing ATW technology: Systems scenarios & integration* (No. ANL-99/16). Argonne National Laboratory. <https://publications.anl.gov/anlpubs/1999/10/34037.pdf>
- Hossain, M. K., Taher, Md. A., & Das, M. K. (2015). Understanding Accelerator Driven System (ADS) Based Green Nuclear Energy: A Review. *World Journal of Nuclear Science and Technology*, 05, 287-302. <https://doi.org/10.4236/wjnst.2015.54028>
- IAEA. (2024). *NUCLEAR POWER REACTORS IN THE WORLD*. INTL ATOMIC ENERGY AGENCY. International Atomic Energy Agency. (2009). *Status of minor actinide fuel development* (No. STI/PUB/1415; IAEA Nuclear Energy Series No. NF-T-4.6). IAEA. <https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/Pub1415web.pdf>
- International Energy Agency. (2025). *Global Energy Review 2025*. <https://www.iea.org/reports/global-energy-review-2025>
- Junghans, A., Beyer, R., Grosse, E., Hannaske, R., Kögler, T., Massarczyk, R., Schwengner, R., & Wagner, A. (2014). Transmutation of high-level radioactive waste—Perspectives. En *Proceedings of the ERINDA Workshop, CERN, Geneva, Switzerland, 1–3 October 2013* (Enrico Chiaveri, pp. 175-181). <https://cds.cern.ch/record/1551982>
- Kapoor, S. S. (2002). Accelerator-driven sub-critical reactor system (ADS) for nuclear energy generation. *Pramana*, 59(6), 941-950. <https://doi.org/10.1007/s12043-002-0143-z>

- Leppänen, J. (2007). *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code* (No. VTT Publications 640). VTT Technical Research Centre of Finland. <https://publications.vtt.fi/pdf/publications/2007/P640.pdf>
- Li, Z., Cheng, P., Geng, H., Guo, Z., He, Y., Meng, C., Ouyang, H., Pei, S., Sun, B., Sun, J., Tang, J., Yan, F., Yang, Y., Zhang, C., & Yang, Z. (2013). Physics design of an accelerator for an accelerator-driven subcritical system. *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams*, 16(8), 080101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevSTAB.16.080101>
- Liebensteiner, M., Ocker, F., & Abuzayed, A. (2025). High electricity price despite expansion in renewables: How market trends shape Germany's power market in the coming years. *Energy Policy*, 198, 114448. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2024.114448>
- Liu, H., Khan, I., Zakari, A., & Alharthi, M. (2022). Roles of trilemma in the world energy sector and transition towards sustainable energy: A study of economic growth and the environment. *Energy Policy*, 170, 113238. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2022.113238>
- Luo, R., Revankar, S. T., & Zhao, F. (2021). Comparative Safety Analysis of Accelerator Driven Subcritical Systems and Critical Nuclear Energy Systems. *Applied Sciences*, 11, 8179. <https://doi.org/10.3390/app11178179>
- Martins, T., Castro Barreto, A., Mendonça Souza, F., & Mendonça Souza, A. (2021). Fossil fuels consumption and carbon dioxide emissions in G7 countries: Empirical evidence from ARDL bounds testing approach. *Environmental Pollution*, 291, 118093. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2021.118093>
- Nifenecker, H., David, S., Loiseaux, J. M., & Meplan, O. (2001). Basics of accelerator driven subcritical reactors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 463(3), 428-467. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(01\)00160-7](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(01)00160-7)
- OECD & Nuclear Energy Agency. (2020). *Management and Disposal of High-Level Radioactive Waste: Global Progress and Solutions*. OECD. <https://doi.org/10.1787/33f65af2-en>
- OpenMC Development Team. (2025). *OpenMC user's guide* (No. (Version 0.15.2)). <https://docs.openmc.org/en/stable/usersguide/index.html>
- Rief, H., & Takahashi, H. (1995). Safety and control of accelerator-driven subcritical systems. *AIP Conference Proceedings*, 346, 159-166. <https://doi.org/10.1063/1.49149>

- Romano, P. K., Horelik, N. E., Herman, B. R., Nelson, A. G., Forget, B., & Smith, K. (2015). OpenMC: A state-of-the-art Monte Carlo code for research and development. *Annals of Nuclear Energy*, 82, 90-97. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.07.048>
- Salvatores, M., Slessarev, I., Ritter, G., Fougeras, P., Tchistiakov, A., Youinou, G., & Zaetta, A. (1998). Long-lived radioactive waste transmutation and the role of accelerator driven (hybrid) systems. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 414(1), 5-20. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(98\)00522-1](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)00522-1)
- Sheffield, R. L. (2010). *Utilization of accelerators for transmutation and energy production*. HB2010 Workshop (High-Intensity and High-Brightness Hadron Beams) (MOIA01), Morschach, Switzerland. <https://accelconf.web.cern.ch/HB2010/papers/moia01.pdf>
- Shibata, K., Iwamoto, O., Nakagawa, T., Iwamoto, N., Ichihara, A., Kunieda, S., Chiba, S., Furutaka, K., Otuka, N., Ohsawa, T., Murata, T., Matsunobu, H., Zukeran, A., Kamada, S., & Katakura, J. (2011). JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 48(1), 1-30. <https://doi.org/10.1080/18811248.2011.9711675>
- Sobolev, V., Lemehov, S., Messaoudi, N., Van Uffelen, P., & Aït Abderrahim, H. (2003). Modelling the behaviour of oxide fuels containing minor actinides with urania, thorium and zirconia matrices in an accelerator-driven system. *Journal of Nuclear Materials*, 319, 131-141. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(03\)00145-4](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(03)00145-4)
- U.S. Department of Energy. (1993). *DOE fundamentals handbook: Nuclear physics and reactor theory (Vol. 2)* (No. DOE-HDBK-1019/2-93). https://www.energy.gov/sites/default/files/2022-12/doe_hdbk_1019-2-93.pdf
- Willis, B. T. M., & Carlile, C. J. (2009). *Experimental neutron scattering*. Oxford university press.
- X-5 Monte Carlo Team. (2008). *MCNP — A general Monte Carlo N-Particle transport code, version 5 (Vol. I: Overview and theory)* (No. LA-UR-03-1987). Los Alamos National Laboratory. https://mcnpx.lanl.gov/pdf_files/TechReport_2003_LANL_LA-UR-03-1987Revised212008_SwezyBoothEtAl.pdf
- Yan, S., Fang, H., Wang, P., Sun, C., Zhao, F., Huang, H., & Wu, Y. (2014). Modeling and control strategy of the China accelerator driven subcritical reactor. *Progress in Nuclear Energy*, 71, 179-187. <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2013.11.010>

- Yee-Rendón, B. (2022). *Overview of ADS Projects in the World* (M. Peter (Ed.), B. Graeme (Ed.), A. Robert (Ed.), & S. R.W. (Ed.) Volker, Eds.; Vol. LINAC2022, pp. 310-313) [PDF]. JACoW Publishing. <https://doi.org/10.18429/JACOW-LINAC2022-TU2AA01>
- Yoshiie, T., Fukumoto, K., Ishi, Y., Ito, D., Kuriyama, Y., Misawa, T., Mori, Y., Nagasaka, T., Nakajima, K., Oki, Y., Pyeon, C. H., Saito, Y., Sato, K., Shen, X. Z., Shibata, S., Uesugi, T., & Xu, Q. (2014). Studies on ADS as a neutron source at the Kyoto University Research Reactor Institute. *Journal of Nuclear Materials*, 450(1-3), 16-19. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2013.09.012>

ANEXO I - Código de Simulación en OpenMC

Este anexo contiene el código completo utilizado para la definición de los materiales, la geometría, la fuente neutrónica, los parámetros de simulación y los *tallies* correspondientes al Combustible C (o APT).

La estructura detallada el procedimiento indicado en la sección de metodología. Los otros escenarios evaluados en este proyecto solamente difieren en la composición del material combustible, por lo que su código será idéntico salvo en la definición de la composición química de este (ya que cada uno estará formado por los elementos indicados en su artículo de referencia).

El script se ejecuta en modo *eigenvalue* para el cálculo del valor de k_{eff} , y en modo *fixed source* para el análisis detallado de absorciones y fisiones por familia de isótopos.

I.1 Simulación en Modo *eigenvalue*

```
# -----  
# 3. Combustible C - APU (Am-Pu-Th)  
# -----  
fuel = openmc.Material(name='Combustible C - APT')  
  
# Americio (25%)  
fuel.add_nuclide('Am241', 0.25 * 0.84503)      #84.503% de Am  
fuel.add_nuclide('Am242_m1', 0.25 * 0.00247)  #0.247%  
fuel.add_nuclide('Am243', 0.25 * 0.1525)      #15.25%  
  
# Plutonio (25%)  
fuel.add_nuclide('Pu238', 0.25 * 0.0127)  
fuel.add_nuclide('Pu239', 0.25 * 0.6188)  
fuel.add_nuclide('Pu240', 0.25 * 0.2350)  
fuel.add_nuclide('Pu241', 0.25 * 0.0895)  
fuel.add_nuclide('Pu242', 0.25 * 0.0440)  
  
# Torio natural (50%)  
fuel.add_nuclide('Th232', 0.50)  
  
# Densidad total del material (según literatura)  
fuel.set_density('g/cm3', 10.21)  
  
materials = openmc.Materials([fuel])  
materials.export_to_xml()
```

```
# -----
# 2. Geometría: cilindro reflectivo
# -----
radius = openmc.ZCylinder(r=30.0, boundary_type='vacuum')
zmin = openmc.ZPlane(z0=-30.0, boundary_type='vacuum')
zmax = openmc.ZPlane(z0=30.0, boundary_type='vacuum')

fuel_region = -radius & +zmin & -zmax
fuel_cell = openmc.Cell(fill=fuel, region=fuel_region)

universe = openmc.Universe(cells=[fuel_cell])
geometry = openmc.Geometry(universe)
geometry.export_to_xml()

# -----
# 3. Fuente de neutrones
# -----
source = openmc.Source()
source.space = openmc.stats.Point((0.0, 0.0, 0.0))
source.energy = openmc.stats.Discrete([14e6], [1.0]) #14MeV

# -----
# 4. Settings
# -----
settings = openmc.Settings()
settings.batches = 100
settings.inactive = 10
settings.particles = 10000
settings.source = source
settings.run_mode = 'eigenvalue'

settings.export_to_xml()

# -----
# 5. Ejecutar
# -----
for fname in ["summary.h5", "statepoint.100.h5"]:
    if os.path.exists(fname):
        os.remove(fname)
if os.path.exists("tallies.xml"):
    os.remove("tallies.xml")

openmc.run()
```

I.2 Simulación en Modo *fixed source*

```
# -----  
# 3. Combustible C - APU (Am-Pu-Th)  
# -----  
fuel = openmc.Material(name='Combustible C - APT')  
  
# Americio (25%)  
fuel.add_nuclide('Am241', 0.25 * 0.84503)      #84.503% de Am  
fuel.add_nuclide('Am242_m1', 0.25 * 0.00247)  #0.247%  
fuel.add_nuclide('Am243', 0.25 * 0.1525)      #15.25%  
  
# Plutonio (25%)  
fuel.add_nuclide('Pu238', 0.25 * 0.0127)  
fuel.add_nuclide('Pu239', 0.25 * 0.6188)  
fuel.add_nuclide('Pu240', 0.25 * 0.2350)  
fuel.add_nuclide('Pu241', 0.25 * 0.0895)  
fuel.add_nuclide('Pu242', 0.25 * 0.0440)  
  
# Torio natural (50%)  
fuel.add_nuclide('Th232', 0.50)  
  
# Densidad total del material (según literatura)  
fuel.set_density('g/cm3', 10.21)  
  
materials = openmc.Materials([fuel])  
materials.export_to_xml()  
  
# -----  
# 2. Geometría: cilindro reflectivo  
# -----  
radius = openmc.ZCylinder(r=30.0, boundary_type='vacuum')  
zmin = openmc.ZPlane(z0=-30.0, boundary_type='vacuum')  
zmax = openmc.ZPlane(z0=30.0, boundary_type='vacuum')  
  
fuel_region = -radius & +zmin & -zmax  
fuel_cell = openmc.Cell(fill=fuel, region=fuel_region)  
fuel_universe = openmc.Universe(cells=[fuel_cell])  
geometry = openmc.Geometry(fuel_universe)  
geometry.export_to_xml()
```

```
# -----  
# 3. Fuente de neutrones  
# -----  
  
source = openmc.IndependentSource()  
source.space = openmc.stats.Point((0, 0, 0))  
source.angle = openmc.stats.Isotropic()  
source.energy = openmc.stats.Discrete([14e6], [1.0])  
  
# -----  
# 4. Settings  
# -----  
  
settings = openmc.Settings()  
settings.batches = 20  
settings.particles = 5000  
settings.source = source  
settings.run_mode = 'fixed source'  
settings.export_to_xml()  
  
# -----  
# 5. Tallies  
# -----  
  
fuel_filter = openmc.CellFilter(fuel_cell.id)  
  
ma_nuclides = ['Am241', 'Am242_m1', 'Am243']  
pu_nuclides = ['Pu238', 'Pu239', 'Pu240', 'Pu241', 'Pu242']  
  
# Flujo total  
flux_tally = openmc.Tally(name='flux')  
flux_tally.filters = [fuel_filter]  
flux_tally.scores = ['flux']  
  
# Fisión total  
fission_total = openmc.Tally(name='fission_total')  
fission_total.filters = [fuel_filter]  
fission_total.scores = ['fission']  
  
# Absorciones por familia  
abs_ma = openmc.Tally(name='absorption_MA')  
abs_ma.filters = [fuel_filter]  
abs_ma.nuclides = ma_nuclides  
abs_ma.scores = ['absorption']
```

```
abs_pu = openmc.Tally(name='absorption_Pu')
abs_pu.filters = [fuel_filter]
abs_pu.nuclides = pu_nuclides
abs_pu.scores = ['absorption']

# Fisión y absorción por MA+Pu
fisscap_mapu = openmc.Tally(name='fission_capture_MA_Pu')
fisscap_mapu.filters = [fuel_filter]
fisscap_mapu.nuclides = ma_nuclides + pu_nuclides
fisscap_mapu.scores = ['fission', 'absorption']

tallies = openmc.Tallies([
    flux_tally, fission_total,
    abs_ma, abs_pu, fisscap_mapu
])
tallies.export_to_xml()

# -----
# 5. Ejecutar
# -----
for fname in ["summary.h5", "statepoint.20.h5"]:
    if os.path.exists(fname):
        os.remove(fname)

openmc.run()
```

[PÁGINA INTENCIONADAMENTE EN BLANCO]