

---

# Simulación de un núcleo del reactor de investigación simplificado

---

Pedro Jose Camposeco Ovalle





UNIVERSIDAD DEL VALLE DE GUATEMALA  
Facultad de Ciencias y Humanidades

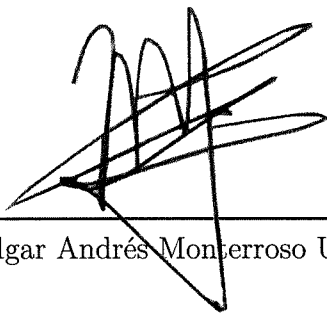


## **Simulación de un núcleo del reactor de investigación simplificado**

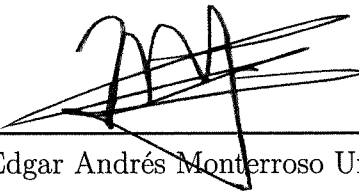
Trabajo de graduación presentado por Pedro Jose Camposeco Ovalle  
para optar al grado académico de Licenciado en Física

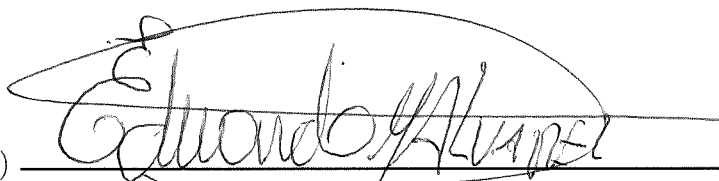
Guatemala,  
2025

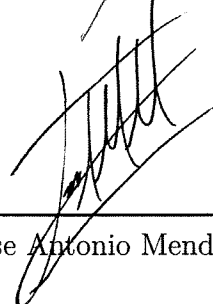
Vo.Bo.:

(f)   
MSc. Edgar Andrés Monterroso Urrutia

Tribunal Examinador:

(f)   
MSc. Edgar Andrés Monterroso Urrutia

(f)   
MSc. Eduardo Martín Álvarez Massis

(f)   
MSc. Jose Antonio Mendez Giono

Fecha de aprobación: Guatemala, 20 de Junio del 2025

---

## Agradecimientos

---

- Deseo expresar mi agradecimiento al MSc. Eduardo Álvarez Massis, director de carrera, por su apoyo, orientación y confianza en la realización de este trabajo. Sus consejos han sido de mucha ayuda para estructurar la investigación.
- Muestro mi gratitud al MSc. Edgar Andrés Monterroso Urrutia, mi asesor de tesis, por su paciencia, sugerencias y dedicación al revisar minuciosamente cada detalle. Su experiencia, exigencia académica, que me motivaron a alcanzar la calidad que este estudio requiere.
- A mi madre, Mónica Lorena Ovalle, agradezco su amor incondicional, su solidaridad y sus palabras de ánimo en los momentos de dificultad; fueron necesarios para persistir hasta terminar este proyecto.
- A mi padre, Pedro José Camposeco, le estoy agradecido por enseñarme a esforzarme y ser disciplinado. Sus consejos y apoyo constante me dieron la confianza para superar los retos que surgieron en el camino.

# Índice

Prefacio	III
Lista de símbolos	VI
Índice de tablas	VIII
Índice de figuras	IX
Resumen	x
Abstract	1
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Contexto y justificación . . . . .	1
1.2 Objetivos de la investigación . . . . .	2
1.2.1 Objetivos generales . . . . .	2
1.2.2 Objetivos específicos . . . . .	2
1.3 Conceptos básicos . . . . .	3
1.3.1 Reactor de investigación . . . . .	3
1.3.2 Densidad de neutrones . . . . .	4
1.3.3 Fuentes externas . . . . .	4
1.3.4 Espectro de nacimiento de neutrones . . . . .	5
1.3.5 Factor de multiplicación de neutrones . . . . .	6
1.3.6 Flujo de neutrones . . . . .	7
1.3.7 Fotofisión . . . . .	7
1.3.8 Tasa de reacción . . . . .	7
1.3.9 Reacción (n,in) . . . . .	8
1.3.10 Ácido bórico . . . . .	9
1.3.11 Factor de multiplicación efectivo . . . . .	9
1.3.12 Pandeo geométrico . . . . .	10
<b>2 Marco teórico</b>	<b>11</b>
2.1 Fundamentos físicos . . . . .	11
2.1.1 Sección eficaz microscópica . . . . .	11
2.1.2 Sección eficaz macroscópica . . . . .	12
2.1.3 Coeficiente de difusión . . . . .	13
2.1.4 Probabilidad de dispersión . . . . .	14
2.1.5 Reacciones de fisión . . . . .	16

---

2.1.6	Grupos de energía . . . . .	17
2.1.7	Corriente de neutrones . . . . .	18
2.1.8	Ley de difusión de Fick . . . . .	18
2.1.9	Ecuaciones de transporte y difusión de neutrones . . . . .	19
2.1.10	Modelo de un grupo . . . . .	24
2.1.11	Reactor de placa unidimensional . . . . .	27
2.1.12	Modelo de dos grupos . . . . .	29
2.1.13	Reactor de geometría cilíndrica . . . . .	30
2.2	Reactores de investigación TRIGA . . . . .	33
2.2.1	Diseño y características . . . . .	33
2.2.2	Importancia y usos . . . . .	34
2.3	Modelado y simulación en física nuclear . . . . .	35
2.3.1	Métodos de Monte Carlo . . . . .	35
2.3.2	Herramientas y software de simulación . . . . .	36
2.4	Geant4 . . . . .	36
2.4.1	Descripción y aplicaciones . . . . .	36
2.4.2	Componentes y módulos relevantes . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Metodología</b>	<b>39</b>
3.1	Parámetros y variables clave . . . . .	39
3.2	Implementación del modelo analítico . . . . .	40
3.3	Diseño de la simulación . . . . .	43
3.3.1	Esquemáticos del reactor y componentes simulados . . . . .	43
3.3.2	Simplificaciones y supuestos . . . . .	44
3.3.3	Detalles de la implementación en Geant4 . . . . .	45
3.4	Flujo de ejecución del código de simulación . . . . .	46
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>49</b>
4.1	Presentación de los resultados . . . . .	49
4.2	Discusión de resultados . . . . .	50
4.2.1	Análisis de resultados . . . . .	50
4.2.2	Limitaciones del estudio . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>53</b>
<b>6</b>	<b>Recomendaciones</b>	<b>54</b>
<b>7</b>	<b>Referencias</b>	<b>55</b>
<b>8</b>	<b>Anexos</b>	<b>58</b>
8.1	Cálculos . . . . .	58
8.2	Simulación . . . . .	70

---

Lista de símbolos

---

Símbolo	Descripción
$N(r, t)$	Densidad de neutrones en función de la posición y tiempo (neutrones/cm <sup>3</sup> )
$N(r, E, t)$	Densidad de neutrones dependiente de energía y posición
$n(r, E, \Omega, t)$	Densidad angular de neutrones
$S(r, t)$	Fuente externa de neutrones
$S(r, E, t)$	Fuente externa dependiente de energía
$S(r, E, \Omega, t)$	Fuente externa dependiente de energía y dirección
$\chi(E)$	Espectro de nacimiento de neutrones
$\Upsilon(E)$	Número promedio de neutrones generados por fisión a energía $E$ (aprox. 2.34)
$v$	Velocidad de los neutrones (cm/s)
$\phi(r, t)$	Flujo neutrónico escalar (neutrones/cm <sup>2</sup> s)
$\Phi(r, E, \Omega, t)$	Flujo neutrónico angular dependiente de posición, energía y dirección
$\sigma$	Sección eficaz microscópica total (cm <sup>2</sup> )
$\sigma_s$	Sección eficaz microscópica de dispersión
$\sigma_a$	Sección eficaz microscópica de absorción
$\sigma_f$	Sección eficaz microscópica de fisión
$\sigma_{n,in}$	Sección eficaz para reacciones tipo $(n, in)$
$\sigma_{tr}$	Sección eficaz microscópica de transporte
$\Sigma$	Sección eficaz macroscópica total
$\Sigma_a$	Sección eficaz macroscópica de absorción
$\Sigma_s$	Sección eficaz macroscópica de dispersión
$\Sigma_f$	Sección eficaz macroscópica de fisión
$\lambda$	Longitud libre media (cm)
$RR$	Tasa de reacción nuclear
$J, \vec{J}$	Corriente neutrónica (escalar o vectorial)
$D$	Coefficiente de difusión
$\nabla\phi$	Gradiente del flujo neutrónico escalar

---

<b>Símbolo</b>	<b>Descripción</b>
$\nabla^2 \phi$	Laplaciano del flujo neutrónico escalar
$k_{\text{eff}}$	Factor efectivo de multiplicación de neutrones
$B_g^2$	Pandeo geométrico (curvatura del flujo neutrónico)
$\mu_0$	Promedio del coseno del ángulo de dispersión
$\lambda_{tr}$	Longitud media de transporte
$\Sigma_{tr}$	Sección eficaz macroscópica de transporte
$F(E' \rightarrow E)$	Función de probabilidad de dispersión de energía

---

---

## Índice de tablas

---

Tabla 1. Reactores nucleares de investigación destacados. . . . .	3
Tabla 2. Ganancias y pérdidas en el modelo de dos grupos. . . . .	29
Tabla 3. Propiedades físicas y secciones eficaces microscópicas de los compuestos evaluados . . . . .	39
Tabla 4. Dimensiones del núcleo del reactor de diseño TRIGA MKII . . . . .	40
Tabla 5. Densidades atómicas, secciones eficaces macroscópicas y coeficientes de difusión. . . . .	42
Tabla 6. Parámetros globales de sección eficaz y difusión utilizados en el modelo analítico. . . . .	42
Tabla 7. Resultados promedio de las 20 corridas independientes de la simulación. .	48
Tabla 8. Resultados de la simulación Monte Carlo de número de neutrones pro- ducidos en un reactor de investigación simplificado en Geant4 para las corridas 1 a 20. . . . .	48

---

## Índice de figuras

---

Figura 1. Representación gráfica de la densidad de neutrones. . . . .	5
Figura 2. Esquema del proceso de fisión nuclear. . . . .	16
Figura 3. Distribución de la energía cinética de los neutrones en dos grupos en un átomo de Uranio. . . . .	25
Figura 4. Representación del flujo de neutrones en una placa unidimensional. . . .	27
Figura 5. Representación del flujo de neutrones en un cilindro bidimensional. . . .	31
Figura 6. Esquemático simplificado del núcleo del reactor y su entorno simulado. . .	43
Figura 7. Diagrama de flujo . . . . .	71

Esta tesis desarrolla, por primera vez en Guatemala, un modelo matemático y una simulación Monte Carlo del núcleo de un reactor de investigación simplificado, con el propósito de sentar las bases para un programa nuclear nacional de aplicaciones pacíficas. Se implementó un modelo analítico de difusión en estado estacionario, empleando dos grupos de energía (rápidos y térmicos) y una geometría homogénea, omitiendo efectos transitorios y la presencia de neutrones retardados, con el fin de facilitar el cálculo de la criticidad efectiva ( $K_{\text{eff}}$ ).

En paralelo, se diseñó y ejecutó una simulación en Geant4, modelando el combustible y el moderador, junto con ácido bórico, como medios homogéneos. La operación se segmentó en 20 corridas de 15 segundos cada una, a fin de sortear las limitaciones de memoria, para luego procesar los datos mediante un script externo (`calc_k.py`).

El modelo analítico predijo un valor de  $K_{\text{eff}} = 1$  en condiciones ideales, mientras que la simulación Monte Carlo arrojó un valor medio de  $K_{\text{eff}} \approx 0.94132$  con una desviación estándar de  $2.40 \times 10^{-5}$ , lo cual representa un sesgo subcrítico del 5.9 %, considerado aceptable dada la simplificación del modelo y que, además, ofrece mayor estabilidad operativa en reactores de investigación.

Estos resultados validan cualitativamente el enfoque propuesto y proporcionan una base sólida para el desarrollo de capacidades nacionales en simulación de reactores nucleares. Se recomienda la implementación de modelos multigrupos más detallados, la incorporación de condiciones dinámicas de operación y la simulación de transitorios de reactividad, a fin de evaluar la respuesta del reactor frente a perturbaciones.

**Palabras clave:** reactor de investigación; simulación Monte Carlo; modelo de difusión de neutrones; factor de multiplicación efectivo ( $K_{\text{eff}}$ ); Geant4; dos-grupos de energía.

The present thesis constitutes Guatemala’s first effort to develop both a steady-state analytical model and a Monte Carlo simulation of a simplified research-reactor core, with the strategic aim of establishing the foundations for a national program in peaceful nuclear applications. The research underscores the importance of technological and energy sovereignty by enabling domestic capabilities for reactor design, analysis and optimization without exclusive reliance on external resources.

To achieve these aims, the author defined four general objectives: (1) implement a simplified reactor model focused on steady-state behavior and excluding transient effects; (2) compare simulation outputs with analytical calculations; (3) compute the effective neutron-multiplication coefficient ( $K_{\text{eff}}$ ) analytically under stationary conditions; and (4) explicate the application of neutron-transport and diffusion equations within a critical reactor context. Specific objectives included creating a computational model paralleling the analytical framework, simulating key core components (fuel, moderator and boric acid) under the assumption of fresh, homogeneous fuel, and introducing the peaceful uses of nuclear technologies in Guatemala.

Methodologically, the study employed a two-group diffusion model in homogeneous geometry, deliberately omitting delayed neutrons and transient phenomena to simplify the calculation of  $K_{\text{eff}}$ . In parallel, a Monte Carlo simulation was executed in Geant4 (Geometry And Tracking), where the fuel, moderator and dissolved boric acid were treated as uniform media. The simulation was divided into twenty independent runs of 15 seconds each to navigate memory limitations, with subsequent data processing performed via an external script (`calc_k.py`).

Analytically, the model predicted an ideal  $K_{\text{eff}} = 1.00$ , whereas the Monte Carlo approach yielded an average  $K_{\text{eff}} = 0.94132$  with a standard deviation of  $2.40 \times 10^{-5}$ . This result corresponds to a 5.9% subcritical bias, deemed acceptable given the model’s simplifications and advantageous for ensuring operational stability in research reactors.

---

Ultimately, the findings qualitatively validate the proposed modeling approach and furnish a robust basis for advancing national simulation capabilities in nuclear-engineering research. For future investigations, the thesis recommends extending the model to multipronged energy-group formulations, incorporating dynamic operational conditions, and simulating reactivity transients to assess reactor response under perturbations.

**Keywords:** research reactor; Monte Carlo simulation; neutron diffusion model; effective multiplication factor ( $K_{\text{eff}}$ ); Geant4; two-energy-group approximation.

### 1.1. Contexto y justificación

En esta investigación se desarrolla un modelo computacional del núcleo de un reactor nuclear de investigación en condiciones simplificadas, así como el modelo matemático simplificado. Este trabajo se enmarca en el campo de la física de reactores, especializándose en simulación y modelado de reactores. El objetivo es desarrollar el modelo matemático que incluya la ecuación de transporte y difusión de neutrones, así como desarrollar la simulación del núcleo de un reactor nuclear simplificado para evaluar la efectividad y precisión de las simplificaciones en modelado. Esta evaluación se realiza mediante la medición del coeficiente efectivo de multiplicación de neutrones ( $K_{\text{eff}}$ ), esencial para garantizar la operación del reactor en condiciones estables. El estudio se basa en el análisis de la población de neutrones, incorporando la ecuación de transporte de neutrones y la ecuación de difusión de neutrones, aplicadas al contexto de un reactor nuclear.

Se modelan elementos de combustible con ácido bórico como elemento moderador, replicados a lo largo del reactor. Estos modelos asumen un combustible “fresco” y homogéneo, que requieren conocimiento detallado sobre la composición de los elementos que interactúan con los neutrones. Este enfoque no solo facilita una validación efectiva del modelo simplificado, sino que también garantiza una representación precisa de los componentes esenciales del reactor.

Los modelos de flujo del reactor se simplifican y se centran en la dinámica de estado estacionario, omitiendo efectos transitorios y las condiciones de arranque o parada. Para la simulación, se emplea Geant4 (Geometry And Tracking), un conjunto de herramientas para la simulación del paso de partículas a través de la materia, utilizando método Monte Carlo.

---

Todo país que tenga un programa nuclear con el objetivo de generar energía tiene un programa de simulación propio para poder hacer simulaciones y experimentos antes de llevarlos a cabo en un reactor físico. Por lo cual me doy a la tarea de generar la primera simulación de un reactor nuclear de investigación para la nación de Guatemala y poder dar los primeros pasos para el desarrollo de un programa nuclear nacional que ayude en el desarrollo no solo tecnológico y científico, sino también de infraestructura energética. Esta investigación también será beneficiosa para cualquier estudiante de pregrado interesado en entender la física de reactores nucleares.

El desarrollo de capacidades nacionales en el tema de la simulación de reactores nucleares es de una importancia estratégica, pues contar con herramientas propias para el análisis, el diseño y la optimización de proyectos energéticos asegura una mayor independencia tecnológica y una soberanía energética más sólida. Al no depender exclusivamente de recursos y tecnologías externas, el país puede adaptar sus estrategias a las necesidades y condiciones locales. Asimismo, disponer del primer entorno de simulación en este campo ayuda al crecimiento en el sector académico y científico, sentando las bases para un futuro crecimiento en la investigación energética sostenible a largo plazo.

## **1.2. Objetivos de la investigación**

### **1.2.1. Objetivos generales**

1. Implementar un modelo del reactor simplificado, centrado en el comportamiento en estado estacionario y omitiendo efectos transitorios.
2. Comparar los resultados obtenidos en la simulación con los cálculos obtenidos en el modelo analítico.
3. calcular el coeficiente efectivo de multiplicación de neutrones ( $K_{\text{eff}}$ ) por el modelo analítico en condiciones estacionarias.
4. Explicar la aplicación de la ecuación de transporte y la ecuación de difusión de neutrones en el contexto de un reactor nuclear en estado crítico.

### **1.2.2. Objetivos específicos**

1. Crear un modelo computacional el cual se compara con un modelo analítico del núcleo del reactor nuclear de investigación.
2. Simular los componentes clave del núcleo del reactor como el elemento de combustible y el moderador, asumiendo combustible fresco homogéneo.
3. Introducir en Guatemala la investigación de los usos pacíficos de las tecnologías nucleares.

---

## 1.3. Conceptos básicos

### 1.3.1. Reactor de investigación

Los reactores de investigación a diferencia de los reactores de potencia, no se emplean para producir electricidad. Su función principal es generar un flujo intenso de neutrones que se use en múltiples aplicaciones, como la investigación científica o la producción de radioisótopos.

Estos reactores suelen ser de baja a mediana potencia en el orden de kilovatios como se observa en la tabla 1, muy por debajo de la de un reactor de potencia típico que esta en torno a miles de MWt, no están diseñados para producir energía eléctrica de forma rentable; más bien consumen energía, tienden a ser más simples y operan a temperaturas más bajas que los reactores de potencia y Usan menos combustible y generan menos productos de fisión [1].

**Tabla 1.** Reactores nucleares de investigación destacados.[2][3][4][5][6][7][8][9][10][11]

Nombre del reactor	Potencia (MW)	Usos principales
HFR (High Flux Reactor)	58	Generación de neutrones de alto flujo para física de neutrones
TRIGA Mark II	0.25 - 2	Capacitación e investigación básica en física y medicina nuclear
FRM II (Heinz Maier-Leibnitz)	20	Fuente de neutrones para investigaciones en física e ingeniería, producción de radioisótopos
MITR (MIT Reactor)	6	Investigación en física nuclear y ciencia de materiales
HFIR (High Flux Isotope Reactor)	85	Producción de isótopos médicos/industriales e irradiación de materiales
OPAL	20	Producción de radioisótopos e investigación en análisis de materiales
BR2 (Belgian Reactor 2)	100	Producción de radioisótopos e investigación científica
MARIA	30	Producción de radioisótopos e investigación en ciencia de materiales
JRR-3 (Japan Research Reactor)	20	Dispersión de neutrones e investigación nuclear
RA-3	10	Producción de radioisótopos e investigación nuclear

---

### 1.3.2. Densidad de neutrones

La densidad de neutrones describe cómo se distribuyen los neutrones dentro del núcleo de un reactor nuclear. Para su análisis, se comienza considerando el movimiento de los neutrones en el núcleo y las interacciones que experimentan.

Matemáticamente, la densidad de neutrones se expresa como:

$$N(\vec{r}, t) d^3r \quad (1.1)$$

donde  $d^3r$  representa el elemento diferencial de volumen en el espacio real, es decir, un pequeño cubo alrededor de la posición  $\vec{r}$ , como se muestra en la Figura 1. Si además se considera que la densidad de neutrones depende de la energía  $E$ , la expresión se generaliza de la siguiente forma:

$$N(\vec{r}, E, t) d^3r dE \quad (1.2)$$

Para describir completamente el estado de un neutrón, es necesario especificar su posición  $\vec{r}$ , su energía  $E$ , su dirección de movimiento  $\vec{\Omega}$  y el instante de tiempo  $t$ . Esto motiva la definición de la densidad neutrónica angular,  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , la cual depende de todas estas variables:

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^3r dE d\Omega \quad (1.3)$$

Esta función indica la cantidad esperada de neutrones dentro de un volumen diferencial  $d^3r$ , con energías comprendidas entre  $E$  y  $E + dE$ , que se desplazan en la dirección  $\vec{\Omega}$  dentro de un ángulo sólido  $d\Omega$ , en el tiempo  $t$ , como se muestra en la Figura 1 [12].

### 1.3.3. Fuentes externas

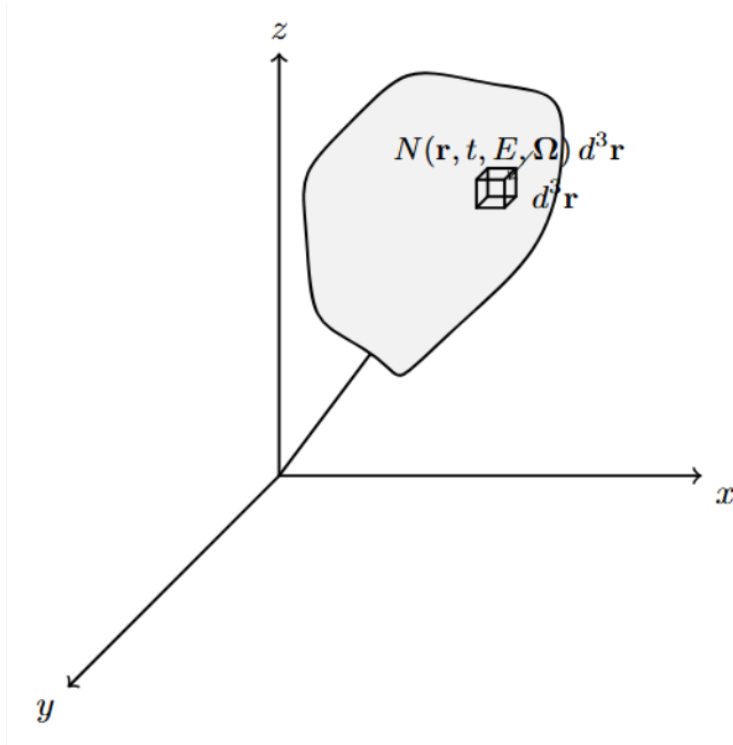
Las fuentes externas de neutrones se describen de manera análoga a la densidad de neutrones dentro del núcleo. Para ello, se introduce una variable que representa la distribución espacial, energética y direccional de los neutrones provenientes de fuentes externas, tales como el Californium-252, el Americio-241, o incluso partículas cósmicas.

Matemáticamente, la densidad de fuentes externas de neutrones puede expresarse como:

$$S(\vec{r}, t) d^3r \quad (1.4)$$

Al igual que en el caso de la densidad de neutrones, esta magnitud se interpreta de manera estadística, empleando valores promedio en lugar de determinaciones exactas. Asimismo, se puede extender su definición para incorporar la dependencia en energía, resultando en:

**Figura 1.** Representación gráfica de la densidad de neutrones.



$$S(\vec{r}, E, t) d^3r dE \quad (1.5)$$

Para describir de forma completa el estado de un neutrón proveniente de una fuente externa, es necesario especificar su posición  $\vec{r}$ , su energía  $E$ , su dirección de movimiento  $\vec{\Omega}$  y el instante de tiempo  $t$ . De este modo, la expresión:

$$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d^3r dE d\Omega \quad (1.6)$$

representa la cantidad esperada de neutrones externos en un volumen diferencial  $d^3r$  alrededor de  $\vec{r}$ , con energías comprendidas entre  $E$  y  $E + dE$ , desplazándose en la dirección  $\vec{\Omega}$  dentro de un ángulo sólido  $d\Omega$ , en el instante  $t$  [12].

#### 1.3.4. Espectro de nacimiento de neutrones

El espectro de nacimiento de neutrones describe la distribución de energías con las cuales los neutrones son emitidos inmediatamente después de un proceso nuclear generador, típicamente la fisión de núcleos pesados como el uranio o el plutonio. Estos neutrones, denominados *neutrones de nacimiento*, suelen poseer energías del orden de 1 a 2 MeV, aunque la distribución completa abarca desde fracciones de MeV hasta varios MeV.

---

La forma exacta de este espectro depende de varios factores, incluyendo el tipo de núcleo que experimenta la fisión y, en el caso de fisión inducida, de la energía incidente del neutrón que provoca la reacción. En procesos de fisión espontánea, las condiciones internas del núcleo en el momento de la ruptura determinan las características del espectro resultante.

Matemáticamente, el espectro de nacimiento se representa mediante la función  $\chi(E)$ , que describe la probabilidad diferencial de emisión de un neutrón con energía  $E$ :

$$\chi(E) = \text{probabilidad de emisión de un neutrón con energía } E \quad (1.7)$$

Esta función constituye un insumo esencial en los cálculos de transporte de neutrones y en la evaluación del comportamiento crítico de un reactor nuclear [13].

### 1.3.5. Factor de multiplicación de neutrones

La multiplicidad de neutrones, definida como el número promedio de neutrones liberados durante cada reacción de fisión, es un parámetro fundamental en la explicación de las reacciones nucleares en cadena. Este fenómeno resulta esencial en el diseño de reactores nucleares, ya que determina la capacidad del sistema para sostener y controlar la potencia generada.

Por ejemplo, en el caso del uranio-235, la emisión promedio de neutrones por fisión se encuentra entre 2 y 3 neutrones, lo que permite mantener una reacción en cadena crítica al equilibrar el número de neutrones producidos con aquellos que se pierden por absorción, fuga u otros procesos no productivos.

La multiplicidad de neutrones influye directamente en la configuración geométrica y material del reactor. Factores como la composición del combustible, la presencia de moderadores y reflectores, así como la implementación de mecanismos de control (barras de control, ácido bórico, entre otros), dependen en gran medida del conocimiento detallado de cómo varía este parámetro.

La emisión media de neutrones por fisión determina el comportamiento de la población neutrónica dentro del núcleo del reactor, afectando tanto la potencia generada como la distribución del espectro energético y la eficiencia de conversión de la energía nuclear en calor aprovechable.

Matemáticamente, la cantidad promedio de neutrones emitidos por fisión se representa mediante la función  $\Upsilon(E)$ , la cual depende de la energía incidente  $E$  del neutrón que induce la fisión:

$$\Upsilon(E) = \text{número promedio de neutrones liberados por fisión inducida de energía } E \quad (1.8)$$

Para el caso del uranio-235, el valor medio de  $\Upsilon(E)$  se aproxima a 2.34 neutrones por fisión [14].

---

### 1.3.6. Flujo de neutrones

La cantidad de flujo de neutrones se define como el producto de la velocidad de los neutrones  $v$  y su densidad  $N(\vec{r}, t)$ , es decir:

$$\phi(\vec{r}, t) = v N(\vec{r}, t) \quad (1.9)$$

Esta magnitud, denominada *flujo neutrónico*, tiene unidades de  $[\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}]$ . A diferencia de los flujos en electromagnetismo o transferencia de calor, que son cantidades vectoriales, en ingeniería nuclear el flujo neutrónico  $\phi(\vec{r}, t)$  se maneja como una cantidad escalar. Por este motivo, resulta más apropiado tratarlo como una variable matemática que facilita el cálculo de tasas de reacción, en lugar de interpretarlo directamente como un flujo vectorial.

Para una descripción más completa del estado cinemático de los neutrones, es necesario considerar su posición  $\vec{r}$ , su energía  $E$ , su dirección de movimiento  $\vec{\Omega}$  y el instante de tiempo  $t$ . Esta representación más detallada permite formular ecuaciones que describen el comportamiento diferencial de los neutrones, como la ecuación de transporte de neutrones.

A partir de la función de densidad neutrónica angular  $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , se define el flujo neutrónico angular, dado por:

$$\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (1.10)$$

Esta función proporciona una medida de la cantidad de neutrones por unidad de área, por unidad de energía y por unidad de ángulo sólido, desplazándose en una dirección específica, en el tiempo  $t$  [12].

### 1.3.7. Fotofisión

La fotofisión ocurre cuando electrones de alta energía se frenan rápidamente al interactuar con partículas pesadas, provocando la emisión de radiación gamma intensa conocida como *bremsstrahlung* o radiación de frenado. Esta radiación gamma puede superar la energía de enlace de los neutrones en el material, provocando reacciones nucleares que generan neutrones. En materiales físiiles, además, esta radiación puede inducir directamente procesos de fisión nuclear [15].

### 1.3.8. Tasa de reacción

La tasa de reacción, o *Reaction Rate* (RR), describe el número de interacciones nucleares que ocurren por unidad de tiempo en un volumen dado. Se trata de un valor estadístico que se basa en valores promedio, ya que la densidad real de neutrones suele fluctuar alrededor de una media.

---

Asumiendo que todos los neutrones en una región se mueven con la misma velocidad  $v$ , la frecuencia con que un neutrón sufre una determinada reacción nuclear puede representarse como  $v \Sigma$ , donde  $\Sigma$  es la sección eficaz macroscópica. El producto  $v \Sigma$  indica el promedio de cuántas reacciones experimenta un neutrón por unidad de distancia recorrida.

En un punto  $\vec{r}$  y un instante  $t$  determinados, la densidad de tasa de reacción  $RR(\vec{r}, t)$  se define como:

$$RR(\vec{r}, t) = v \Sigma N(\vec{r}, t) \quad (1.11)$$

donde  $N(\vec{r}, t)$  representa la densidad de neutrones (en unidades de neutrones/cm<sup>3</sup>). Así,  $RR(\vec{r}, t)$  expresa el número esperado de reacciones que tienen lugar en el volumen diferencial  $d^3r$  alrededor de  $\vec{r}$  en el instante  $t$ .

Dado que la velocidad  $v$  y la sección eficaz  $\Sigma$  pueden depender de la energía de los neutrones, se generaliza la expresión para la tasa de reacción dependiente de la energía:

$$RR(\vec{r}, E, t) d^3r dE = v \Sigma(\vec{r}, E) N(\vec{r}, E, t) d^3r dE \quad (1.12)$$

donde  $N(\vec{r}, E, t)$  representa la densidad de neutrones con energías entre  $E$  y  $E + dE$ .

Dado que el flujo de neutrones  $\phi$  se define como:

$$\phi(\vec{r}, t) = v N(\vec{r}, t) \quad (1.13)$$

y su versión dependiente de la energía es:

$$\phi(E) = v N(E) \quad (1.14)$$

[12], la tasa de reacción también puede expresarse como:

$$RR = \phi \Sigma = \phi N \sigma \quad (1.15)$$

donde  $\sigma$  representa la sección eficaz microscópica (en cm<sup>2</sup>) y su relación con  $\Sigma$  se establece mediante  $\Sigma = N \sigma$ .

### 1.3.9. Reacción (n,in)

Las reacciones ( $n, in$ ) ocurren cuando un neutrón interactúa con un núcleo y, además de liberar energía, produce la emisión de  $i$  neutrones adicionales en los productos de la reacción. Aunque en principio no existe un límite estricto para el número de neutrones  $i$  que pueden ser emitidos, la probabilidad de ocurrencia disminuye notablemente a medida que  $i$  aumenta.

---

Debido a esta disminución de probabilidad, resulta práctico centrarse en el análisis de los primeros cuatro procesos más relevantes:  $(n, n)$ ,  $(n, 2n)$ ,  $(n, 3n)$  y  $(n, 4n)$ . Para valores superiores de  $i$ , la probabilidad de emisión se vuelve extremadamente baja y, en la mayoría de los casos, despreciable desde el punto de vista práctico [12].

### 1.3.10. Ácido bórico

El ácido bórico es ampliamente utilizado en reactores de investigación para regular la radiactividad del núcleo. Su uso generalizado se debe a su alta sección eficaz de absorción de neutrones, que permite ajustar de manera precisa la cantidad de neutrones disponibles para sostener la reacción en cadena al disolverse en el agua del refrigerante o del moderador.

Esta propiedad resulta especialmente útil en reactores de investigación, donde el control fino de la potencia es crítico para la realización de experimentos a bajas potencias. La incorporación de ácido bórico permite compensar variaciones en la radiactividad sin necesidad de recurrir a cambios mecánicos en la configuración del reactor, facilitando así una operación más flexible y segura.

Además, el ácido bórico se integra fácilmente en los sistemas de refrigeración, ofreciendo una forma confiable para controlar la tasa de fisión en entornos de investigación nuclear [12, 16].

### 1.3.11. Factor de multiplicación efectivo

El factor de multiplicación efectivo,  $k_{\text{eff}}$ , describe cómo evoluciona la población de neutrones de una generación a la siguiente en un sistema multiplicador finito. Para que la reacción en cadena se sostenga por sí misma, se requiere que, en promedio, cada fisión origine al menos un neutrón que provoque otra fisión. De esta manera, el número de reacciones por unidad de tiempo permanece constante [17].

El valor de  $k_{\text{eff}}$  determina el estado crítico del sistema:

- $k_{\text{eff}} < 1$  (estado subcrítico): la cantidad de neutrones y de reacciones de fisión disminuye progresivamente con el tiempo.
- $k_{\text{eff}} = 1$  (estado crítico): el número de neutrones y de reacciones de fisión se mantiene constante, logrando una reacción en cadena autosostenida.
- $k_{\text{eff}} > 1$  (estado supercrítico): el sistema produce más neutrones de los necesarios para sostener la reacción, provocando un incremento exponencial en la población de neutrones y en la tasa de fisión.

---

### 1.3.12. Pandeo geométrico

v En contraste, el pandeo de material describe el balance entre la producción y la absorción de neutrones.

En condiciones de criticidad, ambos parámetros deben igualarse, estableciendo la siguiente condición:

$$B_m = B_g \tag{1.16}$$

donde  $B_m$  es el pandeo de material y  $B_g$  el pandeo geométrico.

Cuando se habla de  $B_g^2$ , este se interpreta como la curvatura relativa negativa del flujo neutrónico, expresada como  $\nabla^2\Phi(x)/\Phi(x)$ . En reactores de tamaño pequeño, el flujo adquiere una curvatura más pronunciada, lo que implica un valor de  $B_g^2$  mayor en comparación con reactores de mayor tamaño [18].

## 2.1. Fundamentos físicos

### 2.1.1. Sección eficaz microscópica

La sección eficaz microscópica ( $\sigma$ ) es una medida de la probabilidad de que ocurra una interacción entre un neutrón y un núcleo. Representa el área efectiva de un neutrón al aproximarse a un núcleo objetivo. Esta cantidad tiene unidades de área ( $\text{cm}^2$ ) y es específica para cada tipo de interacción (absorción, dispersión, fisión, entre otras).

Se expresa de la siguiente manera:

$$\text{Tasa} = RR = \sigma I N_A \quad (2.1)$$

- $RR$  es la tasa de reacciones (número de reacciones por  $\text{cm}^2 \cdot \text{s}$ ),
- $\sigma$  es la sección eficaz en  $\text{cm}^2$ ,
- $I$  es la intensidad del haz de neutrones ( $\text{neutrones}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$ ),
- $N_A$  es la densidad de núcleos en el blanco ( $\text{núcleos}/\text{cm}^2$ ).

La sección eficaz puede interpretarse como el "área efectiva" para la interacción. En un modelo clásico de partículas rígidas,  $\sigma$  correspondería aproximadamente al área física del núcleo. Sin embargo, debido a efectos de resonancia y fenómenos cuánticos, la sección eficaz puede ser mayor o menor que el área física real.

Existen diferentes tipos de secciones eficaces según la naturaleza de la interacción:

- 
- $\sigma_s$ : sección eficaz de dispersión, que se subdivide en:
    - $\sigma_e$ : dispersión elástica (el neutrón rebota sin cambiar el estado interno del núcleo),
    - $\sigma_{in}$ : dispersión inelástica (el neutrón pierde energía, excitando el núcleo).
  - $\sigma_a$ : sección eficaz de absorción, que incluye:
    - $\sigma_f$ : fisión,
    - $\sigma_\gamma$ : captura radiativa (absorción seguida de emisión de un fotón gamma),
    - $\sigma_{n,in}$ : reacciones ( $n, in$ ), con emisión de múltiples neutrones.

La sección eficaz total,  $\sigma_t$ , es la suma de todas las contribuciones posibles:

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a = \sigma_e + \sigma_{in} + \sigma_f + \sigma_\gamma + \dots \quad (2.2)$$

Esta cantidad representa la probabilidad total de que un neutrón incidente interactúe de alguna manera con el núcleo objetivo [19].

La sección eficaz  $\sigma$  varía significativamente con la energía del neutrón, particularmente en las cercanías de resonancias nucleares, lo que hace fundamental su consideración detallada en los cálculos de transporte y criticidad en reactores nucleares.

### 2.1.2. Sección eficaz macroscópica

En un blanco fino, cada núcleo recibe la misma intensidad del haz incidente. Sin embargo, en un blanco grueso, los neutrones que penetran más profundamente pueden ser atenuados por interacciones con núcleos situados cerca de la superficie.

La sección eficaz macroscópica total,  $\Sigma_t$ , representa la probabilidad por unidad de longitud de que un neutrón sufra una interacción dentro del material. Como resultado de esta probabilidad acumulada, la intensidad del haz de neutrones disminuye de forma exponencial a medida que penetra en el medio.

La longitud libre media,  $\lambda$ , definida como:

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma_t}, \quad (2.3)$$

representa la distancia promedio que un neutrón recorre antes de interactuar, y es análoga a la vida media en procesos de decaimiento radiactivo.

La frecuencia de colisiones, dada por  $\nu\Sigma_t$ , donde  $\nu$  es la velocidad del neutrón, indica cuántas interacciones ocurren por segundo a lo largo de su trayectoria.

---

Hasta este punto, se ha tratado exclusivamente el concepto de secciones eficaces macroscópicas totales, que caracterizan la probabilidad global de interacción. Este concepto puede generalizarse considerando que la sección eficaz macroscópica es el producto de la sección eficaz microscópica  $\sigma$  y la densidad numérica de núcleos  $N$  en el material:

$$\Sigma_f = N \sigma_f, \quad (2.4)$$

donde  $\Sigma_f$  es la sección eficaz macroscópica de fisión.

De manera análoga, se definen:

$$\Sigma_a = N \sigma_a, \quad \Sigma_s = N \sigma_s, \quad (2.5)$$

correspondientes a absorción y dispersión, respectivamente.

Por tanto, la sección eficaz macroscópica total es la suma de las contribuciones de dispersión y absorción:

$$\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a. \quad (2.6)$$

En una mezcla de diferentes tipos de núcleos, la sección eficaz macroscópica total se calcula sumando las contribuciones individuales de cada especie:

$$\Sigma_t = N_X \sigma_t^X + N_Y \sigma_t^Y + N_Z \sigma_t^Z, \quad (2.7)$$

donde  $N_X$ ,  $N_Y$  y  $N_Z$  son las densidades numéricas de los núcleos de especies  $X$ ,  $Y$  y  $Z$ , respectivamente, y  $\sigma_t^X$ ,  $\sigma_t^Y$  y  $\sigma_t^Z$  son sus respectivas secciones eficaces microscópicas totales.

Finalmente, cuando la densidad o la composición del material varían con la posición  $r$ , la energía del neutrón  $E$  y el tiempo  $t$ , la sección eficaz macroscópica se expresa como:

$$\Sigma(r, E, t) = N(r, t) \sigma(E), \quad (2.8)$$

permitiendo modelar situaciones dinámicas en sistemas heterogéneos o transitorios [19].

### 2.1.3. Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión,  $D$ , Según Bowen y Busch [20], describe cuán rápidamente se propagan los neutrones en un medio cuando su distribución espacial no es uniforme. En física de reactores, este coeficiente puede expresarse en función de la sección eficaz de transporte y de la sección eficaz de absorción.

---

Para un medio débilmente absorbente, donde  $\Sigma_a \ll \Sigma_s$ , el coeficiente de difusión se define como:

$$D = \frac{1}{3 \Sigma_{tr}} \quad \text{con} \quad \Sigma_{tr} = \Sigma_s (1 - \bar{\mu}_0), \quad (2.9)$$

donde, como sección eficaz macroscópica de transporte,  $\Sigma_{tr}$  representa la probabilidad efectiva de dispersión de neutrones tras corregir la sección eficaz de dispersión  $\Sigma_s$  por el factor anisotrópico  $(1 - \bar{\mu}_0)$ .  $\bar{\mu}_0$  representa el valor medio de  $\cos \theta$  en el sistema de laboratorio, relacionado con el cambio de dirección tras cada colisión.

Cuando la absorción no es despreciable, el cálculo completo de  $D$  se realiza considerando:

$$D = \frac{1}{3 [\Sigma_a + \Sigma_s (1 - \bar{\mu}_0)]} \quad (2.10)$$

La longitud media de transporte,  $\lambda_{tr}$ , se define como la distancia promedio que recorre un neutrón a lo largo de su trayectoria inicial tras sufrir un gran número de colisiones de dispersión:

$$\lambda_{tr} = \frac{\lambda_s}{1 - \bar{\mu}_0} \quad (2.11)$$

donde  $\lambda_s$  es la longitud media libre de dispersión, relacionada con  $\Sigma_s$  por la expresión  $\lambda_s = 1/\Sigma_s$ .

En medios pesados, se puede aproximar:

$$\bar{\mu}_0 \approx \frac{2}{3A} \quad (2.12)$$

donde  $A$  representa el número másico del núcleo dispersor. En ausencia de absorción, se cumple que  $\lambda_{tr} = \lambda_s/(1 - \bar{\mu}_0)$ . Si existe absorción, se introduce la sección eficaz total  $\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$ , lo que modifica la expresión final de  $\lambda_{tr}$ . [21].

#### 2.1.4. Probabilidad de dispersión

Como se mencionó anteriormente, las secciones eficaces de neutrones proporcionan una medida de la probabilidad de que ocurran distintos tipos de reacciones neutrón-núcleo. En las reacciones de dispersión, el neutrón incidente generalmente experimenta un cambio tanto en su dirección de movimiento como en su energía. Por esta razón, para describir completamente el comportamiento del neutrón tras la dispersión no basta con emplear únicamente la sección eficaz microscópica total de dispersión.

---

Considerando un haz de neutrones de intensidad incidente  $I$ , todos con energía  $E$ , que incide sobre una pantalla delgada con densidad atómica superficial  $N_A$ , la tasa de neutrones dispersados por unidad de área desde su energía inicial  $E$  hacia una energía final  $E'$  es proporcional a  $I$ ,  $N_A$  y al rango diferencial  $dE'$  de energías finales:

$$\frac{\text{Tasa de dispersión}}{\text{cm}^2} = \sigma_s(E \rightarrow E') dE' I N_A, \quad (2.13)$$

donde  $\sigma_s(E \rightarrow E')$  es la sección eficaz diferencial que caracteriza la probabilidad de que un neutrón con energía  $E$  sea dispersado a una energía  $E'$ .

Para una descripción aún más detallada, se define la sección eficaz de dispersión doble diferencial, que caracteriza la dispersión desde una energía incidente  $E$  y una dirección  $\hat{\Omega}$  hacia una energía final  $E'$  y una dirección  $\hat{\Omega}'$ , dentro de los rangos diferenciales  $dE'$  y  $d\hat{\Omega}'$ :

$$\sigma_s(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'). \quad (2.14)$$

Este concepto se extiende a la sección eficaz macroscópica mediante la multiplicación por la densidad atómica  $N$ :

$$\Sigma_s(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') = N \sigma_s(E \rightarrow E', \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'). \quad (2.15)$$

Estas secciones eficaces diferenciales son fundamentales para el análisis del transporte de neutrones en reactores nucleares, ya que permiten modelar tanto el movimiento de los neutrones dentro del núcleo como las tasas de fuga. Aunque el cálculo exacto de dichas secciones puede ser complejo, existen casos en los cuales pueden determinarse directamente a partir de las leyes de conservación de energía y momento, como sucede en la dispersión elástica de neutrones sobre núcleos estacionarios.

En estos casos, se introduce la función de transferencia,  $\mathcal{F}(E'\hat{\Omega}' \rightarrow E\hat{\Omega})$ , que describe la probabilidad de que un neutrón cambie desde una energía y dirección iniciales  $(E', \hat{\Omega}')$  hacia una energía y dirección finales  $(E, \hat{\Omega})$ :

$$\mathcal{F}(E'\hat{\Omega}' \rightarrow E\hat{\Omega}). \quad (2.16)$$

- $E'$ : Energía inicial,
- $\hat{\Omega}'$ : Dirección inicial,
- $E$ : Energía final,
- $\hat{\Omega}$ : Dirección final.

Esta función constituye un elemento esencial en la formulación de la ecuación de transporte de neutrones [19].

---

### 2.1.5. Reacciones de fisión

Dentro de los núcleos atómicos, la energía de enlace máxima que pueden alcanzar es aproximadamente 8.7 MeV para núcleos de masa atómica cercana a 50. Masas más ligeras y más pesadas presentan menor energía de enlace por nucleón, por lo que es posible liberar energía formando núcleos más fuertemente ligados, como se ilustra en la Figura 2. Esta liberación de energía puede lograrse mediante la fusión de núcleos ligeros (fusión nuclear) o mediante la división de un núcleo pesado en dos núcleos de masa intermedia (fisión nuclear).

Aunque los núcleos pesados presentan una gran estabilidad, las fuerzas nucleares de corto alcance, conocidas como fuerza nuclear fuerte, generan una barrera de energía potencial que el núcleo debe superar para que ocurra la fisión. La energía asociada a esta barrera varía entre 6 y 9 MeV en los núcleos comúnmente utilizados en procesos de fisión. Por tanto, para inducir la fisión es necesario suministrar suficiente energía al núcleo para superar esta barrera.

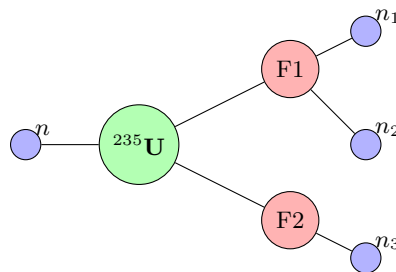
Existen diversas maneras de lograr este objetivo. Una opción consiste en proyectar partículas de alta energía, como fotones gamma en la reacción de fotofisión, capaces de transferir la energía necesaria para inducir la fisión. Otra posibilidad es la captura de un neutrón por parte del núcleo, lo que incrementa su energía de enlace total y puede provocar la fisión si dicha energía es suficiente.

Los núcleos comúnmente empleados para este proceso incluyen el Uranio-233, Uranio-235, Plutonio-239 y Plutonio-241. Los núclidos de estos elementos que pueden fisiónar tras capturar neutrones de baja energía se denominan *núclidos fisibles* y constituyen los combustibles principales utilizados en sistemas de reacción en cadena.

En contraste, existen núclidos pesados, como el Torio-232, Uranio-238 y Plutonio-240, cuya captura de un neutrón térmico no proporciona suficiente energía para inducir la fisión. En estos casos, es necesario que el neutrón incidente posea una energía cinética elevada (del orden de 1 MeV) para superar la barrera de fisión. Estos núclidos, que requieren neutrones rápidos para fisiónar, se conocen como *núclidos fisionables*.

Si bien los núclidos fisionables son relevantes en el ámbito del combustible nuclear, no son capaces de sostener una reacción en cadena por sí solos y, por ello, deben ser utilizados en combinación con núclidos fisibles [22].

**Figura 2.** Esquema del proceso de fisión nuclear.



---

### 2.1.6. Grupos de energía

En el núcleo de un reactor nuclear, los neutrones se encuentran distribuidos en un amplio rango de energías. Cuando los neutrones son emitidos durante la fisión, presentan un espectro de energías inicial relativamente alto. A medida que se dispersan en el medio moderador, los neutrones pierden energía progresivamente, alcanzando finalmente niveles térmicos antes de ser absorbidos.

Uno de los métodos más utilizados para describir el frenado y la difusión de neutrones es el denominado *método de difusión por grupos de energía*. En este enfoque, el rango continuo de energías se divide en  $N$  intervalos discretos, y todos los neutrones con energías dentro de un intervalo determinado se agrupan para su análisis conjunto.

El flujo de neutrones correspondiente al grupo  $g$  se define como:

$$\phi_g = \int_g \phi(E) dE, \quad (2.17)$$

donde  $\phi(E)$  es el flujo de neutrones dependiente de la energía. Esta integral representa la contribución de todos los neutrones cuya energía se encuentra dentro del intervalo correspondiente al grupo  $g$ .

Los neutrones desaparecen del grupo  $g$  debido a procesos de absorción o dispersión que transfieren su energía a otros grupos. La tasa total de absorción por unidad de volumen en el grupo  $g$  se expresa como:

$$\text{Tasa de absorción} = \int_g \Sigma_a(E) \phi(E) dE, \quad (2.18)$$

donde  $\Sigma_a(E)$  es la sección eficaz macroscópica de absorción dependiente de la energía.

Se define la sección eficaz macroscópica de absorción promedio para el grupo  $g$  como:

$$\Sigma_{ag} = \frac{1}{\phi_g} \int_g \Sigma_a(E) \phi(E) dE, \quad (2.19)$$

lo que permite expresar la tasa de absorción en el grupo  $g$  de manera simplificada como:

$$\text{Tasa de absorción} = \Sigma_{ag} \phi_g. \quad (2.20)$$

Asimismo, la tasa de transferencia de neutrones desde el grupo  $g$  hacia el grupo  $h$  puede describirse mediante:

$$g \rightarrow h = \Sigma_{g \rightarrow h} \phi_g, \quad (2.21)$$

donde  $\Sigma_{g \rightarrow h}$  representa la sección eficaz de transferencia entre grupos [19].

Este enfoque en grupos de energía constituye una herramienta fundamental en la modelación de reactores nucleares, al simplificar el tratamiento del espectro energético de los neutrones de manera efectiva para los cálculos de difusión y criticidad.

### 2.1.7. Corriente de neutrones

La tasa neta de neutrones que atraviesa una unidad de área por unidad de tiempo en una dirección dada se conoce como densidad de corriente angular. Esta cantidad, denotada como  $\vec{j}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ , se define como:

$$\vec{j}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = v \vec{\Omega} n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \vec{\Omega} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t), \quad (2.22)$$

- $v$  es la velocidad del neutrón,
- $\vec{\Omega}$  es un vector unitario que indica la dirección de su movimiento,
- $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  es la densidad neutrónica angular,
- $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  es el flujo neutrónico angular.

Dado que  $\vec{\Omega}$  es un vector unitario, la magnitud de  $\vec{j}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$  coincide con la del flujo angular  $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ .

La corriente neutrónica total,  $\vec{J}(\vec{r}, t)$ , se obtiene integrando la densidad de corriente angular sobre todas las direcciones espaciales y sobre todo el espectro energético:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \vec{j}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE. \quad (2.23)$$

Esta corriente total representa el flujo neto de neutrones que atraviesa una superficie en  $\vec{r}$ , considerando todas las posibles energías y direcciones [19].

### 2.1.8. Ley de difusión de Fick

En física de reactores, se asume que los neutrones tienden a difundirse desde las regiones de mayor densidad hacia aquellas de menor densidad, en un proceso análogo a la difusión de solutos en química o a la propagación de gases. Esta hipótesis conduce a la formulación de la *Ley de Fick*, que establece que la densidad de corriente de neutrones  $\vec{J}$  es proporcional al gradiente negativo del flujo neutrónico escalar  $\phi$ .

En una dimensión, a lo largo del eje  $x$ , la ley se expresa como:

---


$$J = -D \frac{d\phi}{dx}, \quad (2.24)$$

- $J$  es la densidad de corriente (neutrones/cm<sup>2</sup>/s),
- $\phi$  es el flujo neutrónico escalar (neutrones/cm<sup>2</sup>/s),
- $D$  es el coeficiente de difusión.

El coeficiente de difusión  $D$  puede derivarse a partir de parámetros como la sección eficaz macroscópica total y la longitud media libre de los neutrones.

En tres dimensiones, la Ley de Fick se generaliza a la forma vectorial:

$$\vec{J} = -D \nabla \phi, \quad (2.25)$$

donde  $\vec{J}$  es la corriente vectorial de neutrones y  $\nabla \phi$  representa el gradiente del flujo escalar.

Físicamente, esta relación implica que los neutrones tienden a fluir hacia las regiones con menor densidad de neutrones, debido a que las colisiones y las dispersiones son más frecuentes en zonas donde la concentración de neutrones es mayor. Este principio constituye la base de la aproximación de difusión, una de las más empleadas en el análisis de reactores nucleares [23].

### 2.1.9. Ecuaciones de transporte y difusión de neutrones

Para comenzar con la ecuación general de transporte de neutrones, se debe plantear la tasa de cambio de la población de neutrones como función de la posición, la energía, la dirección y el tiempo [12]. Esta relación puede escribirse como:

$$\frac{\partial n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} = \text{Ganancias} - \text{Pérdidas}. \quad (2.26)$$

- $n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ : Densidad de neutrones en función de la posición, energía, dirección y tiempo,
- $\frac{\partial n}{\partial t}$ : Tasa de cambio temporal de la población de neutrones,
- Ganancias: Representa las contribuciones positivas de neutrones (por ejemplo, provenientes de fuentes, fisión, etc.),
- Pérdidas: Representa las contribuciones negativas de neutrones (por ejemplo, debido a absorción, fuga, etc.).

---

El balance detallado entre ganancias y pérdidas de neutrones, incluyendo fenómenos como la dispersión inelástica y la fotofisión, puede expresarse como:

$$\text{Ganancias} = \text{Fisión} + (n, in) + \text{Fuente externa} + \text{Dispersión hacia adentro} + (\gamma f) \text{ Fotofisión}, \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \text{Pérdidas} &= (\text{Dispersión hacia afuera} + \text{Captura} + \text{Fisión} + \dots) + \text{Filtración}, \\ &= \text{Sección eficaz macroscópica total} + \text{Filtración}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

- $\nu(E)$ : Número promedio de neutrones generados en una reacción de fisión,
- $(n, in)$ : Reacciones de tipo  $(n, in)$ ,
- Fuente externa: Neutrones introducidos desde una fuente externa,
- Dispersión hacia adentro: Neutrones dispersados que ingresan en la región de interés,
- Dispersión hacia afuera: Neutrones dispersados que abandonan la región de interés,
- Captura: Neutrones absorbidos sin inducir fisión,
- Fisión: Neutrones absorbidos provocando una reacción de fisión,
- $\gamma f$ : Neutrones producidos por fotofisión,
- Filtración: Neutrones que escapan del volumen de estudio.

El siguiente paso consiste en determinar la tasa de reacción correspondiente a cada uno de los procesos de ganancia y pérdida. Para ello, es necesario considerar todos los posibles grupos de energía, todos los ángulos de salida y todo el volumen del núcleo del reactor.

En el caso de las tasas de reacción por fisión y fotofisión, además de integrar sobre las energías y direcciones, se debe incluir la probabilidad de que el neutrón nazca dentro del grupo de energía bajo estudio, así como el número promedio de neutrones emitidos por la reacción correspondiente. Finalmente, estos resultados se normalizan respecto al ángulo sólido.

En el caso particular de las reacciones  $(n, in)$ , se introduce una excepción: al calcular la probabilidad de emisión múltiple, sólo se consideran los eventos en los que se emiten al menos dos neutrones, hasta un máximo de cuatro. Por esta razón, se realiza una sumatoria desde  $i = 2$  hasta  $i = 4$ , incluyendo el espectro de nacimiento de neutrones, y posteriormente se normaliza respecto al ángulo sólido.

La ecuación de transporte de neutrones se inicia de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\nu} \frac{\partial n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} = & \frac{\gamma(E)\chi(E)}{4\pi} \int_V \int_E \int_{\Omega} \Sigma_f(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) d\Omega' dE' dV \\
& + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
& + \frac{\gamma_\gamma(E)\chi_\gamma(E)}{4\pi} \int_V \int_E \int_{\Omega} \Sigma_{\gamma,f}(E, \vec{r}) \phi_\gamma(\vec{r}, E_\gamma, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE dV \\
& + \sum_{i=2}^4 \frac{i\chi(E)}{4\pi} \int_V \int_E \int_{\Omega} \Sigma_{(n,in)}(E, \vec{r}) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE dV \quad (2.29) \\
& + \int_V \int_E \int_{\Omega} \Sigma_s(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) F(\vec{\Omega}' E' \rightarrow \vec{\Omega} E) d\Omega' dE' dV \\
& - \int_V \int_E \int_{\Omega} \Sigma_{\text{total}}(E, \vec{r}) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE dV \\
& - \int_S \int_E \int_{\Omega} (\vec{\Omega} \cdot \hat{n}) j(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\Omega dE dS.
\end{aligned}$$

- $\frac{\partial n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t}$ : tasa de cambio de la población de neutrones en el tiempo.
- $\gamma(E')$ : número promedio de neutrones producidos en fisión a energía  $E'$ .
- $\chi(E)$ : espectro de nacimiento de neutrones, probabilidad de que un neutrón nazca con energía  $E$ .
- $\Sigma_f(E)$ : sección eficaz macroscópica de fisión.
- $\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ : flujo de neutrones.
- $F(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega})$ : función de distribución angular para la dispersión.
- Las integrales son sobre el volumen  $V$ , la energía  $E$  y el ángulo sólido  $\Omega$ .
- $\vec{\Omega} \cdot \hat{n}$ : producto punto entre la dirección del neutrón y el vector normal a la superficie.
- $j(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ : corriente de neutrones con energía  $E$ , dirección  $\vec{\Omega}$  y tiempo  $t$ .
- $dS$ : elemento diferencial de área superficial.

A continuación, se aborda la simplificación angular. Se puede descartar la dependencia explícita de la dirección  $\vec{\Omega}$  en la ecuación de transporte, ya que el interés principal radica en la densidad y el balance global de neutrones, más que en su trayectoria individual. Por tanto, se reformula el problema enfocándose en la densidad de neutrones y las tasas de reacción, mientras se ignora la dirección específica del movimiento de las partículas.

La ecuación de transporte de neutrones, sin dependencia angular, se expresa de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n(\vec{r}, E, t)}{\nu \partial t} = & \gamma(E) \chi(E) \int_V \int_E \Sigma_f(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dV \\
& + S(\vec{r}, E, t) \\
& + \gamma_\gamma(E) \chi_\gamma(E) \int_V \int_E \Sigma_{\gamma,f}(E', \vec{r}) \phi_\gamma(\vec{r}, E', t) dE' dV \\
& + \sum_{i=2}^4 i \chi(E) \int_V \int_E \Sigma_{(n, in)}(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dV \\
& + \int_V \int_E \Sigma_s(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E', t) F(E' \rightarrow E) dE' dV \\
& - \int_V \int_E \Sigma_{\text{total}}(E, \vec{r}) \phi(\vec{r}, E, t) dE dV \\
& - \int_S \int_E j(\vec{r}, E, t) dE dS.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Esta simplificación considera la dependencia temporal. Se asume que el reactor se encuentra en estado estacionario, lo que implica que variables como la potencia, la población de neutrones y las tasas de reacción permanecen constantes en el tiempo. Consecuentemente, la derivada temporal de la densidad de neutrones se anula. Esto es equivalente a considerar lo siguiente:

- La potencia nuclear permanece constante.
- La reactividad efectiva del reactor es cero.
- La distribución de flujo de neutrones no varía en el tiempo.
- Las temperaturas del combustible y del moderador son estables.

La ecuación de transporte de neutrones bajo la hipótesis de estado estacionario, sin dependencia explícita en el tiempo  $t$ , es:

$$\begin{aligned}
0 = & \gamma(E) \chi(E) \int_V \int_E \Sigma_f(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E') dE' dV \\
& + \gamma_\gamma(E) \chi_\gamma(E) \int_V \int_E \Sigma_{\gamma,f}(E', \vec{r}) \phi_\gamma(\vec{r}, E') dE' dV \\
& + \sum_{i=2}^4 i \chi(E) \int_V \int_E \Sigma_{(n, in)}(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E') dE' dV \\
& + \int_V \int_E \Sigma_s(E', \vec{r}) \phi(\vec{r}, E') F(E' \rightarrow E) dE' dV \\
& - \int_V \int_E \Sigma_{\text{total}}(E, \vec{r}) \phi(\vec{r}, E) dE dV \\
& - \int_S \int_E j(\vec{r}, E) dE dS.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Utilizando el teorema de la divergencia, la integral sobre la superficie puede convertirse en una integral sobre el volumen:

$$\int_S j(\vec{r}, E) dS = - \int_V (\nabla \cdot j(\vec{r}, E)) dV. \quad (2.32)$$

Esta transformación permite evaluar la fuga de neutrones a través de la superficie  $S$  como una integral volumétrica de la divergencia de la corriente de neutrones.

Otra simplificación a considerar es suponer que el núcleo del reactor es homogéneo, es decir, que sus materiales son suficientemente similares para que los neutrones puedan recorrer distancias significativas sin encontrar variaciones abruptas en las propiedades nucleares. Sin embargo, existen dos excepciones relevantes: la presencia de barras de control y el propio combustible nuclear, ya que ambos contienen materiales específicamente diseñados para fisiónarse o absorber neutrones de manera eficiente.

En el caso de un reactor de sales fundidas, la mezcla homogénea del combustible con sales líquidas a altas temperaturas facilita una mayor uniformidad del medio, permitiendo asumir que las secciones eficaces no varían significativamente alrededor de la posición  $\vec{r}$ . No obstante, dado que el reactor tiene dimensiones finitas, el flujo de neutrones tiende a disminuir conforme se aproxima a las fronteras del núcleo.

Con la hipótesis de homogeneidad, la ecuación de transporte de neutrones, eliminando la dependencia espacial, se escribe como:

$$\begin{aligned} 0 = & \gamma(E)\chi(E) \int_V \int_E \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E') dV dE' \\ & + \gamma_\gamma(E)\chi_\gamma(E) \int_V \int_E \Sigma_{\gamma,f}(E') \phi_\gamma(\vec{r}, E'_\gamma) dV dE' \\ & + \sum_{i=2}^4 i \chi(E) \int_V \int_E \Sigma_{(n,in)}(E') \phi(\vec{r}, E') dV dE' \\ & + \int_V \int_E \Sigma_s(E') \phi(\vec{r}, E') F(E' \rightarrow E) dV dE' \\ & - \int_V \int_E \Sigma_{\text{total}}(E) \phi(\vec{r}, E) dV dE \\ & + \int_V \int_E (\nabla \cdot j(\vec{r}, E)) dV dE. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Finalmente, se puede asumir que las propiedades son completamente homogéneas dentro del volumen considerado. Bajo esta hipótesis, las integrales sobre el volumen se eliminan, dado que la misma ecuación es válida localmente en todo el dominio. Así, se obtiene la expresión final:

---

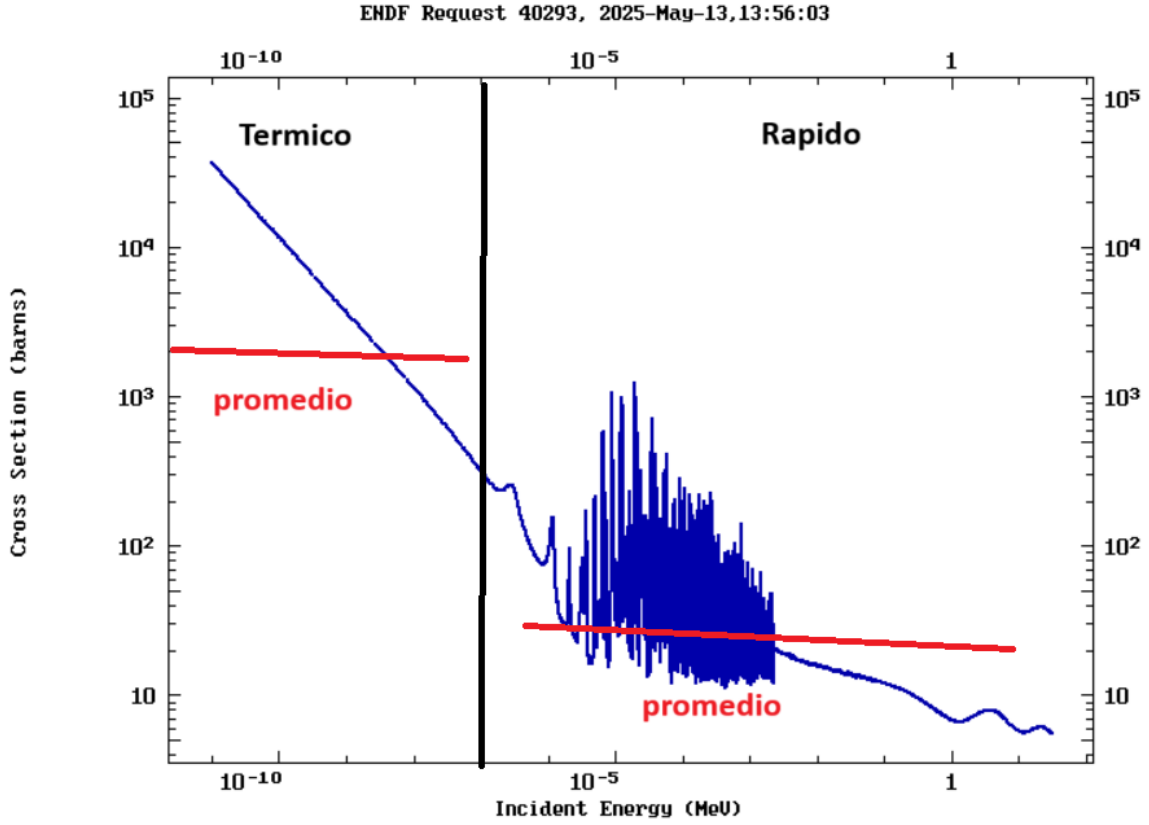

$$\begin{aligned}
0 = & \gamma(E)\chi(E) \int_E \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E') dE' \\
& + \gamma_\gamma(E)\chi_\gamma(E) \int_E \Sigma_{\gamma,f}(E) \phi_\gamma(\vec{r}, E_\gamma) dE \\
& + \sum_{i=2}^4 i \chi(E) \int_E \Sigma_{(n,in)}(E) \phi(\vec{r}, E) dE \\
& + \int_E \Sigma_s(E') \phi(\vec{r}, E') F(E' \rightarrow E) dE' \\
& - \int_E \Sigma_{\text{total}}(E) \phi(\vec{r}, E) dE \\
& + \int_E (\nabla \cdot j(\vec{r}, E)) dE.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

### 2.1.10. Modelo de un grupo

A partir de este punto, para continuar el desarrollo, es necesario derivar la ecuación de difusión. Para ello, se requiere considerar la agrupación de las energías de los neutrones. Recordemos que es posible dividir el espectro en tantos grupos energéticos como se desee; sin embargo, con el fin de mantener la simplificación del modelo, se abordarán dos casos: primero, considerando un solo grupo energético y, posteriormente, el caso de dos grupos.[19]

La figura 3 ilustra cómo se distribuye la energía de los neutrones en dos grupos energéticos diferentes, considerando específicamente un átomo de uranio. Cabe aclarar que esta gráfica constituye un ejemplo, ya que la distribución depende del material y de las secciones eficaces asociadas. Sin embargo, ofrece una buena aproximación para generalizar el comportamiento de otros materiales. Como se observa, en la región de energías rápidas suele presentarse un comportamiento más irregular debido a resonancias.

**Figura 3.** Distribución de la energía cinética de los neutrones en dos grupos en un átomo de Uranio.[24]



a

En este trabajo se emplearán modelos de uno y dos grupos, que son los utilizados en las simulaciones. Por tanto, se distribuye el flujo entre el flujo térmico y el flujo rápido. Para el caso de un solo grupo, se considera el flujo total sin división energética.

En general, se trabaja dentro de un intervalo de energías comprendido entre  $E_{\min}$  y  $E_{\max}$ . Los neutrones nacen tanto en el rango térmico como en el rápido. Para un promedio de sección eficaz, se define:

$$\bar{\Sigma} = \frac{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Sigma(E) \Phi(E) dE}{\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Phi(E) dE}. \quad (2.35)$$

Este promedio permite eliminar la dependencia explícita en la energía, utilizando un valor representativo sobre todo el espectro.

La integral del flujo de neutrones se expresa como:

$$\Phi = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \Phi(E) dE. \quad (2.36)$$

---

La normalización de la probabilidad de nacimiento de neutrones sobre todo el espectro es:

$$\int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{\phi(E)}{\Phi} dE = 1, \quad (2.37)$$

y se considera una fuente uniforme:

$$\chi(E) = 1, \quad (2.38)$$

es decir, la probabilidad total de nacimiento de neutrones en todo el rango energético es unidad.

De igual manera, se asume que:

$$F(E' \rightarrow E) = 1, \quad (2.39)$$

indicando una dispersión completamente isotrópica.

Finalmente, se aplica la ley de Fick para modelar la corriente de neutrones:

$$J_g = -D\nabla C, \quad (2.40)$$

donde  $D$  es el coeficiente de difusión.

La ecuación de difusión para un reactor homogéneo, con un solo grupo energético y en estado estacionario, se escribe como:

$$0 = \left[ \gamma \Sigma_f \phi(r) + \sum_{i=2}^4 i \Sigma_{(n, in)} \phi(r) + \bar{\gamma} \overline{\Sigma_{\gamma f}} \phi(r) \right] - \Sigma_a \phi(r) + D \nabla^2 \phi(r). \quad (2.41)$$

- $\Sigma_f$ : sección eficaz macroscópica de fisión.
- $\Sigma_{\gamma f}$ : sección eficaz macroscópica de fotofisión.
- $\phi(r)$ : flujo neutrónico en función de la posición  $r$ .
- $D \nabla^2 \phi(r)$ : término de difusión asociado a la propagación de neutrones.

Cabe mencionar que se ha utilizado la relación:

$$\Sigma_{\text{total}} = \Sigma_a + \Sigma_s, \quad (2.42)$$

para despejar  $\Sigma_a$  y simplificar aún más la forma de la ecuación.

Para resolver la ecuación de difusión, es necesario especificar la geometría del problema. Se comienza con el análisis de la configuración más sencilla: una placa unidimensional.

La ecuación de difusión en una placa, utilizando coordenadas  $x$ , es:

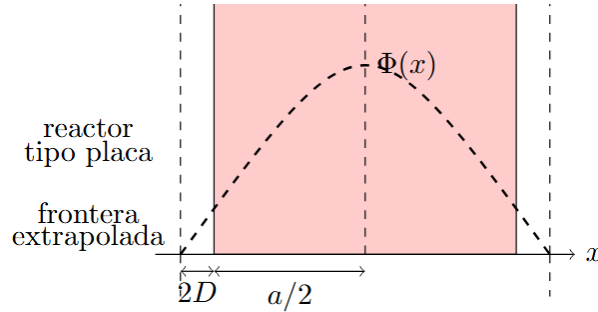
$$0 = \left( \gamma \Sigma_f \phi(x) + \sum_{i=2}^4 i \Sigma_{(n,in)} \phi(x) + \bar{\gamma} \overline{\Sigma_{\gamma f}} \phi(x) \right) - \Sigma_a \phi(x) + D \nabla^2 \phi(x). \quad (2.43)$$

Considerando las condiciones más realistas de operación de un reactor, es posible simplificar la ecuación descartando los efectos de la fotofisión y las reacciones  $(n, in)$ , debido a su baja contribución al balance general de neutrones. Así, la ecuación reducida es:

$$0 = (\gamma \Sigma_f \phi(x)) - \Sigma_a \phi(x) + D \nabla^2 \phi(x). \quad (2.44)$$

### 2.1.11. Reactor de placa unidimensional

**Figura 4.** Representación del flujo de neutrones en una placa unidimensional.



A partir de esta sección se considerará una geometría unidimensional. Como se observa en la figura 4, el flujo de neutrones disminuye conforme se aleja del núcleo, debido a su absorción o a la pérdida de energía. Además, el flujo no se anula exactamente en el borde físico de la placa, ya que algunos neutrones escapan del reactor. Este fenómeno introduce el concepto de frontera extrapolada, definida como el punto en el que el flujo neutrónico es cero. La distancia adicional de extrapolación suele aproximarse a dos veces el coeficiente de difusión  $D$ , una aproximación válida para diversas geometrías.[19]

Manipulando la ecuación de difusión obtenida previamente, se tiene:

$$-\frac{\nabla^2 \Phi}{\Phi} = \frac{(\gamma \Sigma_f - \Sigma_a)}{D}. \quad (2.45)$$

La solución general de esta ecuación diferencial es:

---


$$\phi(x) = A \cos(B_g x) + C \sin(B_g x), \quad (2.46)$$

donde  $A$  y  $C$  son constantes de integración.

Por simetría en el centro de la placa, se elimina el término en  $\sin(B_g x)$ , resultando:

$$\phi(x) = A \cos(B_g x). \quad (2.47)$$

La condición de frontera que se impone es:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad (2.48)$$

lo que garantiza un flujo máximo en el centro de la placa. formulándose una frontera extrapolada con dimensión  $\frac{a_e}{2} = \frac{a}{2} + 2D$ :

$$\Phi\left(\frac{a_e}{2}\right) = A \cos\left(B_g \frac{a_e}{2}\right) = 0, \quad (2.49)$$

los valores permitidos del pandeo geométrico  $B_g$  quedan limitados por:

$$B_g = \frac{n\pi}{a_e}, \quad \text{donde } n \text{ es un entero impar.} \quad (2.50)$$

Para describir la fuga de neutrones en los bordes, se introduce el parámetro de pandeo geométrico  $B_g$ , cuya expresión es:

$$B_g = \frac{\pi}{2\left(\frac{a}{2} + 2D\right)}, \quad (2.51)$$

- $B_g$ : pandeo geométrico.
- $a$ : espesor físico de la placa.
- $D$ : coeficiente de difusión.

Sustituyendo en la ecuación de difusión:

$$\frac{AB_g^2 \cos(Bx)}{A \cos(Bx)} = \frac{(\gamma \Sigma_f - \Sigma_a)}{D}, \quad (2.52)$$

de donde se deduce:

$$B_g^2 = \frac{(\gamma \Sigma_f - \Sigma_a)}{D}. \quad (2.53)$$

Finalmente, el factor de multiplicación  $k$  del reactor está dado por:

$$k = \frac{\gamma \Sigma_f}{\Sigma_a + DB_g^2} = \frac{\text{ganancias}}{\text{pérdidas}}. \quad (2.54)$$

### 2.1.12. Modelo de dos grupos

Los neutrones libres se clasifican de acuerdo con su energía cinética, abarcando desde energías extremadamente bajas —como los neutrones fríos y térmicos— hasta energías elevadas en los neutrones rápidos e incluso relativistas. Sin embargo, en física de reactores, resulta habitual agrupar el espectro de neutrones en dos rangos principales: - Neutrones térmicos , que presentan energías promedio alrededor de 0.025 eV y que en general se encuentran por debajo de 1 eV, - Neutrones rápidos , con energías superiores a 1 MeV.[19]

El balance de ganancias y pérdidas para dos grupos de energía (rápido y térmico) puede representarse en la siguiente matriz:

**Tabla 2.** Ganancias y pérdidas en el modelo de dos grupos.

	Ganancias	Pérdidas
Rápidos (f)	$\gamma (\bar{\Sigma}_f \phi_f + \bar{\Sigma}_{f,th} \phi_{th})$	$\Sigma_{a,f} \phi_f + \Sigma_{s,f \rightarrow th} \phi_f + D_f B^2 \phi_f$
Térmicos (th)	$\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th} \phi_f$	$\Sigma_{a,th} \phi_{th} + D_{th} B^2 \phi_{th}$

- $\phi_f$ : flujo de neutrones rápidos.
- $\phi_{th}$ : flujo de neutrones térmicos.
- $\Sigma_{f_f}$ : sección eficaz de fisión para neutrones rápidos.
- $\Sigma_{f_{th}}$ : sección eficaz de fisión para neutrones térmicos.
- $\Sigma_{a_f}$ : sección eficaz de absorción para neutrones rápidos.
- $\Sigma_{a_{th}}$ : sección eficaz de absorción para neutrones térmicos.
- $D_f$  y  $D_{th}$ : coeficientes de difusión para neutrones rápidos y térmicos.
- $B_g^2$ : término asociado a la fuga de neutrones.

El balance para el grupo de energía rápida se describe mediante la ecuación:

$$\gamma (\bar{\Sigma}_f \phi_f + \bar{\Sigma}_{f,th} \phi_{th}) = \Sigma_{a,f} \phi_f + \Sigma_{s,f \rightarrow th} \phi_f + D_f B_g^2 \phi_f. \quad (2.55)$$

El balance para el grupo de energía térmica se expresa como:

$$\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th} \phi_f = \phi_{th} \left( D_{th} B_g^2 + \bar{\Sigma}_{a_{th}} \right), \quad (2.56)$$

De allí, se despeja el flujo térmico:

$$\phi_{th} = \frac{\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th} \phi_f}{D_{th} B_g^2 + \bar{\Sigma}_{a_{th}}}. \quad (2.57)$$

Sustituyendo esta expresión en el balance de energía rápida, se obtiene la ecuación completa:

$$\gamma \left[ \bar{\Sigma}_{f_f} \phi_f + \bar{\Sigma}_{f_{th}} \frac{\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th} \phi_f}{D_{th} B_g^2 + \bar{\Sigma}_{a_{th}}} \right] = \bar{\Sigma}_{a_f} \phi_f + D_f B_g^2 \phi_f + \Sigma_{s,f \rightarrow th} \phi_f. \quad (2.58)$$

Finalmente, la expresión para el factor de multiplicación  $k$  en el modelo de dos grupos es la siguiente:

$$k = \frac{\gamma \left[ \bar{\Sigma}_{f_f} + \bar{\Sigma}_{f_{th}} \right] \left( \frac{\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th}}{D_{th} B_g^2 + \bar{\Sigma}_{a_{th}}} \right)}{\bar{\Sigma}_{s,f \rightarrow th} + \bar{\Sigma}_{a_f} + D_f B_g^2}. \quad (2.59)$$

### 2.1.13. Reactor de geometría cilíndrica

En esta sección se mostrará cómo se resuelve la ecuación de difusión para un reactor con geometría cilíndrica. Esta elección se debe a que, en la simulación propuesta, tanto las barras de combustible como el propio reactor adoptan formas cilíndricas. Se considera únicamente una geometría bidimensional, como se ilustra en la Figura 5, descartándose la dependencia angular bajo la suposición de simetría cilíndrica en la distribución de neutrones.

En coordenadas cilíndricas 2D, el operador Laplaciano, bajo la hipótesis de independencia respecto del ángulo  $\theta$ , se expresa de la siguiente forma:

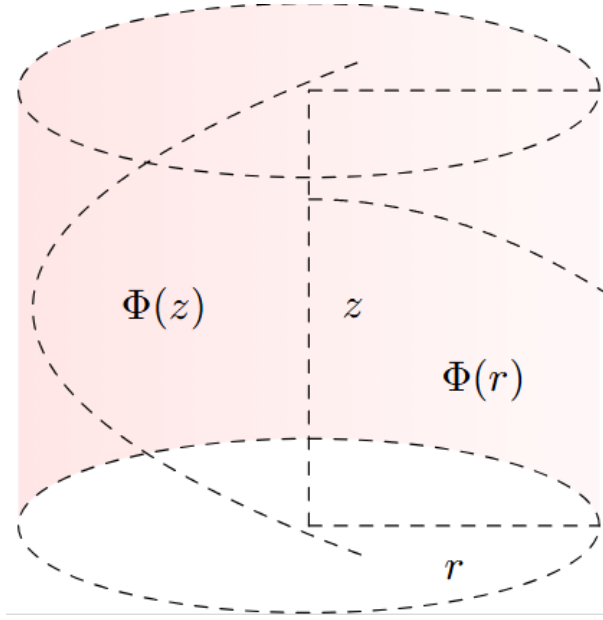
$$\nabla^2 \Phi = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d\Phi}{dr} \right) + \frac{d^2 \Phi}{dz^2}. \quad (2.60)$$

Al igualar al término asociado a pérdidas por fuga  $B_g^2$ , se obtiene:

$$\nabla^2 \Phi = B_g^2 \Phi, \quad (2.61)$$

lo que da lugar a:

**Figura 5.** Representación del flujo de neutrones en un cilindro bidimensional.



$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d\Phi}{dr} \right) + \frac{d^2\Phi}{dz^2} = B_g^2 \Phi. \quad (2.62)$$

Aplicando el método de separación de variables,  $\Phi(r, z) = R(r)Z(z)$ , se obtiene:

$$\frac{1}{rR} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{Z} \frac{d^2Z}{dz^2} = -B_g^2, \quad (2.63)$$

lo que implica que tanto la parte radial como la parte axial deben ser constantes:

$$-V^2 - K^2 = -B_g^2. \quad (2.64)$$

A partir de la separación de variables, se derivan las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$r \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{dR}{dr} + r(V)^2 R = 0, \quad (2.65)$$

$$\frac{d^2Z}{dz^2} + (K^2)Z = 0. \quad (2.66)$$

La ecuación radial se puede escribir en función de una nueva variable  $\rho = Vr$ , obteniendo:

$$\rho^2 \frac{d^2R}{d\rho^2} + \rho \frac{dR}{d\rho} + (\rho^2 - 0) R = 0, \quad (2.67)$$

---

que corresponde a la ecuación de Bessel de orden cero , cuya solución general es:

$$R(r) = AJ_0(Vr) + CY_0(Vr), \quad (2.68)$$

- $J_0$ : función de Bessel de primer tipo de orden cero.
- $Y_0$ : función de Bessel de segundo tipo de orden cero.
- $A$  y  $C$ : constantes de integración.

Debido a que  $Y_0(Vr)$  diverge cuando  $r \rightarrow 0$ , y para garantizar que el flujo de neutrones sea finito en todo el dominio, se impone  $C = 0$ . Por tanto, la solución radial queda:

$$R(r) = AJ_0(Vr). \quad (2.69)$$

La condición de frontera del flujo de neutrones se impone en:

$$R_e = R + 2D, \quad (2.70)$$

y se exige que:

$$R(R_e) = AJ_0(VR_e) = 0. \quad (2.71)$$

Como  $J_0$  posee múltiples ceros, el primer cero físico relevante es  $r_1 = 2.405$ . Por tanto, para obtener soluciones físicas aceptables, se establece:

$$VR_e = 2.405 \quad (2.72)$$

lo cual permite escribir finalmente:

$$R(r) = AJ_0\left(\frac{2.405}{R_e}r\right). \quad (2.73)$$

Respecto a la dependencia axial, dado que se modela como una placa infinita en la dirección  $z$ , la solución es:

$$Z(z) = C \cos\left(\frac{\pi z}{H_e}\right), \quad (2.74)$$

siendo la extrapolación en  $z$ .

---


$$H_e = H + 2D, \quad (2.75)$$

De este modo, la solución general para el flujo de neutrones  $\Phi(r, z)$  en geometría cilíndrica es:

$$\Phi(r, z) = AJ_0 \left( \frac{2.405}{R_e} r \right) C \cos \left( \frac{\pi z}{H_e} \right). \quad (2.76)$$

El valor del parámetro de pandeo geométrico  $B_g^2$  resulta:

$$B_g^2 = \left( \frac{2.405}{R_e} \right)^2 + \left( \frac{\pi}{H_e} \right)^2. \quad (2.77)$$

## 2.2. Reactores de investigación TRIGA

### 2.2.1. Diseño y características

Los reactores TRIGA fueron diseñados en la década de 1950 por General Atomics con los objetivos principales de lograr seguridad intrínseca, flexibilidad operativa, costos moderados y compatibilidad para una amplia variedad de experimentos. Estos reactores utilizan como combustible una aleación de uranio enriquecido combinado con hidruro de circonio (ZrH), lo que proporciona un coeficiente de reactividad negativo, garantizando la autorregulación frente a aumentos de temperatura.

El diseño de los reactores TRIGA prioriza la seguridad pasiva, permitiendo soportar eventos accidentales, como la pérdida de refrigerante, sin comprometer la integridad del combustible. Son ideales para aplicaciones de irradiación nuclear, estudios térmicos, experimentos de transitorios rápidos y simulaciones nucleares avanzadas, operando con riesgos operativos mínimos.

#### **Tipos de reactores TRIGA:**

- **Mark I:** reactor en piscina subterránea, sin tubos de haz.
- **Mark II:** reactor en tanque sobre el suelo, equipado con múltiples tubos de haz para irradiaciones.
- **Mark III:** reactor de núcleo móvil, diseñado para facilitar experimentos en columnas térmicas y salas de exposición.

Entre las principales características del diseño de los reactores TRIGA se destacan:

- El núcleo está formado por elementos combustibles enriquecidos al 20 % en uranio-235.

- 
- La potencia de operación puede alcanzar hasta 2000 kW, con enfriamiento mediante convección natural.
  - El núcleo posee una disposición cilíndrica con 91 posiciones, que pueden ser ocupadas por elementos combustibles, barras de control u otros componentes, distribuidos en seis anillos concéntricos etiquetados como A, B, C, D, E y F.
  - La estructura del núcleo es sostenida por rejillas de aluminio que mantienen el espaciado y la posición precisa de los elementos.
  - El núcleo está rodeado por reflectores, generalmente de grafito, que optimizan la moderación de neutrones y está contenido en un revestimiento de aluminio.
  - Existen canales de irradiación radiales y tangenciales incorporados en el diseño.

Respecto al **coeficiente de temperatura negativa**, la combinación de uranio con hidruro de circonio permite un endurecimiento del espectro de neutrones a medida que la temperatura del combustible se incrementa, reduciendo automáticamente la reactividad y proporcionando una respuesta de seguridad intrínseca. Los **sistemas de control** incluyen barras de control de carburo de boro, diseñadas para permitir inserciones de reactividad seguras, incluso durante condiciones transitorias.[3]

### 2.2.2. Importancia y usos

Los reactores TRIGA se han consolidado como un pilar fundamental en el ámbito de la investigación nuclear, gracias a su diseño seguro, flexible y accesible. Su característica más destacada, el coeficiente de reactividad negativo inmediato, garantiza la autorregulación de la reacción nuclear, reduciendo de manera significativa los riesgos operativos incluso en condiciones extremas. Esto posiciona a los reactores TRIGA como una de las opciones más seguras dentro de los reactores de investigación de nivel megavatio.

Además, su alta flexibilidad en diseño y operación permite satisfacer una amplia gama de necesidades científicas y educativas, desde la ejecución de experimentos complejos hasta la capacitación de operadores de reactores. La capacidad de soportar tanto operaciones continuas como pulsos de alta potencia demuestra su adaptabilidad a diversas circunstancias y objetivos experimentales.[25]

Los principales usos de los reactores TRIGA incluyen:

#### 1. Investigación científica:

- Irradiación de materiales para el estudio de propiedades físicas y químicas bajo exposición a radiación.
- Desarrollo y prueba de combustibles nucleares y materiales estructurales.
- Realización de estudios de física de neutrones.

---

## 2. Producción de isótopos:

- Generación de isótopos radioactivos para aplicaciones médicas.
- Producción de isótopos para usos industriales, tales como trazadores en exploraciones petroleras.

## 3. Capacitación y educación:

- Entrenamiento de operadores y técnicos en el manejo seguro de reactores nucleares.
- Integración en programas académicos enfocados en física nuclear y energía atómica.

## 4. Ensayos de seguridad:

- Evaluación de diseños de reactores y combustibles bajo condiciones simuladas de accidente.
- Estudios sobre dinámica de pulsos y disipación térmica en núcleos reactivos.

## 5. Aplicaciones industriales:

- Realización de ensayos no destructivos mediante radiografía de neutrones.
- Análisis de composiciones químicas a través de técnicas de activación neutrónica.

## 2.3. Modelado y simulación en física nuclear

### 2.3.1. Métodos de Monte Carlo

El método de simulación de Monte Carlo es una técnica computacional que calcula la probabilidad de diversos resultados a partir de muestreos aleatorios repetidos. Fue desarrollado por John von Neumann y Stanislaw Ulam durante la Segunda Guerra Mundial para facilitar la toma de decisiones bajo condiciones de incertidumbre, y recibe su nombre de la ciudad de Monte Carlo, famosa por sus casinos, en alusión al papel fundamental del azar.

Esta metodología se utiliza ampliamente en campos como la inteligencia artificial, la cotización de acciones, la previsión de ventas, la gestión de proyectos y la simulación en física. Una de sus principales ventajas frente a los modelos predictivos de entradas fijas es que permite realizar análisis de sensibilidad, evaluar cómo influye cada variable en el resultado y calcular las correlaciones entre las variables de entrada.

A diferencia de un modelo tradicional con valores fijos, la simulación de Monte Carlo emplea distribuciones de probabilidad para variables inciertas. Posteriormente, ejecuta el modelo repetidas veces, tomando en cada iteración valores aleatorios distintos dentro del rango especificado. Cuantas más iteraciones se realizan, mayor es la precisión estadística de los resultados, lo que convierte a este método en una herramienta especialmente útil para experimentos con múltiples variables aleatorias.

---

En la simulación de reactores nucleares, los métodos de Monte Carlo han demostrado ser herramientas fundamentales por su capacidad para modelar fenómenos complejos sin recurrir a aproximaciones que puedan afectar de manera significativa los resultados. Este enfoque resulta particularmente relevante en el análisis dinámico de reactores, donde los cambios temporales en la distribución de neutrones y en la producción de potencia son esenciales para evaluar la criticidad del sistema.

En este contexto, Sjenitzer y Hoogenboom propusieron un método de Monte Carlo dinámico que supera las limitaciones de los códigos determinísticos tradicionales, permitiendo modelar tanto neutrones rápidos como térmicos en un sistema nuclear.[26]

El método de Monte Carlo dinámico se presenta como una alternativa precisa para simular el comportamiento transitorio de un reactor nuclear, evitando las aproximaciones inherentes a los métodos determinísticos convencionales.[26]

### **2.3.2. Herramientas y software de simulación**

Las herramientas de simulación han transformado profundamente el desarrollo de la física y de otras ciencias, consolidándose como una tercera vía de investigación junto con la teoría y el experimento. Este avance ha sido posible gracias al crecimiento de la capacidad de procesamiento computacional y a la disponibilidad de recursos tecnológicos, permitiendo que las simulaciones se conviertan en un complemento y, en muchos casos, en un sustituto de las interacciones físicas tradicionales.

Las simulaciones en física e ingeniería resultan especialmente relevantes cuando los recursos económicos o el tiempo necesario para construir un dispositivo o realizar un experimento no están disponibles. Estas herramientas permiten replicar sistemas complejos y analizar su comportamiento bajo diversas condiciones sin necesidad de construir prototipos físicos, ofreciendo múltiples ventajas: ahorro de recursos, reducción de tiempos de desarrollo, posibilidad de realizar pruebas en condiciones extremas y apoyo en procesos de enseñanza y capacitación.[27]

## **2.4. Geant4**

### **2.4.1. Descripción y aplicaciones**

Geant4 es una herramienta computacional utilizada para simular el paso de partículas y radiación a través de la materia, siendo ampliamente empleada en campos como la física de partículas, la medicina nuclear, la ciencia espacial, entre otros. Permite modelar geometrías, materiales, fuentes de radiación y detectar interacciones físicas en sistemas simulados, registrando datos relevantes de acuerdo con las necesidades específicas de cada aplicación.

---

Con un rango de energías que abarca desde el orden de los mili-electrón-voltios hasta cientos de giga-electrón-voltios, e incluso hasta 100 tera-electrón-voltios en ciertos casos, Geant4 incluye modelos físicos completos para describir interacciones electromagnéticas, nucleares y débiles. Además, ofrece configuraciones predefinidas denominadas *listas de física*, las cuales han sido probadas, optimizadas y validadas para facilitar su implementación en diferentes dominios científicos.

Geant4 es un software de código abierto y proporciona numerosos ejemplos para configuraciones simples y aplicaciones avanzadas, sirviendo como base para el desarrollo de herramientas personalizadas. Los usuarios pueden preconfigurar parámetros, definir fuentes de radiación y establecer métodos de registro de datos, adaptándolos a sus necesidades particulares.[28][29][30]

Algunas de sus principales aplicaciones incluyen:

- **Física de altas energías y física nuclear:** Geant4 es utilizado en experimentos del Gran Colisionador de Hadrones (LHC) y en proyectos futuros como CLIC, ILC y FCC. Permite diseñar y optimizar detectores, así como generar eventos simulados para el análisis de datos experimentales.
- **Ciencia espacial y evaluación de radiación:** organizaciones como la Agencia Espacial Europea (ESA) emplean Geant4 en proyectos como SPENVIS y GRAS para evaluar los efectos de la radiación espacial en satélites y cuerpos planetarios.
- **Física médica:** herramientas basadas en Geant4, como GATE y TOPAS, son utilizadas para la simulación de tratamientos oncológicos, tomografía por emisión de positrones (PET), tomografía computarizada (CT) y otras aplicaciones biomédicas.

#### 2.4.2. Componentes y módulos relevantes

Las simulaciones realizadas en Geant4 se basan en una arquitectura modular que integra componentes y módulos esenciales, proporcionando las funcionalidades necesarias para una representación precisa del núcleo del reactor. A continuación, se describen las responsabilidades de las clases más relevantes, abarcando desde la definición de la geometría y los materiales, hasta la gestión de la física de neutrones, la generación primaria de partículas, el control de eventos y la configuración inicial de la simulación.[31, 32]

##### Sistema de construcción del detector ( `DetectorConstruction` )

Este módulo define la geometría y los materiales del reactor simulado. Utiliza `G4NistManager` para construir materiales estándar como agua, aire y zirconio metálico, y crea compuestos personalizados tales como el ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ ) y el hidruro de zirconio con uranio enriquecido ( $\text{UZrH}$ ). Además, genera una mezcla homogénea del núcleo combinando agua, ácido bórico, combustible  $\text{U-ZrH}$  y zirconio metálico. El mundo de simulación es un volumen cúbico de aire transparente que contiene un reactor cilíndrico visualizado en color cian translúcido para facilitar la inspección gráfica.

---

## Listado de física personalizada ( `MyNeutronPhysicsList` )

Agrupación de los módulos de física necesarios para la simulación de neutrones en reactores, incluyendo:

- `G4EmStandardPhysics`: gestiona los procesos electromagnéticos de partículas cargadas y fotones.
- `G4DecayPhysics`: modela el decaimiento natural de partículas inestables.
- `G4RadioactiveDecayPhysics`: incorpora la desintegración de núclidos radiactivos y la emisión de neutrones retardados.
- `G4HadronPhysicsQGSP_BERT_HP`: modela interacciones hadrónicas de neutrones con datos experimentales de alta precisión.
- `G4IonPhysics`: describe la interacción de iones pesados, relevantes para la simulación de fragmentos de fisión.

## Generador primario de neutrones ( `PMPrimaryGenerator` )

Este componente simula una fuente puntual utilizando `G4ParticleGun`. La posición de cada neutrón se genera aleatoriamente dentro del volumen del reactor empleando coordenadas cilíndricas inversas, y la dirección se asigna de forma isotrópica mediante `G4RandomDirection`. La clase `PrimaryGeneratorAction` conecta este generador al sistema de `Geant4`, asegurando la correcta inicialización de los eventos primarios.

## Inicialización de acciones ( `ActionInitialization` )

Registra las acciones de usuario en el orden operativo requerido:

1. `PrimaryGeneratorAction`: generación de partículas primarias.
2. `RunAction`: control de operaciones antes y después de cada corrida.
3. `EventAction`: gestión de cada evento individual.
4. `SteppingAction`: seguimiento de partículas en cada paso de simulación.

## Acción de pasos ( `SteppingAction` )

Durante la ejecución de cada paso, esta acción filtra neutrones cuyas energías estén fuera del rango de interés (0.025 eV a 2 MeV), deteniéndolos mediante el estado `fStopAndKill`.

## Macro de inicialización y visualización ( `init_vis.mac` )

La macro `init_vis.mac` controla la inicialización del entorno de simulación, ajustando parámetros de verbosidad ( `/run/verbose`, `/event/verbose`, `/tracking/verbose` ) y lanzando la simulación mediante `/run/beamOn`. También incluye configuraciones de visualización como el color de fondo, el estilo de las trayectorias y opciones para la inspección interactiva de eventos.

### 3.1. Parámetros y variables clave

Los datos presentados en la tabla 3 describen las propiedades relevantes de los materiales involucrados en el reactor. Estos son fundamentales en la física de reactores, ya que una menor masa atómica, como la del  $H_2O$ , permite una mayor dispersión de neutrones, especialmente en el régimen térmico. Además, estos valores son esenciales para el cálculo de la densidad atómica.

Las dimensiones del reactor, mostradas en la tabla 4, son determinantes para el cálculo del volumen, la configuración geométrica del núcleo y el pandeo geométrico. Estas medidas afectan la distribución de neutrones, ya que la forma y el tamaño del reactor condicionan los procesos de dispersión y absorción en su interior.

**Tabla 3.** Propiedades físicas y secciones eficaces microscópicas de los compuestos evaluados [33, 34].

Propiedad	U	$H_3BO_3$	ZrH	Zirconio	$H_2O$
Volumen ( $cm^3$ )	1758.35	40.00	12894.56	482.64	14009.26
Densidad ( $g/cm^3$ )	6.00	1.44	6.00	6.50	1.00
Masa atómica (g/mol)	237.4	61.024	93.24	91.22	18.015
Fisión rápida ( $cm^2$ )	2.52E-25	0	0	0	0
Fisión térmica ( $cm^2$ )	1.18E-22	0	0	0	0
Dispersión rápida ( $cm^2$ )	6.62E-24	2.78E-23	1.20E-23	6.26E-24	1.40E-23
Dispersión térmica ( $cm^2$ )	1.02E-23	2.67E-23	1.17E-23	5.30E-24	1.03E-22
Absorción rápida ( $cm^2$ )	3.73E-25	1.19E-23	3.90E-30	7.20E-26	1.00E-26
Absorción térmica ( $cm^2$ )	1.40E-22	3.95E-21	2.09E-24	1.03E-26	3.30E-25
Porcentaje de volumen	(%) 6.02	0.14	44.18	1.65	48.00

---

**Tabla 4.** Dimensiones del núcleo del reactor de diseño TRIGA MKII [33].

Parámetro	Valor
Radio del reactor	15.62 cm
Altura del reactor	38.10 cm
Volumen del reactor	29 186.00 cm <sup>3</sup>

La información relativa a las secciones eficaces de los compuestos, presentada en la tabla 3, proporciona detalles sobre la probabilidad de interacción de cada material con los neutrones. Se observa, por ejemplo, que el uranio exhibe valores significativos en fisión y absorción térmica, lo cual evidencia su alta eficiencia para inducir reacciones nucleares en condiciones moderadas. Estos valores contrastan con los registros considerablemente menores en el régimen rápido, lo que demuestra la fuerte dependencia energética de los procesos nucleares.

Por último, es importante señalar que la densidad de ácido bórico necesaria para alcanzar la criticidad en el núcleo del reactor no proviene de las mismas fuentes bibliográficas que el resto de los datos. Esto se debe, en primer lugar, a que las referencias utilizadas asumen el uso de barras de control en lugar de ácido bórico disuelto en agua y, en segundo lugar, a que, debido a restricciones de potencia computacional, se redujo la cantidad de combustible, lo que afectó de manera proporcional la cantidad de moderador requerido.

El procedimiento para determinar la concentración necesaria de ácido bórico consistió en calcular inicialmente el valor de  $K_{\text{eff}}$  sin ácido bórico, obteniendo un estado supercrítico. Posteriormente, mediante el método de disparo, se ajustó la concentración de ácido hasta alcanzar el estado crítico. La concentración final obtenida fue de  $4 \times 10^{-4}$  g/cm<sup>3</sup>.

### 3.2. Implementación del modelo analítico

Como se mencionó al inicio de esta investigación, uno de los supuestos fundamentales es que el núcleo activo del reactor se considera como una mezcla homogénea de compuestos, lo cual permite realizar los cálculos de la siguiente manera.

El objetivo es calcular el valor de  $k_{\text{eff}}$  para el modelo de dos grupos en un reactor cilíndrico, utilizando la ecuación 2.59. Para calcular los coeficientes de difusión, se utilizan las ecuaciones (2.9), (2.10) y (2.12); mientras que, para determinar el pandeo geométrico, se aplica la ecuación (2.77). Sin embargo, dado que se utilizará una masa homogénea compuesta por varios elementos, es necesario determinar previamente las secciones eficaces combinadas de los materiales. El procedimiento se detalla a continuación:

1. Dado el volumen  $V$  y la densidad  $\rho$ , la masa  $m$  se calcula mediante:

$$m = \rho \times V \tag{3.1}$$

- 
2. Conocida la masa  $m$  y la masa atómica o molecular promedio  $M_{\text{avg}}$ , el número de moles  $n$  se obtiene a partir de:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} \quad (3.2)$$

3. Multiplicando el número de moles  $n$  por la constante de Avogadro  $N_A$ , se determina el número total de átomos  $N$ :

$$N = n \times N_A \quad (3.3)$$

4. La densidad atómica  $\rho_{\text{átomos}}$  se define como el número de átomos por unidad de volumen total  $V_{\text{total}}$ :

$$\rho_{\text{átomos}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} \quad (3.4)$$

5. Con la sección eficaz microscópica  $\sigma_{\text{mic}}$  conocida (a partir de tablas o literatura), la sección eficaz macroscópica  $\Sigma$  se calcula como:

$$\Sigma = \rho_{\text{átomos}} \times \sigma_{\text{mic}} \quad (3.5)$$

6. Finalmente, se suman todas las secciones eficaces de un mismo tipo para obtener la sección eficaz total del sistema homogéneo.

Este procedimiento es válido para todas las secciones eficaces, salvo para la sección eficaz de dispersión de neutrones rápidos a térmicos. En ese caso, se debe seguir un método diferente debido a las particularidades de la interacción de los neutrones rápidos con el medio. El procedimiento específico es el siguiente [19]:

1. Se parte de la sección eficaz microscópica de dispersión a una energía inicial  $E_i$ , denotada por  $\sigma_s$ .
2. Se calcula el parámetro  $\alpha$  utilizando:

$$\alpha = \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2, \quad (3.6)$$

donde  $A$  representa el número de masa del núcleo.

3. La sección eficaz microscópica de dispersión rápida a térmica se calcula mediante:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{\sigma_s}{(1-\alpha) E_i}, \quad (3.7)$$

asumiendo que  $E_i = 1 \text{ MeV}$  para describir el paso del neutrón del grupo rápido al térmico.

4. Finalmente, se obtiene la sección eficaz macroscópica de dispersión multiplicando por la densidad atómica  $N$ :

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = N \sigma_s(E_i \rightarrow E_f). \quad (3.8)$$

Al calcular todas las secciones eficaces, según el procedimiento detallado en el Anexo A, se obtuvieron los resultados que se presentan en las Tablas 5 y 6. Sustituyendo los valores de la Tabla 6 en la ecuación 2.59, y considerando la condición de criticidad establecida en la ecuación 3.9, se obtiene que el valor de  $k_{\text{eff}}$  calculado es igual a 1:

$$k = (2.34) \frac{(2.32 \times 10^{-4} + 1.08 \times 10^{-1}) \left( \frac{6.40}{(1.86 \times 10^{-1}) (3.0518 \times 10^{-2}) + 7.85 \times 10^{-4}} \right)}{6.40 + 2.50 \times 10^{-1} + (7.73 \times 10^{-1}) (3.0518 \times 10^{-2})} = 1 \quad (3.9)$$

**Tabla 5.** Densidades atómicas, secciones eficaces macroscópicas y coeficientes de difusión.

Propiedad	U	H <sub>3</sub> BO <sub>3</sub>	ZrH	Zirconio	H <sub>2</sub> O
Densidad atómica ( $\times 10^{22}$ átomos/cm <sup>3</sup> )	9.20E-02	2.00E-03	1.70E+00	7.10E-02	1.60E+00
Fisión rápida (cm <sup>-1</sup> )	2.32E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Fisión térmica (cm <sup>-1</sup> )	1.08E-01	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
Dispersión rápida (cm <sup>-1</sup> )	6.07E-03	5.42E-04	2.05E-01	4.44E-03	2.25E-01
Dispersión térmica (cm <sup>-1</sup> )	1.65E+00	5.20E-04	2.00E-01	9.36E-03	3.76E-03
Absorción rápida (cm <sup>-1</sup> )	3.42E-04	2.31E-04	6.68E-08	5.11E-05	1.60E-04
Absorción térmica (cm <sup>-1</sup> )	1.28E-01	7.69E-02	3.57E-02	7.32E-06	5.29E-03
Dispersión rápida $\rightarrow$ térmica (cm <sup>-1</sup> )	3.63E-01	8.96E-03	4.80E+00	1.02E-01	1.13E+00
Coefficiente de difusión rápida (cm)	6.10E-03	5.40E-04	2.00E-01	4.40E-03	2.20E-01
Coefficiente de difusión térmica (cm)	9.30E-03	5.10E-04	2.00E-01	3.70E-03	1.60E+00

**Tabla 6.** Parámetros globales de sección eficaz y difusión utilizados en el modelo analítico.

Parámetro	Valor
Sección eficaz macroscópica de fisión rápida (cm <sup>-1</sup> )	2.32E-04
Sección eficaz macroscópica de fisión térmica (cm <sup>-1</sup> )	1.08E-01
Coefficiente de difusión térmico (cm)	1.86E-01
Coefficiente de difusión rápido (cm)	7.73E-01
Pandeo geométrico (cm <sup>-2</sup> )	3.05E-02
Sección eficaz macroscópica de absorción rápida (cm <sup>-1</sup> )	2.50E-01
Sección eficaz macroscópica de absorción térmica (cm <sup>-1</sup> )	7.85E-04
Sección eficaz macroscópica de dispersión rápida a térmica (cm <sup>-1</sup> )	6.40E+00

---

### 3.3. Diseño de la simulación

#### 3.3.1. Esquemáticos del reactor y componentes simulados

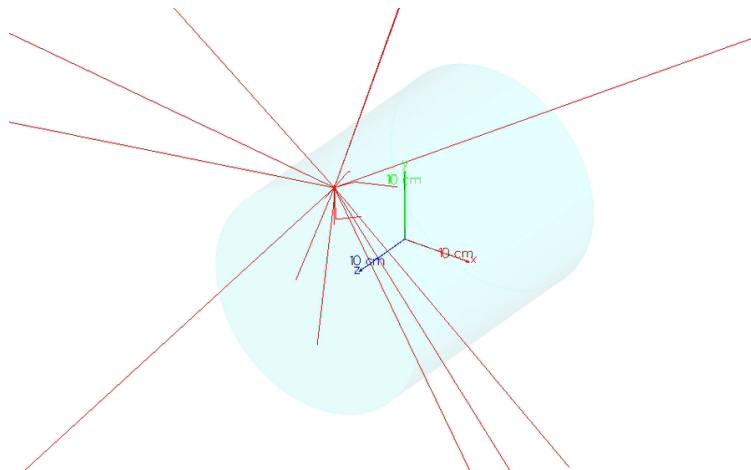
El núcleo del reactor modelado se representa mediante una geometría cilíndrica homogénea, ubicada en el centro de un volumen cúbico de aire que actúa como contención externa. Esta aproximación permite estudiar la difusión de neutrones en un entorno simplificado, enfocado en el comportamiento en estado estacionario.

La simulación incorpora los siguientes elementos principales:

- **Mundo exterior:** Un cubo de aire de 2 metros de lado, modelado como volumen de contención.
- **Reactor:** Un cilindro de radio y altura como se muestra en la tabla 4, compuesto por una mezcla homogénea de materiales: agua, ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ ), hidruro de zirconio con uranio enriquecido ( $\text{UZrH}$ ) y zirconio metálico.

La Figura 6 muestra un esquema conceptual del modelo implementado, resaltando los límites del reactor y la región de interés para la simulación de neutrones. El volumen del reactor se visualizó con atributos de transparencia para permitir la observación de las trayectorias de las partículas.

**Figura 6.** Esquemático simplificado del núcleo del reactor y su entorno simulado.



Debido a la naturaleza exploratoria de esta investigación, se asumió el uso de combustible fresco, sin quemado previo, y sin la presencia explícita de elementos estructurales como barras de control o reflectores de neutrones. Estas simplificaciones fueron necesarias para centrarse en el modelado básico del coeficiente efectivo de multiplicación de neutrones ( $k_{eff}$ ) bajo condiciones ideales.

---

### 3.3.2. Simplificaciones y supuestos

La implementación de la simulación consideró un conjunto de simplificaciones y supuestos teóricos y experimentales, orientados a facilitar el modelado computacional y enfocarse en los fenómenos esenciales del transporte de neutrones en el núcleo del reactor. Estas decisiones, aunque reducen el nivel de complejidad física, permiten obtener resultados reproducibles y comparar tendencias generales de comportamiento.

- **Homogeneización del núcleo**

Se asumió que todos los materiales combustibles, moderadores y estructurales están perfectamente mezclados en una composición homogénea.

- **Geometría idealizada**

El núcleo fue modelado como un cilindro perfecto, sin considerar irregularidades geométricas, elementos estructurales como barras de control, reflectores laterales, dispositivos de medición, ni otras estructuras internas que podrían afectar el campo de neutrones. Esta aproximación facilita la solución numérica del transporte de partículas.

- **Materiales frescos y sin quemado**

Todos los materiales combustibles fueron considerados como *frescos*, es decir, sin efectos de quemado ni acumulación de productos de fisión. No se incorporaron cambios en la composición isotópica a lo largo de la simulación. Este supuesto permite enfocarse exclusivamente en las propiedades iniciales del reactor sin incluir la evolución temporal de los materiales.

- **Temperatura y densidad constantes**

Se asumió que todos los materiales del reactor permanecen a temperatura y densidad constantes durante la simulación. En un reactor real, la temperatura afecta las secciones eficaces de captura y dispersión de neutrones (fenómenos de ensanchamiento Doppler), pero para este estudio se omitieron dichos efectos térmicos.

- **Ausencia de fugas externas detalladas**

Aunque el volumen mundial permite que partículas abandonen el núcleo, no se modelaron explícitamente los mecanismos de contención de fugas (tales como blindajes, tanques de agua, u otras estructuras de contención). El interés principal se centró en la interacción de neutrones dentro del núcleo.

- **Energías iniciales y emisión isotrópica**

La distribución inicial de energías de los neutrones sigue una distribución de Watt representativa del isótopo Cf-252, y se asume emisión completamente isotrópica. No se consideraron anisotropías de emisión ni correcciones por autoabsorción inicial.

- **Modelo físico seleccionado**

La física de neutrones se modeló utilizando el paquete G4HadronPhysicsQGSP\_BERT\_HP, que proporciona descripciones detalladas de las interacciones en función de bases de datos experimentales. No obstante, no se incluyeron fenómenos de transporte avanzado como la dispersión anisotrópica dependiente del ángulo o los efectos de espectro de epitérmicos.

---

### 3.3.3. Detalles de la implementación en Geant4

El modelo de simulación fue implementado utilizando la versión 11 de Geant4, siguiendo una arquitectura modular que permite representar claramente las distintas fases del transporte de neutrones en el núcleo del reactor. Esta implementación favorece un diseño claro y orientado a la mejora progresiva del sistema simulado. A continuación, se describen en detalle los aspectos más relevantes:

- **Flujo general de ejecución**

El archivo principal `main.cc` configura el entorno de ejecución de la simulación. En primer lugar, inicializa el motor de generación de números aleatorios, seleccionando explícitamente `RanecuEngine` para garantizar la calidad estadística de los eventos. Posteriormente, crea una instancia del `G4RunManager`, responsable de coordinar la inicialización de los componentes críticos: la geometría (`DetectorConstruction`), los procesos físicos (`MyNeutronPhysicsList`) y las acciones de usuario (`ActionInitialization`). Finalmente, el programa ejecuta un macro de control (`init_vis.mac`) que establece los parámetros de visualización y lanza la simulación de eventos.

- **Definición de la geometría**

La clase `DetectorConstruction` define la geometría del entorno de simulación. Se crea un volumen global (`World`) como un cubo de aire (`G4Box`), que actúa como contención exterior. Dentro de este volumen se ubica el reactor, modelado como un cilindro (`G4Tubs`) construido a partir de una mezcla homogénea de agua, ácido bórico, hidruro de zirconio con uranio enriquecido y zirconio metálico. La definición de materiales se realiza utilizando tanto materiales estándar de la base de datos de NIST (`G4NistManager`) como compuestos personalizados. Para la representación gráfica, se asignan atributos de visualización (`G4VisAttributes`) que permiten observar las trayectorias de los neutrones a través de un reactor semitransparente.

- **Configuración de procesos físicos**

La clase `MyNeutronPhysicsList` organiza y registra los paquetes de procesos físicos necesarios para la simulación de neutrones en el reactor. Incluye la física electromagnética estándar (`G4EmStandardPhysics`), los decaimientos naturales de partículas inestables (`G4DecayPhysics`), los procesos de desintegración radiactiva, incluyendo la emisión de neutrones retardados (`G4RadioactiveDecayPhysics`), las interacciones hadrónicas de neutrones con bases de datos experimentales de alta precisión (`G4HadronPhysicsQGSP_BERT_HP`), y la física de iones pesados (`G4IonPhysics`). Esta selección garantiza una representación precisa de los fenómenos relevantes en un núcleo de reactor de investigación.

- **Generación primaria de partículas**

La generación de partículas primarias se gestiona mediante la clase `PMPrimaryGenerator`, que emplea un objeto `G4ParticleGun` configurado para emitir un neutrón por evento. La posición inicial de cada neutrón se genera aleatoriamente dentro del volumen cilíndrico del reactor, utilizando coordenadas polares inversas, mientras que la dirección de emisión se asigna de forma isotrópica mediante la función `G4RandomDirection`.

---

La energía de los neutrones se modela aplicando una distribución de Watt típica de fuentes espontáneas de Cf-252, lo que asegura una representación estadística adecuada de las energías iniciales.

■ **Acciones de usuario**

La interacción del usuario con la simulación se implementa mediante un conjunto de acciones específicas. La clase `PrimaryGeneratorAction` administra la generación de eventos primarios; `RunAction` define los comportamientos globales al inicio y al final de cada corrida; `EventAction` gestiona las acciones al inicio y final de cada evento, permitiendo la recolección estadística; y `SteppingAction` filtra las trayectorias de neutrones según su energía, deteniendo aquellas que se encuentren fuera del rango de interés (entre 0.025 eV y 2 MeV) mediante el mecanismo `fStopAndKill`. Todas estas acciones son registradas y coordinadas por la clase `ActionInitialization`.

■ **Inicialización y control de la simulación**

La macro de control `init_vis.mac` establece las condiciones iniciales de ejecución. Configura la apertura de una ventana de visualización basada en OpenGL, ajusta parámetros como el color de fondo y el estilo de trayectorias, y define los niveles de verbosidad para el seguimiento de eventos. Además, contiene los comandos necesarios para inicializar el entorno de Geant4 (`/run/initialize`) y ejecutar una cantidad predeterminada de eventos (`/run/beamOn`). Esta macro permite tanto la ejecución en modo batch como en modo interactivo, facilitando la inspección cualitativa de los resultados.

### 3.4. Flujo de ejecución del código de simulación

El código de simulación desarrollado en Geant4 sigue un flujo modular que facilita su mantenimiento y extensión. A continuación se describe el orden de ejecución y la interacción entre los distintos componentes:

1. **Inicialización (`main.cc`):** Se crea una instancia de `G4RunManager`, que gestiona el ciclo de vida de la simulación. A continuación se registran los módulos principales:
  - `DetectorConstruction`: define la geometría y materiales del reactor.
  - `MyNeutronPhysicsList`: incluye los procesos físicos relevantes (fisión, absorción, dispersión).
  - `ActionInitialization`: conecta las acciones de usuario.
2. **Configuración de acciones (`ActionInitialization.cc`):** Se registran las clases `RunAction`, `EventAction` y `SteppingAction`, que implementan la lógica de conteo y registro de neutrones.
3. **Inicio de la visualización (`init_vis.mac`):** Opcionalmente, se carga un macro de visualización para mostrar la geometría y rastrear partículas en tiempo real.
4. **Ejecución de la simulación:** Se invoca `runManager->BeamOn(nEventos)`, lo que inicia:

- 
- `RunAction::BeginOfRunAction`: inicializa contadores globales.
  - Para cada evento:
    - `EventAction::BeginOfEventAction`: reinicia contadores del evento.
    - Durante cada paso, `SteppingAction`: detecta procesos de fisión y absorción, incrementando los contadores correspondientes.
    - `EventAction::EndOfEventAction`: acumula los datos del evento.
  - `RunAction::EndOfRunAction`: calcula estadísticas finales y escribe resultados en archivo de salida.

## 5. Cálculo de $K_{\text{eff}}$ (`calc_k.py`):

Un script en Python procesa el log generado, extrae los neutrones de fisión y absorción totales y calcula el factor de multiplicación efectivo.

El código extrae las cantidades necesarias para realizar el balance de neutrones y calcular el valor de  $K_{\text{eff}}$  en cada corrida. Además, incluye funciones para la detección automática del número de eventos fuente (neutrones iniciales), a partir de las macros de control de Geant4, lo que facilita la comparación entre distintas simulaciones.

El procesamiento por lotes de 15 segundos cada uno se implementó para optimizar el uso de memoria, permitiendo analizar grandes volúmenes de datos sin saturar los recursos de cómputo. Este procedimiento asegura la consistencia y homogeneidad en la obtención de resultados. Para mayor detalle sobre el flujo de trabajo y acceso al código fuente, se remite al Anexo B, donde se presenta el diagrama correspondiente 7 y el enlace al repositorio público en GitHub.

En la Tabla 7 resume las medias y desviaciones estándar correspondientes, mientras que la Tabla 8 se presentan los datos obtenidos de cada corrida de simulación.

La herramienta `calc_k.py` fue esencial para organizar las estadísticas relevantes de cada simulación, calculando automáticamente el balance de neutrones y proporcionando el valor de  $K_{\text{eff}}$  para cada bloque temporal.

Para la obtención de los resultados, se consideraron las siguientes condiciones:

- Se verificó que la desviación estándar de la media del factor de multiplicación efectivo  $K_{\text{eff}}$  fuera baja, asegurando estabilidad entre las corridas.
- Se asumió que las condiciones de operación y el flujo de neutrones permanecían constantes durante cada ventana temporal de 15 segundos.
- La geometría del reactor se modeló de manera idealizada, considerando los materiales como homogéneos.

**Tabla 7.** Resultados promedio de las 20 corridas independientes de la simulación.

Tipo	Media	Desviación Estándar de la Media
Número de fuentes ( <b>source</b> )	3.45E+07	0.00E+07
Fisiones ( <b>fission</b> )	1.47E+06	0.00E+07
Neutrones incidentes ( <b>n.in</b> )	3.54E+06	0.001E+06
Fotofisión ( <b>fotofision</b> )	7.52E+05	0.004E+05
Fisión incidente ( <b>fission incidente</b> )	6.29E+05	0.002E+5
Captura ( <b>captura</b> )	2.03E+05	0.001E+05
Fuga geométrica ( <b>fuga geometrica</b> )	4.19E+07	0.001E+07
Factor de multiplicación efectivo $K_{\text{eff}}$	9.41E-01	0.0002E-01

**Tabla 8.** Resultados de la simulación Monte Carlo de numero de neutrones producidos en un reactor de investigación simplificado en Geant4 para las corridas 1 a 20.

Corrida	Source E+07	Fisión E+06	n.in E+06	Fotofisión E+05	Fisión Inc. E+05	Captura E+05	Fuga Geom. E+07	Suma Ganancias E+07	Suma Pérdidas E+07	K efectivo
1	3.45	1.47	3.54	7.51	6.29	2.02	4.19	4.02	4.27	0.94134
2	3.45	1.47	3.55	7.54	6.29	2.04	4.20	4.02	4.27	0.94119
3	3.45	1.47	3.54	7.48	6.28	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94131
4	3.45	1.47	3.55	7.53	6.29	2.02	4.20	4.02	4.27	0.94129
5	3.45	1.47	3.54	7.52	6.29	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94130
6	3.45	1.47	3.54	7.51	6.28	2.04	4.19	4.02	4.27	0.94129
7	3.45	1.47	3.55	7.54	6.29	2.03	4.20	4.02	4.27	0.94132
8	3.45	1.47	3.55	7.54	6.29	2.04	4.20	4.02	4.27	0.94120
9	3.45	1.47	3.54	7.50	6.28	2.04	4.19	4.02	4.27	0.94138
10	3.45	1.47	3.54	7.52	6.27	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94161
11	3.45	1.47	3.54	7.54	6.29	2.04	4.20	4.02	4.27	0.94124
12	3.45	1.47	3.54	7.55	6.29	2.03	4.20	4.02	4.27	0.94126
13	3.45	1.47	3.54	7.49	6.27	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94142
14	3.45	1.47	3.54	7.52	6.28	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94144
15	3.45	1.47	3.54	7.52	6.28	2.04	4.19	4.02	4.27	0.94133
16	3.45	1.47	3.54	7.52	6.28	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94144
17	3.45	1.47	3.55	7.52	6.29	2.03	4.20	4.02	4.27	0.94109
18	3.45	1.47	3.54	7.54	6.29	2.03	4.20	4.02	4.27	0.94132
19	3.45	1.47	3.54	7.50	6.28	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94129
20	3.45	1.47	3.54	7.52	6.28	2.03	4.19	4.02	4.27	0.94140

### 4.1. Presentación de los resultados

Con el ácido bórico incorporado como moderador, a una concentración de  $4 \times 10^{-4} \text{ g/cm}^3$ , y contribuyendo a la absorción de neutrones térmicos y el estado subcrítico del sistema, se pudo ajustar el modelo analítico —desarrollado en estado estacionario bajo condiciones homogéneas ideales— a un valor de criticidad igual a.

$$k_{\text{eff}}^{\text{analítico}} = 1.00$$

Por su parte, la simulación Monte Carlo implementada en Geant4, basada en una geometría equivalente del núcleo que incluye la presencia del ácido bórico como absorbente homogéneo, arrojó el siguiente resultado promedio.

$$k_{\text{eff}}^{\text{simulación}} = (94132 \pm 2) \times 10^{-5}$$

Este valor representa una desviación subcrítica del 5.9 %, lo cual es coherente con las simplificaciones geométricas y materiales asumidas en el modelo, y confirma la estabilidad esperada para reactores de investigación bajo condiciones controladas.

---

## 4.2. Discusión de resultados

### 4.2.1. Análisis de resultados

Los resultados obtenidos a partir del modelo analítico permiten establecer un punto de referencia para el comportamiento crítico del reactor nuclear simulado. Empleando los procedimientos descritos para el cálculo de densidades atómicas, secciones eficaces macroscópicas y coeficientes de difusión, fue posible determinar el valor del factor de multiplicación efectivo ( $K_{\text{eff}}$ ) bajo condiciones ideales.

El valor teórico de  $K_{\text{eff}}$  fue resultado de calcular el valor de boro necesario para que este diera 1, como se muestra en la ecuación (3.9). Este resultado indica que, bajo los supuestos de homogeneidad del núcleo, ausencia de efectos dependientes del tiempo y sin considerar pérdidas adicionales o errores estadísticos, el reactor se encuentra en estado crítico. Es decir, cada generación de neutrones produce exactamente una nueva generación idéntica, lo que representa una condición de equilibrio necesaria para la operación segura de reactores de investigación.

Es importante señalar que este análisis teórico no incorpora fenómenos estocásticos asociados a la dinámica de los neutrones, ni las fluctuaciones inherentes a los materiales o geometrías reales, propias de un sistema físico complejo.

En la parte experimental, los resultados obtenidos mediante simulaciones en Geant4 muestran una notable consistencia con el modelo teórico. Se realizaron veinte corridas, cada una correspondiente a un tiempo de simulación acumulado de 15 segundos. Esta metodología se debió a que cada archivo de 15 segundos ocupa aproximadamente 131 GB de memoria; de haberse simulado los 5 minutos de manera continua, se habría requerido un volumen de almacenamiento superior a dos terabytes, lo cual no fue viable debido a limitaciones de hardware.

Los valores obtenidos para  $K_{\text{eff}}$  en cada corrida presentaron una variación muy pequeña como se resume en la tabla 8. Este resultado sugiere que el sistema, aunque ligeramente subcrítico en comparación con el valor teórico ideal de 1.0, se comporta de manera estable y reproducible en condiciones estáticas.

Comparando los resultados teóricos y experimentales, se concluye que existe una buena correspondencia cualitativa entre ambos enfoques. Aunque la simulación no alcanzó exactamente  $k = 1$ , la diferencia obtenida fue del orden de 5.9%, lo cual puede considerarse aceptable y de las simplificaciones asumidas.

La comparación entre los resultados teóricos y los datos de la simulación proporciona una perspectiva clara sobre el comportamiento del reactor bajo las condiciones planteadas en esta investigación. Mientras que los resultados teóricos predijeron una condición crítica exacta ( $k = 1$ ), las simulaciones arrojaron un valor medio de  $K_{\text{eff}}$  ligeramente subcrítico, ver tabla 7.

---

La estabilidad de los resultados de la simulación, respaldada por la baja desviación estándar de la media, permite inferir que el sistema simulado se comporta de manera confiable bajo condiciones estacionarias, lo cual refuerza la validez de los parámetros de entrada y del modelo planteado.

El hecho de que la simulación haya arrojado un reactor ligeramente subcrítico es, en realidad, favorable para la mayoría de las aplicaciones prácticas. Un reactor subcrítico presenta una respuesta más estable frente a perturbaciones, lo que favorece su operación segura, especialmente en reactores de investigación donde se realizan múltiples experimentos simultáneos[35].

La posibilidad de modelar, simular y analizar reactores de investigación utilizando herramientas modernas como Geant4 representa un avance significativo para el desarrollo científico en Guatemala. Dado que actualmente no existe un reactor nuclear operativo en el país, estos estudios constituyen una base fundamental para el establecimiento de conocimientos y metodologías necesarios que impulsen futuras aplicaciones en las áreas médica, industrial, de producción de radioisótopos y en la educación en física nuclear en Guatemala.

Además, el dominio de estas técnicas podría posicionar a Guatemala como un potencial colaborador en proyectos internacionales de ciencia aplicada que requieren infraestructura nuclear segura y confiable, abriendo nuevas oportunidades de crecimiento tecnológico y académico.

#### 4.2.2. Limitaciones del estudio

Este estudio presenta diversas limitaciones inherentes al modelo y a la metodología empleada. Una de las principales restricciones es la geometría idealizada del núcleo, donde se asume una configuración simplificada de simetría cilíndrica. Este enfoque facilita el tratamiento matemático y computacional del problema, aunque omite detalles estructurales relevantes, como la disposición precisa de las barras de combustible, los canales de refrigeración o los elementos de contención [3].

Asimismo, el análisis se realiza en condiciones de estado estacionario, sin considerar fenómenos transitorios. Esto implica que no se modelan ni el arranque ni el apagado del reactor, ni tampoco las variaciones rápidas de reactividad. En este sentido, las respuestas frente a perturbaciones externas son excluidas deliberadamente, enfocando el estudio en un comportamiento estático idealizado [36].

En coherencia con esta aproximación estática, el modelo excluye la contribución de neutrones retardados en el cálculo de la criticidad efectiva ( $k_{ef}$ ). Se consideran únicamente neutrones inmediatos, dejando fuera un pequeño porcentaje de neutrones retardados que, en la práctica, resultan fundamentales para el control y la estabilidad operacional de un reactor, ya que su aparición puede demorar hasta 56 segundos. Dado el tamaño de los segmentos de tiempo simulados, estos neutrones son poco propensos a aparecer [37].

---

De igual manera, el modelo analítico utilizado no contempla fenómenos estocásticos, operando con valores medios continuos. Esta elección metodológica ignora las fluctuaciones en los procesos de producción, absorción y fuga de neutrones, así como las variaciones microscópicas de los materiales. El resultado es una representación “suavizada” del comportamiento real del reactor, eliminando el componente aleatorio que caracteriza a los sistemas físicos reales [38].

En cuanto al tratamiento energético, se recurre a datos nucleares promediados por grupos. Se emplean únicamente dos grandes grupos de energía —rápidos y térmicos—, sin diferenciar el espectro epitérmico ni considerar de manera precisa las resonancias de absorción, como las asociadas al  $^{238}\text{U}$ . Esta aproximación omite fenómenos importantes como el auto-blindaje en las secciones eficaces [39].

Por otro lado, las restricciones de memoria y tiempo de cómputo impusieron limitaciones prácticas en las simulaciones realizadas mediante Geant4. Simular apenas 15 segundos de operación genera alrededor de 131 GB de datos, mientras que extender la corrida continua a 5 minutos excedería los 2 TB de memoria disponible. Como solución, las simulaciones se fragmentaron en lotes de 15 segundos, agrupándose posteriormente en aproximadamente 20 corridas independientes. Esta fragmentación implica un sobrecosto en la gestión de datos y la imposibilidad de simular el comportamiento del reactor de manera continua.

Finalmente, cabe señalar la incertidumbre en el post-procesamiento de resultados. El valor final de  $k_{\text{ef}}$  se obtiene mediante un script externo (`calc_k.py`) que analiza los registros generados por Geant4. Sin embargo, cualquier cambio en el formato de salida o error en la identificación de eventos podría sesgar significativamente los resultados. Idealmente, este proceso debería integrarse directamente en la simulación o complementarse con métodos alternativos de validación que aseguren su robustez.

1. Se partió de la ecuación general de transporte, simplificándola primero respecto a los ángulos y al tiempo, y luego se aplicó la ley de Fick para derivar la ecuación de difusión.
2. Al realizar la comparación entre los resultados mediante el modelo analítico y los generados a través de la simulación Monte Carlo en Geant4, se identificó una diferencia relativa del 5.9% en el valor del factor de multiplicación efectivo ( $K_{\text{eff}}$ ).
3. A partir de la ecuación de difusión y las secciones eficaces promedio, se ajustó el modelo analítico para entregar un valor de  $K_{\text{eff}} = 1$ , validando teóricamente la criticidad del sistema bajo los supuestos de homogeneidad y estado estacionario.
4. La ecuación de transporte permite modelar de forma completa la dinámica de neutrones y su simplificación mediante la ecuación de difusión. Esto facilitó el análisis del flujo neutrónico en estado estacionario. Ambas ecuaciones fueron necesarias para comprender y predecir el comportamiento crítico del reactor.
5. El desarrollo en Geant4 incluyó materiales homogéneos (combustible, moderador y ácido bórico) y el postprocesamiento de resultados mediante el script `calc_k.py`.
6. La simulación Monte Carlo en Geant4, segmentada en corridas de 15 segundos, arrojó un valor medio de  $K_{\text{eff}} \approx 0.94132$ , acorde con el modelo analítico idealizado, confirmando la validez cualitativa del enfoque planteado.
7. El método empleado establece una base sólida para futuros proyectos de uso pacífico de tecnología nuclear en Guatemala, que permite la formación local de recursos humanos y el desarrollo de capacidades en simulación de reactores nucleares.

Como líneas de trabajo futuras, se propone:

- Implementar un modelo multigrupo más detallado, dividiendo el espectro de neutrones en varias regiones energéticas, para capturar de manera más precisa la dinámica de transporte y absorción.
- Introducir condiciones de operación reales, incluyendo cambios de temperatura y variaciones de potencia en el tiempo, a fin de reflejar de manera más fiel el comportamiento del reactor en condiciones dinámicas.
- Realizar simulaciones de transitorios para estudiar la respuesta dinámica del reactor ante perturbaciones de reactividad, evaluando la estabilidad y seguridad operacional bajo distintos escenarios.
- Promover la gestión institucional ante entidades gubernamentales para la obtención de financiamiento y autorizaciones necesarias que faciliten el acceso a recursos computacionales avanzados y equipamiento adecuado para realizar experimentación en el área de física nuclear.

- [1] Organismo Internacional de Energía Atómica. Los reactores de investigación y su uso. *Boletín del OIEA*, 2019.
- [2] Institut Laue-Langevin. Características técnicas del reactor de alto flujo, 2025. Último acceso: 11 de febrero de 2025.
- [3] Organismo Internacional de Energía Atómica. History, development and future of triga research reactors, 2016. Último acceso: 11 de febrero de 2025.
- [4] Forschungs-Neutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz (FRM II). The neutron source, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [5] MIT Nuclear Reactor Laboratory. About, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [6] Oak Ridge National Laboratory. High flux isotope reactor (hfir), 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [7] Australian Nuclear Science and Technology Organisation. Opal multi-purpose reactor, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [8] Belgian Nuclear Research Centre (SCK • CEN). Production of radioisotopes and ntd-silicon in the br2 reactor, 2011. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [9] Narodowe Centrum Badań Jądrowych (NCBJ). Maria reactor, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [10] NeutronSources.org. Japan research reactor no.3 (jrr-3), 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [11] Comisión Nacional de Energía Atómica. Ra-3 y ra-6: Reactores argentinos de investigación y producción de radioisótopos, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.

- 
- [12] John R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Engineering*. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2nd edition, 1999.
- [13] Organismo Internacional de Energía Atómica. Lección 4 - beta y neutrones, 2018. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [14] M. Albertsson. Energy dependence of fission-fragment neutron multiplicity in  $^{235}\text{U}(n, f)$ . *arXiv preprint arXiv:1812.09208*, 2018. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [15] Radiopaedia. Bremsstrahlung radiation, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [16] Metrohm Process Analytics. Online analysis of boric acid in the cooling water of pressurized water reactors. Accedido el 12 de febrero de 2025.
- [17] Nuclear-Power.com. Multiplication factor, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [18] Nuclear-Power.com. Six-factor formula - effective multiplication factor, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [19] James J. Duderstadt and Louis J. Hamilton. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley & Sons, New York, 1976.
- [20] Douglas G. Bowen and Robert D. Busch. Hand calculation methods for criticality safety: A primer. Technical Report LA-14244-M, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 2006. Approved for Public Release; distribution is unlimited.
- [21] Nuclear-Power.com. Diffusion coefficient, 2025. Último acceso: 12 de febrero de 2025.
- [22] International Atomic Energy Agency. What is nuclear energy? the science of nuclear power, 2022. Último acceso: 13 de febrero de 2025.
- [23] Nuclear-Power.com. Fick's law in neutron diffusion theory, 2025. Último acceso: 13 de febrero de 2025.
- [24] Science Education Resource Center (SERC) - Carleton College. Instrumental neutron activation analysis (inaa), 2025. Último acceso: 13 de febrero de 2025.
- [25] The University of Texas at Austin. Triga ii research reactor safety analysis report. Technical report, The University of Texas at Austin, 2023. Último acceso: 13 de febrero de 2025.
- [26] Bart L. Sjenitzer and J. Eduard Hoogenboom. A monte carlo method for calculation of the dynamic behaviour of nuclear reactors. *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2:716–721, 2011.
- [27] Tomás Rosales Palacios. La importancia de la simulación en los sistemas físicos, 2018. Último acceso: 14 de febrero de 2025.
- [28] J. Allison et al. Recent developments in geant4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 835:186–225, 2016.
- [29] J. Allison et al. Geant4 developments and applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 53(1):270–278, 2006.

- 
- [30] S. Agostinelli et al. Geant4 – a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506:250–303, 2003.
- [31] Geant4 Collaboration. *Geant4 Application Developer’s Guide*. CERN, 2024. Accedido: 28 abril 2025.
- [32] Geant4 Collaboration. *Geant4 Toolkit Developer’s Guide*. CERN, 2024. Accedido: 28 abril 2025.
- [33] M. Ravnik. Description of triga reactor. *Technical document, Jožef Stefan Institute, 1994. Includes technical and operational characteristics of the TRIGA Mark II reactor at the J. Stefan Institute*.
- [34] National Nuclear Data Center. *Evaluated nuclear data file (endf)*. <https://www.nndc.bnl.gov/endf/>, 2025. Accessed: 2025-03-21.
- [35] Nuclear Power for Everybody. *Subcritical multiplication factor, 2023*. Accessed: 2025-05-13.
- [36] H. Konno. *Non-stationary behaviour of the non-linear dynamical power-reactor model with temperature feedback*. *Annals of Nuclear Energy*, 11(8):405–417, December 1984.
- [37] World Nuclear Association. *Physics of uranium and nuclear energy*. <https://world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/introduction/physics-of-nuclear-energy>, 2025. Updated 20 January 2025; accessed 7 May 2025.
- [38] Luis Alejandro Torres Delgado. *Técnicas de análisis para la vigilancia y monitorización del ruido neutrónico en centrales nucleares*. *Tesis doctoral, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas y Energía, Universidad Politécnica de Madrid, 2023*.
- [39] Vladimir Radulović, Nicolas Thiollay, Hubert Carcreff, Anže Pungerčič, Klemen Ambrožič, Christophe Destouches, and Andrej Trkov. *Epithermal neutron activation dosimetry-(n, ) reactions under boron-based filters*. *Scientific Reports*, 14(1):28604, November 2024.

## 8.1. Cálculos

### Cálculo de densidades atómicas

En esta sección se detallan los procedimientos utilizados para calcular la densidad atómica de los compuestos presentes en el núcleo del reactor. El cálculo se basa en los parámetros de volumen, densidad y masa atómica promedio de cada material, siguiendo la metodología establecida en el modelo analítico.

El procedimiento general comprende:

1. Cálculo de la masa  $m$  a partir de la densidad  $\rho$  y el volumen  $V$ .
2. Determinación del número de moles  $n$  dividiendo la masa  $m$  entre la masa atómica promedio  $M_{\text{avg}}$ .
3. Obtención del número total de átomos  $N$  multiplicando los moles  $n$  por la constante de Avogadro  $N_A$ .
4. Cálculo de la densidad atómica  $\rho_{\text{at}}$  dividiendo el número de átomos  $N$  entre el volumen total  $V_{\text{total}}$ .

A continuación, se presentan los resultados para cada uno de los compuestos:

#### 1. Uranio (U)

Masa:

$$m = \rho \times V = 6 \text{ g/cm}^3 \times 14652.92 \text{ cm}^3 \approx 1.0550 \times 10^4 \text{ g.}$$

Moles:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} = \frac{1.0550 \times 10^4}{237.4} \approx 4.4440 \times 10^1 \text{ mol.}$$

---

Número de átomos:

$$N = n \times N_A = (4.4440 \times 10^1)(6.022 \times 10^{23}) \approx 2.6762 \times 10^{25} \text{ átomos.}$$

Densidad atómica:

$$\rho_{\text{at}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} = \frac{2.6762 \times 10^{25}}{2.9187 \times 10^4} \approx 9.1692 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

## 2. Ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ )

Masa:

$$m = \rho \times V = 1.44 \text{ g/cm}^3 \times 42.44 \text{ cm}^3 \approx 6.048 \times 10^1 \text{ g.}$$

Moles:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} = \frac{6.048 \times 10^1}{61.024} \approx 9.911 \times 10^{-1} \text{ mol.}$$

Número de átomos:

$$N = n \times N_A = (9.911 \times 10^{-1})(6.022 \times 10^{23}) \approx 5.9683 \times 10^{23} \text{ átomos.}$$

Densidad atómica:

$$\rho_{\text{at}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} = \frac{5.9683 \times 10^{23}}{2.9187 \times 10^4} \approx 2.0449 \times 10^{19} \text{ átomos/cm}^3.$$

## 3. Hidruro de circonio ( $\text{ZrH}$ )

Masa:

$$m = \rho \times V = 6 \text{ g/cm}^3 \times 12894.56 \text{ cm}^3 \approx 7.7367 \times 10^4 \text{ g.}$$

Moles:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} = \frac{7.7367 \times 10^4}{93.24} \approx 8.2977 \times 10^2 \text{ mol.}$$

Número de átomos:

$$N = n \times N_A = (8.2977 \times 10^2)(6.022 \times 10^{23}) \approx 4.9969 \times 10^{26} \text{ átomos.}$$

Densidad atómica:

$$\rho_{\text{at}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} = \frac{4.9969 \times 10^{26}}{2.9187 \times 10^4} \approx 1.7120 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

## 4. Circonio ( $\text{Zr}$ )

Masa:

$$m = \rho \times V = 6.5 \text{ g/cm}^3 \times 482.64 \text{ cm}^3 \approx 3.1372 \times 10^3 \text{ g.}$$

Moles:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} = \frac{3.1372 \times 10^3}{91.22} \approx 3.439 \times 10^1 \text{ mol.}$$

---

Número de átomos:

$$N = n \times N_A = (3.439 \times 10^1)(6.022 \times 10^{23}) \approx 2.0710 \times 10^{25} \text{ átomos.}$$

Densidad atómica:

$$\rho_{\text{at}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} = \frac{2.0710 \times 10^{25}}{2.9187 \times 10^4} \approx 7.0958 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

## 5. Agua (H<sub>2</sub>O)

Masa:

$$m = \rho \times V = 1.00 \text{ g/cm}^3 \times 14009.26 \text{ cm}^3 \approx 1.4009 \times 10^4 \text{ g.}$$

Moles:

$$n = \frac{m}{M_{\text{avg}}} = \frac{1.4009 \times 10^4}{18.015} \approx 7.7764 \times 10^2 \text{ mol.}$$

Número de átomos:

$$N = n \times N_A = (7.7764 \times 10^2)(6.022 \times 10^{23}) \approx 4.6830 \times 10^{26} \text{ átomos.}$$

Densidad atómica:

$$\rho_{\text{at}} = \frac{N}{V_{\text{total}}} = \frac{4.6830 \times 10^{26}}{2.9187 \times 10^4} \approx 1.6045 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

## Secciones eficaces macroscópicas

En esta sección se presentan los cálculos de las secciones eficaces macroscópicas de los materiales considerados, utilizando las densidades atómicas obtenidas previamente y las secciones eficaces microscópicas extraídas de la literatura especializada.

### Uranio (U)

La densidad atómica del Uranio se estimó como:

$$N_U = 9.16917 \times 10^{-2} \times 10^{22} \approx 9.2 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

#### ■ Fisión rápida:

$$\sigma_{\text{fisión rápida}} = 2.5 \times 10^{-25} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión rápida}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (2.5 \times 10^{-25}) \approx 2.3 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

#### ■ Fisión térmica:

$$\sigma_{\text{fisión térmica}} = 1.2 \times 10^{-22} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión térmica}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (1.2 \times 10^{-22}) \approx 1.1 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

#### ■ Dispersión rápida:

$$\sigma_{\text{dispersión rápida}} = 6.6 \times 10^{-24} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión rápida}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (6.6 \times 10^{-24}) \approx 6.1 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Dispersión térmica:**

$$\sigma_{\text{dispersión térmica}} = 1.0 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión térmica}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (1.0 \times 10^{-23}) \approx 9.2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Absorción rápida:**

$$\sigma_{\text{absorción rápida}} = 3.7 \times 10^{-25} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción rápida}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (3.7 \times 10^{-25}) \approx 3.4 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Absorción térmica:**

$$\sigma_{\text{absorción térmica}} = 1.4 \times 10^{-22} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción térmica}} = (9.2 \times 10^{20}) \times (1.4 \times 10^{-22}) \approx 1.3 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### Cálculo de las secciones de transporte

- **Transporte en energía rápida:**

$$\Sigma_{\text{tr, rápida}} = \Sigma_s(1 - \mu_0),$$

donde:

$$\Sigma_{\text{tr, rápida}} = (6.07 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}) \times (1 - 0.0028082) \approx 6.05 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Transporte en energía térmica:**

$$\sigma_{\text{transporte térmica}} = (1.02 \times 10^{-23} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.0028082) \approx 1.02 \times 10^{-23} \text{ cm}^2,$$

$$\Sigma_{\text{transporte térmica}} = (9.16979 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3) \times (1.02 \times 10^{-23}) \approx 9.34 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

### Ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ )

A continuación, se presentan los cálculos de las secciones eficaces macroscópicas para el ácido bórico, utilizando su densidad atómica previamente obtenida.

La densidad atómica es:

$$N_{\text{H}_3\text{BO}_3} = 1.95 \times 10^{-3} \times 10^{22} \approx 2.0 \times 10^{19} \text{ átomos/cm}^3.$$

- **Fisión rápida:**

$$\sigma_{\text{fisión rápida}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión rápida}} = (2.0 \times 10^{19}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

- **Fisión térmica:**

$$\sigma_{\text{fisión térmica}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión térmica}} = (2.0 \times 10^{19}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

- **Dispersión rápida:**

$$\sigma_{\text{dispersión rápida}} = 2.8 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión rápida}} = (2.0 \times 10^{19}) \times (2.8 \times 10^{-23}) \approx 5.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Dispersión térmica:**

$$\sigma_{\text{dispersión térmica}} = 2.7 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión térmica}} = (2.0 \times 10^{19}) \times (2.7 \times 10^{-23}) \approx 5.4 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Absorción rápida:**

$$\sigma_{\text{absorción rápida}} = 1.2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción rápida}} = (2.0 \times 10^{19}) \times (1.2 \times 10^{-23}) \approx 2.4 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

- **Absorción térmica:**

$$\sigma_{\text{absorción térmica}} = 4.0 \times 10^{-21} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción térmica}} = (2.0 \times 10^{19}) \times (4.0 \times 10^{-21}) \approx 8.0 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}.$$

---

## Cálculo de las secciones de transporte

### ■ Transporte en energía rápida:

$$\sigma_{\text{transporte rápida}} = \sigma_{\text{dispersión rápida}}(1 - \mu_0),$$

$$\sigma_{\text{transporte rápida}} = (2.78 \times 10^{-23} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.01092) \approx 2.75 \times 10^{-23} \text{ cm}^2,$$

$$\Sigma_{\text{transporte rápida}} = (1.95 \times 10^{19}) \times (2.75 \times 10^{-23}) \approx 5.36 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Transporte en energía térmica:

$$\sigma_{\text{transporte térmica}} = (2.67 \times 10^{-23} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.01092) \approx 2.64 \times 10^{-23} \text{ cm}^2,$$

$$\Sigma_{\text{transporte térmica}} = (1.95 \times 10^{19}) \times (2.64 \times 10^{-23}) \approx 5.14 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

## Hidruro de Circonio (ZrH)

En este apartado se presentan los cálculos correspondientes a las secciones eficaces macroscópicas del compuesto ZrH, utilizando su densidad atómica determinada previamente.

La densidad atómica es:

$$N_{\text{ZrH}} = 1.71202 \times 10^0 \times 10^{22} \approx 1.7 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

### ■ Fisión rápida:

$$\sigma_{\text{fisión rápida}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión rápida}} = (1.7 \times 10^{22}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Fisión térmica:

$$\sigma_{\text{fisión térmica}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión térmica}} = (1.7 \times 10^{22}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión rápida:

$$\sigma_{\text{dispersión rápida}} = 1.2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión rápida}} = (1.7 \times 10^{22}) \times (1.2 \times 10^{-23}) \approx 2.0 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión térmica:

$$\sigma_{\text{dispersión térmica}} = 1.2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión térmica}} = (1.7 \times 10^{22}) \times (1.2 \times 10^{-23}) \approx 2.0 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción rápida:

$$\sigma_{\text{absorción rápida}} = 3.9 \times 10^{-30} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción rápida}} = (1.7 \times 10^{22}) \times (3.9 \times 10^{-30}) \approx 6.6 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción térmica:

$$\sigma_{\text{absorción térmica}} = 2.1 \times 10^{-24} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción térmica}} = (1.7 \times 10^{22}) \times (2.1 \times 10^{-24}) \approx 3.6 \times 10^{-2} \text{ cm}^{-1}.$$

---

## Cálculo de las secciones de transporte

### ■ Transporte en energía rápida:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{transporte rápida}} &= \sigma_{\text{dispersión rápida}}(1 - \mu_0), \\ \sigma_{\text{transporte rápida}} &= (1.2 \times 10^{-23} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.00715) \approx 1.19 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \\ \Sigma_{\text{transporte rápida}} &= (1.7 \times 10^{22}) \times (1.19 \times 10^{-23}) \approx 2.0 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

### ■ Transporte en energía térmica:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{transporte térmica}} &= (1.17 \times 10^{-23} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.00715) \approx 1.16 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \\ \Sigma_{\text{transporte térmica}} &= (1.7 \times 10^{22}) \times (1.16 \times 10^{-23}) \approx 2.0 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

## Circonio (Zr)

A continuación se presentan los cálculos de las secciones eficaces macroscópicas correspondientes al circonio (Zr), basado en la densidad atómica obtenida en el apartado anterior. La densidad atómica utilizada es:

$$N_{\text{Zr}} = 7.09577 \times 10^{-2} \times 10^{22} \approx 7.1 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

### ■ Fisión rápida:

$$\sigma_{\text{fisión rápida}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión rápida}} = (7.1 \times 10^{20}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Fisión térmica:

$$\sigma_{\text{fisión térmica}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión térmica}} = (7.1 \times 10^{20}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión rápida:

$$\sigma_{\text{dispersión rápida}} = 6.3 \times 10^{-24} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión rápida}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (6.3 \times 10^{-24}) \approx 4.4 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión térmica:

$$\sigma_{\text{dispersión térmica}} = 5.3 \times 10^{-24} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión térmica}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (5.3 \times 10^{-24}) \approx 3.8 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción rápida:

$$\sigma_{\text{absorción rápida}} = 7.2 \times 10^{-26} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción rápida}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (7.2 \times 10^{-26}) \approx 5.1 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción térmica:

$$\sigma_{\text{absorción térmica}} = 1.0 \times 10^{-26} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción térmica}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (1.0 \times 10^{-26}) \approx 7.1 \times 10^{-6} \text{ cm}^{-1}.$$

---

## Cálculo de las secciones de transporte

### ■ Transporte en energía rápida:

$$\sigma_{\text{transporte rápida}} = \sigma_{\text{dispersión rápida}}(1 - \mu_0),$$

$$\sigma_{\text{transporte rápida}} = (6.26 \times 10^{-24} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.007308339) \approx 6.2 \times 10^{-24} \text{ cm}^2,$$

$$\Sigma_{\text{transporte rápida}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (6.2 \times 10^{-24}) \approx 4.4 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Transporte en energía térmica:

$$\sigma_{\text{transporte térmica}} = (5.30 \times 10^{-24} \text{ cm}^2) \times (1 - 0.007308339) \approx 5.26 \times 10^{-24} \text{ cm}^2,$$

$$\Sigma_{\text{transporte térmica}} = (7.1 \times 10^{20}) \times (5.26 \times 10^{-24}) \approx 3.7 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

## Agua (H<sub>2</sub>O)

En esta sección se presentan los cálculos correspondientes al agua (H<sub>2</sub>O) utilizados en el modelo analítico, considerando la densidad atómica previamente determinada.

La densidad atómica considerada es:

$$N_{\text{H}_2\text{O}} = 1.60448 \times 10^0 \times 10^{22} \approx 1.6 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

### ■ Fisión rápida:

$$\sigma_{\text{fisión rápida}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión rápida}} = (1.6 \times 10^{22}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Fisión térmica:

$$\sigma_{\text{fisión térmica}} = 0 \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{fisión térmica}} = (1.6 \times 10^{22}) \times 0 = 0 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión rápida:

$$\sigma_{\text{dispersión rápida}} = 1.4 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión rápida}} = (1.6 \times 10^{22}) \times (1.4 \times 10^{-23}) \approx 2.2 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Dispersión térmica:

$$\sigma_{\text{dispersión térmica}} = 1.0 \times 10^{-22} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{dispersión térmica}} = (1.6 \times 10^{22}) \times (1.0 \times 10^{-22}) \approx 1.6 \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción rápida:

$$\sigma_{\text{absorción rápida}} = 1.0 \times 10^{-26} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción rápida}} = (1.6 \times 10^{22}) \times (1.0 \times 10^{-26}) \approx 1.6 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

### ■ Absorción térmica:

$$\sigma_{\text{absorción térmica}} = 3.3 \times 10^{-25} \text{ cm}^2, \quad \Sigma_{\text{absorción térmica}} = (1.6 \times 10^{22}) \times (3.3 \times 10^{-25}) \approx 5.3 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

---

## Cálculo de las secciones de transporte

### ■ Transporte en energía rápida:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{transporte rápida}} &= \sigma_{\text{dispersión rápida}}(1 - \mu_0), \\ \sigma_{\text{transporte rápida}} &= (1.40 \times 10^{-23}) \times (1 - 0.037006199) \approx 1.35 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \\ \Sigma_{\text{transporte rápida}} &= (1.6 \times 10^{22}) \times (1.35 \times 10^{-23}) \approx 2.2 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

### ■ Transporte en energía térmica:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{transporte térmica}} &= (1.03 \times 10^{-22}) \times (1 - 0.037006199) \approx 9.92 \times 10^{-23} \text{ cm}^2, \\ \Sigma_{\text{transporte térmica}} &= (1.6 \times 10^{22}) \times (9.92 \times 10^{-23}) \approx 1.59 \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

## Sección eficaz macroscópica total

A continuación, se presentan las secciones eficaces macroscópicas totales para los distintos procesos relevantes (fisión, dispersión, absorción y transporte), tanto en régimen rápido como térmico. Los resultados se obtienen sumando las contribuciones individuales de cada compuesto considerado en el modelo.

### 1. Fisión Total

#### Fisión rápida:

$$\Sigma_{\text{fis, rap}}^{\text{total}} = 2.3 \times 10^{-4} + 0 + 0 + 0 + 0 = 2.3 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.$$

#### Fisión térmica:

$$\Sigma_{\text{fis, term}}^{\text{total}} = 1.1 \times 10^{-1} + 0 + 0 + 0 + 0 = 1.1 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### 2. Dispersión Total

#### Dispersión rápida:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{disp, rap}}^{\text{total}} &= 6.1 \times 10^{-3} + 5.6 \times 10^{-4} + 2.0 \times 10^{-1} + 4.4 \times 10^{-3} + 2.2 \times 10^{-1} \\ &= 0.0061 + 0.00056 + 0.200 + 0.0044 + 0.220 \\ &= 4.3106 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

#### Dispersión térmica:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{disp, term}}^{\text{total}} &= 9.2 \times 10^{-3} + 5.4 \times 10^{-4} + 2.0 \times 10^{-1} + 3.8 \times 10^{-3} + 1.6 \\ &= 0.0092 + 0.00054 + 0.200 + 0.0038 + 1.600 \\ &= 1.81354 \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

---

### 3. Absorción Total

#### Absorción rápida:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{abs, rap}}^{\text{total}} &= 3.4 \times 10^{-4} + 2.4 \times 10^{-4} + 6.6 \times 10^{-8} + 5.1 \times 10^{-5} + 1.6 \times 10^{-4} \\ &= 0.00034 + 0.00024 + 0.00000007 + 0.000051 + 0.00016 \\ &= 7.91 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

#### Absorción térmica:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{abs, term}}^{\text{total}} &= 1.3 \times 10^{-1} + 8.0 \times 10^{-2} + 3.6 \times 10^{-2} + 0 + 5.3 \times 10^{-3} \\ &= 0.130 + 0.080 + 0.036 + 0 + 0.0053 \\ &= 2.513 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

### 4. Transporte Total

#### Transporte rápido:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{trans, rap}}^{\text{total}} &= 6.05 \times 10^{-3} + 5.36 \times 10^{-4} + 2.04 \times 10^{-1} + 4.4 \times 10^{-3} + 2.16 \times 10^{-1} \\ &= 0.00605 + 0.000536 + 0.204 + 0.0044 + 0.216 \\ &= 4.3099 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

#### Transporte térmico:

$$\begin{aligned}\Sigma_{\text{trans, term}}^{\text{total}} &= 9.34 \times 10^{-3} + 5.14 \times 10^{-4} + 1.99 \times 10^{-1} + 3.73 \times 10^{-3} + 1.59 \\ &= 0.00934 + 0.000514 + 0.199 + 0.00373 + 1.590 \\ &= 1.80258 \text{ cm}^{-1}.\end{aligned}$$

## Cálculo de la sección eficaz macroscópica de dispersión de rápida a térmica

A continuación se detallan los cálculos realizados para determinar la sección eficaz macroscópica de dispersión de neutrones rápidos a térmicos ( $\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f)$ ) para cada compuesto considerado, utilizando el procedimiento descrito previamente.

### Uranio

$$\alpha = \left( \frac{237.3 - 1}{237.3 + 1} \right)^2 \approx 0.9833.$$

$$1 - \alpha = 0.0167. \quad \sigma_s = 6.62 \times 10^{-24} \text{ cm}^2. \quad E_i = 1 \text{ MeV}.$$

Sección eficaz microscópica de dispersión:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{6.62 \times 10^{-24}}{0.0167} \approx 3.96 \times 10^{-22} \text{ cm}^2.$$

Densidad atómica:

$$N = 9.17 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

---

Sección eficaz macroscópica:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = (9.17 \times 10^{20})(3.96 \times 10^{-22}) \approx 3.63 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### Ácido bórico ( $\text{H}_3\text{BO}_3$ )

$$\alpha = \left( \frac{61 - 1}{61 + 1} \right)^2 \approx 0.9365.$$

$$1 - \alpha = 0.0635. \quad \sigma_s = 2.78 \times 10^{-23} \text{ cm}^2. \quad E_i = 1 \text{ MeV}.$$

Sección eficaz microscópica de dispersión:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{2.78 \times 10^{-23}}{0.0635} \approx 4.38 \times 10^{-22} \text{ cm}^2.$$

Densidad atómica:

$$N = 1.95 \times 10^{19} \text{ átomos/cm}^3.$$

Sección eficaz macroscópica:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = (1.95 \times 10^{19})(4.38 \times 10^{-22}) \approx 8.53 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1}.$$

### Circonio (Zr)

$$\alpha = \left( \frac{89.9 - 1}{89.9 + 1} \right)^2 \approx 0.9565.$$

$$1 - \alpha = 0.0435. \quad \sigma_s = 6.26 \times 10^{-24} \text{ cm}^2. \quad E_i = 1 \text{ MeV}.$$

Sección eficaz microscópica de dispersión:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{6.26 \times 10^{-24}}{0.0435} \approx 1.44 \times 10^{-22} \text{ cm}^2.$$

Densidad atómica:

$$N = 7.10 \times 10^{20} \text{ átomos/cm}^3.$$

Sección eficaz macroscópica:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = (7.10 \times 10^{20})(1.44 \times 10^{-22}) \approx 1.02 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

### Hidruro de circonio (ZrH)

$$\alpha = \left( \frac{91.5 - 1}{91.5 + 1} \right)^2 \approx 0.9572.$$

$$1 - \alpha = 0.0428. \quad \sigma_s = 1.20 \times 10^{-23} \text{ cm}^2. \quad E_i = 1 \text{ MeV}.$$

Sección eficaz microscópica de dispersión:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{1.20 \times 10^{-23}}{0.0428} \approx 2.80 \times 10^{-22} \text{ cm}^2.$$

---

Densidad atómica:

$$N = 1.71 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

Sección eficaz macroscópica:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = (1.71 \times 10^{22})(2.80 \times 10^{-22}) \approx 4.80 \text{ cm}^{-1}.$$

### Agua (H<sub>2</sub>O)

$$\alpha = \left( \frac{18.01 - 1}{18.01 + 1} \right)^2 \approx 0.8007.$$

$$1 - \alpha = 0.1993. \quad \sigma_s = 1.40 \times 10^{-23} \text{ cm}^2. \quad E_i = 1 \text{ MeV}.$$

Sección eficaz microscópica de dispersión:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = \frac{1.40 \times 10^{-23}}{0.1993} \approx 7.03 \times 10^{-23} \text{ cm}^2.$$

Densidad atómica:

$$N = 1.60 \times 10^{22} \text{ átomos/cm}^3.$$

Sección eficaz macroscópica:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f) = (1.60 \times 10^{22})(7.03 \times 10^{-23}) \approx 1.13 \text{ cm}^{-1}.$$

### Suma de secciones eficaces

La suma total de las secciones eficaces macroscópicas de dispersión de rápida a térmica es:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f)^{\text{(total)}} = \Sigma_s^{(\text{U})} + \Sigma_s^{(\text{H}_3\text{BO}_3)} + \Sigma_s^{(\text{ZrH})} + \Sigma_s^{(\text{Zr})} + \Sigma_s^{(\text{H}_2\text{O})}.$$

Sustituyendo los valores calculados:

$$\Sigma_s(E_i \rightarrow E_f)^{\text{(total)}} = 3.63 \times 10^{-1} + 8.53 \times 10^{-3} + 4.80 + 1.02 \times 10^{-1} + 1.13 \approx 6.40 \text{ cm}^{-1}.$$

### Cálculo del parámetro $B_g^2$

El pandeo geométrico  $B_g^2$  se calcula considerando las dimensiones del reactor:

$$R = 15.62 \text{ cm}, \quad H = 38.10 \text{ cm}.$$

Componente radial:

$$B_r^2 = \left( \frac{2.405}{R} \right)^2 = \left( \frac{2.405}{15.62} \right)^2.$$

$$\frac{2.405}{15.62} \approx 0.154, \quad B_r^2 \approx (0.154)^2 = 0.0237 \text{ cm}^{-2}.$$

---

**Componente axial:**

$$B_z^2 = \left(\frac{\pi}{H}\right)^2 = \left(\frac{\pi}{38.10}\right)^2.$$
$$\frac{\pi}{38.10} \approx 0.0825, \quad B_z^2 \approx (0.0825)^2 = 0.0068 \text{ cm}^{-2}.$$

**Pandeo geométrico total:**

$$B_g^2 = B_r^2 + B_z^2 \approx 0.0237 + 0.0068 = 0.0305 \text{ cm}^{-2}.$$

## Cálculo de los coeficientes de difusión (rápido y térmico)

**Coefficiente de difusión rápido  $D_{\text{rap}}$**

El coeficiente de difusión en régimen rápido se calcula a partir de la sección eficaz macroscópica de transporte total:

$$\Sigma_{\text{tr, rap}} = 4.31 \times 10^{-1} \text{ cm}^{-1}.$$

Aplicando la definición:

$$D_{\text{rap}} = \frac{1}{3 \Sigma_{\text{tr, rap}}} = \frac{1}{3 \times 4.31 \times 10^{-1}} = \frac{1}{1.293} \approx 7.73 \times 10^{-1} \text{ cm}.$$

**Coefficiente de difusión térmico  $D_{\text{tér}}m$**

El coeficiente de difusión en régimen térmico se determina de manera análoga utilizando la sección eficaz macroscópica de transporte térmico:

$$\Sigma_{\text{tr, térm}} = 1.79 \times 10^0 \text{ cm}^{-1}.$$

Por tanto:

$$D_{\text{tér}}m = \frac{1}{3 \Sigma_{\text{tr, térm}}} = \frac{1}{3 \times 1.79} = \frac{1}{5.37} \approx 1.86 \times 10^{-1} \text{ cm}.$$

Los resultados finales de cada paso están resumidos en la tabla 6, donde se pueden consultar de manera rápida y ordenada los valores calculados.

---

## 8.2. Simulación

Con el propósito de fomentar la replicabilidad de los resultados y la mejora continua del trabajo realizado, se ha dispuesto el código fuente empleado en este proyecto en un repositorio público en GitHub.

El repositorio contiene:

- El código `calc_k.py` utilizado para el procesamiento automático de datos de simulación.
- Los archivos de control de Geant4 ( `.mac`) usados para las simulaciones.
- Documentación básica de uso y estructura de carpetas.

El enlace al repositorio es el siguiente:

<https://github.com/pedro030402/Simulador-Reactor-GT>

Se invita a otros investigadores y estudiantes interesados a utilizar, adaptar y mejorar los recursos disponibles, siguiendo las condiciones de licencia abiertas establecidas en el repositorio.

Figura 7. Diagrama de flujo

