UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA ENERGÉTICA

Generación de librerías optimizadas con
cuantificación de incertidumbres para
cálculos realistas (BEPU) de reactores
nucleares de agua ligera

TESIS DOCTORAL

SANTIAGO SÁNCHEZ-CERVERA HUERTA

Ingeniero Industrial

por la Universidad Politécnica de Madrid

Directora de Tesis:

Dña. Nuria García Herranz
Profesora Titular de Ingeniería Nuclear
Universidad Politécnica de Madrid

2017

A mi hija Patricia

Tribunal nombrado por el Magfco. y Excmo. Sr. Rector de la Universidad Politécnica de Madrid, el día — de — de 2017.

Presidente:

Vocal:

Vocal:

Vocal:

Secretario:

Suplente:

Suplente:

Realizado el acto de defensa y lectura de la Tesis el día — de — de 2017 en la E.T.S. Ingenieros Industriales.

CALIFICACIÓN:

EL PRESIDENTE

LOS VOCALES

EL SECRETARIO

Este trabajo de tesis doctoral ha sido financiado por la Cátedra de Seguridad Nuclear Federico Goded del Consejo de Seguridad Nuclear; por la Comisión Europea bajo el séptimo programa marco dentro del proyecto integrado NURESAFE “NUclear REactor SAFETY Simulation Platform”, con número de contrato 323263; y por el Consejo de Seguridad Nuclear bajo el “Acuerdo específico de colaboración entre el CSN y la UPM en el área de propagación de incertidumbres en los cálculos neutrónicos”

Agradecimientos

Quisiera expresar, en primer lugar, mi más sincero reconocimiento a mi directora de Tesis, Dña. Nuria García Herranz, cuyo trato como tutora y como persona ha sido excelente. Por todo lo que he aprendido con ella en estos años de trabajo, por reconocer y aceptar mis limitaciones y ayudarme a superarlas y por la atención que siempre me ha dedicado. Ha sido un auténtico privilegio trabajar a su lado.

Deseo expresar también mi gratitud a Dña. Carolina Ahnert, directora del Grupo de Investigación de Ciencia y Tecnología de Sistemas Avanzados de Fisión Nuclear, por haberme dado la oportunidad de realizar este trabajo de investigación y de participar en el proyecto NURESAFE; así como a la Cátedra Federico Goded, por la financiación del doctorado. Igualmente quiero mostrar mi agradecimiento a mi amigo Dr. José Javier Herrero, quien fue mi mentor en el Departamento hace ya algunos años y que siempre ha estado dispuesto a ayudarme en lo que fuera necesario.

Quiero agradecer igualmente a todo el personal de la Unidad Docente de Tecnología Nuclear y del Instituto de Fusión Nuclear el buen trato que siempre me han dispensado; de un modo muy especial a mis compañeros del Grupo de Investigación por el buen clima de trabajo y cordialidad que siempre hemos tenido. Quiero destacar especialmente la ayuda que siempre he tenido de mi amigo Emilio Castro con quien he pasado muchas horas trabajando codo con codo dentro del benchmark de UAM.

Tampoco me olvido de mis compañeros doctorandos del Departamento, compañeros de alegrías y de sufrimientos. Quisiera recordar a todos los compañeros con los que a lo largo de estos años he tenido el placer de compartir despacho y con los que he pasado muy buenos ratos: Alain, Sergey, César, Adrián, Gabriel, Emilio, Karen, Emma, Lenin y Julio.

Por último, y más importante, quiero destacar el gran apoyo que he tenido de mis familiares y amigos. A mi mujer, Flavia, que ha sufrido el trabajo que conlleva la elaboración de una tesis; a mis padres y mi hermana Adri, que me han alentado en todo momento; a mis abuelos ausentes y a todos los que habéis creído en mí, muchas gracias. De manera especial esta Tesis está dedicada a mi hija Patricia, que me ha dado la fuerza para seguir adelante y de la que siempre estaré enormemente orgulloso.

Resumen

La simulación computacional de los procesos físicos que tienen lugar en el núcleo de un reactor nuclear permite, gracias a la validación con datos experimentales, el análisis de múltiples escenarios y es de vital importancia en el diseño, operación y evaluación de la seguridad de las centrales nucleares. En el pasado, los métodos computacionales empleados en análisis de seguridad incluían modelos conservadores para contrarrestar las aproximaciones realizadas. Sin embargo, la tendencia actual es evolucionar hacia los cálculos de estimación óptima o *best-estimate* que incluyen datos e hipótesis más realistas. Prueba de ello, es el desarrollo del Proyecto Europeo correspondiente al 7º Programa Marco, NURES SAFE, donde uno de los paquetes de trabajo está dedicado a la simulación *best-estimate* del accidente de rotura de línea de vapor (MSLB) en un reactor PWR de cuatro lazos. Se trata de un transitorio fuertemente asimétrico que requiere para su análisis preciso del uso de códigos neutrónicos con cinética tridimensional acoplados con códigos termohidráulicos.

Adicionalmente, los cálculos *best-estimate* deben ir acompañados de una rigurosa evaluación de las incertidumbres de los resultados dando lugar a los análisis BEPU (*best-estimate plus uncertainties*). Conscientes de la importancia del papel de las incertidumbres el Comité de Ingeniería Nuclear de la OECD/NEA impulsó en el año 2005 la creación del grupo de expertos EGUAM (*Expert Group on Uncertainty Analysis in Modeling*) que a su vez desarrolló el *OECD/NEA Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modeling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs* (UAM) cuyo objetivo es la cuantificación de incertidumbres en todas las fases de los cálculos acoplados neutrónicos/termohidráulicos en reactores nucleares.

En el contexto del proyecto NURES SAFE y del ejercicio internacional de UAM se ha desarrollado esta tesis doctoral. El objetivo es identificar y propagar las diferentes fuentes de incertidumbre en cálculos neutrónicos y generar librerías optimizadas de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos, tanto a nivel nodal como a nivel de *pincell*, que incluyan una cuantificación de dichas incertidumbres. El uso de estas librerías, que podrían llamarse avanzadas, en cálculos de difusión con simuladores de núcleo permitiría llevar a cabo el análisis BEPU de transitorios operacionales en reactores de agua ligera.

El calificativo de librería avanzada hace referencia por tanto a dos ideas principales. La primera idea es la inclusión en la librería, junto con las constantes homogeneizadas, de las covarianzas, lo que posibilita la cuantificación de incertidumbres en cálculos de núcleo completo. Para ello se han identificado las fuentes de incertidumbre neutrónicas. Por un lado, las fuentes primarias provienen del conocimiento incierto de los datos nucleares básicos incluidos en las librerías evaluadas y las incertidumbres en la geometría e isotopía

iniciales también llamadas incertidumbres tecnológicas. Por otro lado, al propagar ambos tipos de incertidumbre a través del esquema de cálculo estándar empleado para el análisis tridimensional de reactores (cálculos de celda, de elemento y núcleo), se irán añadiendo progresivamente nuevas incertidumbres asociadas a las aproximaciones en los modelos y métodos utilizados. En esta tesis se hace un ejercicio de propagación a las librerías de constantes homogeneizadas tanto de las incertidumbres debidas a los datos nucleares como de las tecnológicas, evaluándose la importancia relativa de cada una de ellas. Así mismo se evalúan las incertidumbres asociadas a los métodos y modelos de cada fase de cálculo. Para ello se ha utilizado el sistema de códigos SCALE6.2. Tras haber obtenido las librerías con cuantificación de incertidumbres, se hace un ejercicio de propagación de incertidumbres en cálculos tridimensionales de núcleo completo, tanto a nivel nodal como *pin-by-pin*, utilizando el código de difusión COBAYA.

La segunda idea que subyace en el término de librería avanzada es que permita realizar cálculos de difusión *best-estimate*, es decir, que conduzca a resultados lo más próximos posible a los que proporcionaría teoría de transporte. Para ello, se han evaluado las técnicas de homogenización, tanto a nivel nodal como a nivel de *pincell*, y se ha tenido en cuenta el fuerte acoplamiento existente entre el código de transporte de elemento empleado y el simulador de núcleo. En esta tesis, los factores de discontinuidad nodales y por *pin-cell* incluidos en las librerías han sido determinados a partir de los resultados de transporte proporcionados por el código de elemento teniendo en cuenta la discretización del operador de bajo orden, en este caso difusión, utilizado en COBAYA tanto a nivel nodal como *pin-by-pin*. Por otra parte, y teniendo en cuenta que las librerías suelen estar tabuladas en función de las variables de realimentación, se ha desarrollado una metodología basada en la utilización de coeficientes de sensibilidad para minimizar los errores de interpolación al emplear dichas librerías tabuladas en simuladores de núcleo, optimizando el número de cálculos de elemento requerido. Se ha llevado a cabo un análisis de los efectos de esta optimización sobre distintos transitorios operacionales en el marco del proyecto NURESAFE.

En conclusión, se propone la secuencia de cálculo SCALE6.2/COBAYA como una herramienta potente para el análisis neutrónico BEPU, generando con SCALE las librerías de secciones eficaces optimizadas con cuantificación de incertidumbres para su empleo por el simulador de núcleo COBAYA.

Abstract

Computational modeling of the physical processes which take place in a nuclear reactor enables, thanks to the validation against experimental data, the analysis of multiple scenarios useful for design, operation and safety assessment of nuclear power plants. In the past, the computational methods used for safety analysis included conservative models in order to counteract the approximations assumed. However, the current trend is to evolve to the best-estimate calculations which include data and hypothesis more realistic. An evidence of this, is the development of the European Project of the 7th Framework Programme NURES SAFE, where one of the work packages is focused on a best-estimate simulation of a MSLB transient on a four-loops PWR.

Additionally, best-estimate calculations should be completed with a rigorous quantification of the uncertainties in the results, giving rise to the BEPU (best-estimate plus uncertainties) analysis. Aware of the importance of the role of uncertainties, the OECD/NEA Nuclear Science Committee promoted in 2005 the creation of the Expert Group on Uncertainty Analysis in Modelling (EGUAM) which carried out the “OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best- Estimate Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs”, whose objective is to quantify the uncertainties at all stages of coupled neutronic/thermal-hydraulic nuclear reactor calculations.

In the context of NURES SAFE Project and UAM benchmark this PhD Thesis has been developed. The objective is to identify and propagate the different sources of uncertainties in neutronic calculations and to generate advanced libraries of few-group homogenized cross-sections, at nodal and pin-by-pin level, including a quantification of those uncertainties. The use of these libraries in diffusion codes with core simulators would allow to perform BEPU transient analyses in LWRs.

The term of advanced library refers to two main ideas. The first one is the inclusion into the library, in conjunction with the homogenized parameters, of the covariances, which make possible the uncertainty quantification in full core calculations. To this aim, the sources of neutronic uncertainties have been identified. In one hand, the primitive sources come from the uncertain knowledge in basic nuclear data included in the evaluated libraries and the uncertainties in geometry and the initial isotope concentration (also called technological uncertainties). On the other hand, when both types of uncertainties are propagated through the standard calculation scheme used to the 3D reactor analysis (cell-physics, lattice and core calculations), new uncertainties associated to approximations in methods and models are being progressively added. In this PhD Thesis a quantification exercise to the homogenized cross-section libraries is performed for nuclear data and technological uncertainties,

assessing the relative importance of each of them. In the same way, the uncertainties associated to the methods and models of each calculation phase are estimated. For this task, SCALE 6.2 system has been used. After obtaining libraries with uncertainty quantification, a propagation exercise is performed in 3D full core calculations, at nodal and pin-by-pin level, using COBAYA diffusion code.

The second idea related to the “advanced” term is that the advanced library should allow carrying out best-estimate diffusion calculations, that is, the obtaining of results as closer as possible to those which would be obtained by transport theory. For this, the homogenization techniques, at nodal and pin-by-pin level, have been evaluated and the tight coupling existing between the transport code and the core simulator has been taken into account. In this PhD Thesis the nodal and pin-cell discontinuity factors included in the libraries have been computed based on transport results provided by the lattice code taking into account the discretization of the low-order operator, in this case diffusion, employed in COBAYA, at nodal and pin-by-pin level. On other hand, and taking in consideration that libraries are usually tabulated as function of feedback variables, a new methodology has been developed. This methodology is based on the usage of sensitivity coefficients in order to minimize the interpolation errors when using the tabulated libraries in core simulators, optimizing the number of lattice calculations required. It has been carried out an analysis of the effects of this optimization over different transients within the frame of NURESAFE project.

In conclusion, the sequence SCALE6.2/COBAYA is proposed as a robust tool for BEPU neutronic analyses, generating with the first one the cross-sections libraries with uncertainty quantification to be used in the second one.

Índice general

Lista de figuras	xvii
Lista de tablas	xxi
I INTRODUCCIÓN	1
1 Introducción	3
1.1 Antecedentes de la tesis	3
1.2 Objetivos y contribuciones originales	5
1.3 Estructura de la tesis	7
1.4 Acrónimos	9
II ESTADO DEL ARTE	11
2 Métodos neutrónicos para análisis 3D de núcleo	13
2.1 Introducción	13
2.2 Métodos basados en la ecuación de transporte	14
2.2.1 La ecuación de transporte neutrónico y sus métodos de resolución .	14
2.2.1.1 Métodos deterministas	15
2.2.1.2 Métodos estocásticos	16
2.3 Aproximación estándar	17
2.4 Métodos basados en la ecuación de difusión neutrónica	20
2.4.1 La ecuación de difusión	20

2.4.2	Métodos <i>pin-by-pin</i>	23
2.4.3	Métodos nodales	24
2.4.4	Corrección de los métodos de difusión por transporte	24
2.4.4.1	Teoría General de Equivalencia	25
2.4.4.2	Método de super-homogeneización	27
2.4.4.3	Método de equivalencia de Selengut	28
2.4.4.4	Teoría Simplificada de Equivalencia	28
3	Revisión de fuentes de incertidumbre neutrónicas y métodos de propa- gación	29
3.1	Concepto de incertidumbre y su representación	30
3.2	Fuentes de incertidumbre en cálculos neutrónicos	35
3.2.1	Datos nucleares	36
3.2.2	Incertidumbres tecnológicas	41
3.2.3	Métodos y modelos	42
3.3	Metodologías para la propagación de incertidumbres en cálculos neutrónicos	42
3.3.1	Teoría de perturbaciones de primer orden	43
3.3.2	Metodología basada en muestreo	45
4	Descripción de códigos utilizados	49
4.1	APOLLO2	49
4.2	SCALE	51
4.2.1	XSPProc	54
4.2.2	NEWT	55
4.2.3	SAMPLER	57
4.2.4	TSUNAMI	59
4.2.5	KENO	61
4.3	COBAYA4	62
4.3.1	Técnicas para la propagación de incertidumbres implementadas en COBAYA	63

III	APORTACIONES	67
5	Generación de librerías de secciones eficaces avanzadas para cálculos de difusión	69
5.1	Generación de secciones eficaces nodales	70
5.1.1	Coeficiente de difusión	70
5.1.2	Tratamiento del reflector	71
5.2	Generación de secciones eficaces <i>pin-by-pin</i>	75
6	Fuentes de incertidumbre neutrónicas al emplear la aproximación estándar en cálculos neutrónicos 3D	79
6.1	Definición del <i>benchmark</i> de UAM	80
6.1.1	Especificaciones del <i>benchmark</i> de UAM para PWR	81
6.1.1.1	Configuración de celda (Ejercicio I-1)	81
6.1.1.2	Configuración de elemento (Ejercicio I-2)	82
6.1.1.3	Configuración de núcleo (Ejercicio I-3)	83
6.2	Caracterización de las fuentes de incertidumbre en la aproximación estándar	83
6.2.1	Cálculos de celda (<i>Cell Physics</i>)	85
6.2.2	Cálculos de elemento (<i>Lattice Physics</i>)	86
6.2.3	Cálculos de núcleo (<i>Core Physics</i>)	86
6.2.4	Resumen de las fuentes de incertidumbres neutrónicas	87
7	Propagación de incertidumbres de los datos nucleares a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas	89
7.1	Introducción	89
7.2	Metodologías para la generación de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía	90
7.3	Librería avanzada para un elemento de referencia	93
7.3.1	Análisis de las incertidumbres	94
7.3.2	Análisis de sensibilidad	98
7.3.3	Análisis de las correlaciones	100
7.4	Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas	102

7.4.1	Influencia de la matriz de covarianzas de los datos nucleares	103
7.4.2	Influencia del tipo de elemento	105
7.4.3	Influencia de la vecindad	111
7.4.4	Influencia de las condiciones de operación	116
7.4.5	Influencia del nivel de homogeneización	119
7.5	Librería avanzada para un núcleo completo	122
7.6	Conclusiones	123
8	Propagación de incertidumbres tecnológicas a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas	127
8.1	Incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial	127
8.1.1	Proceso de fabricación de las pastillas de combustible	128
8.2	Propagación de incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial .	129
8.2.1	Cálculos de <i>pin-cell</i>	129
8.2.2	Cálculos de elemento	131
8.3	Análisis de la correlación entre distintas fuentes de incertidumbre	133
9	Propagación de incertidumbres debidas a métodos y modelos a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas	135
9.1	Errores asociados a los cálculos de celda	136
9.2	Errores asociados a los cálculos <i>lattice</i>	143
10	Desarrollo de una metodología para la optimización de mallas de puntos en librerías tabuladas	149
10.1	Introducción	149
10.2	Desarrollo de la metodología	151
10.2.1	Planteamiento del problema	151
10.2.2	Fundamentos del procedimiento de optimización	152
10.2.3	Construcción de una malla optimizada unidimensional	156
10.2.4	Construcción de una malla optimizada multidimensional	157
10.2.5	Coeficientes de sensibilidad	159
10.3	Aplicación para un elemento combustible de un PWR	161

10.3.1 Librerías tabuladas optimizadas y en dos grupos de energía	162
10.4 Desarrollo de una metodología alternativa	166
IV APLICACIONES	169
11 Propagación de incertidumbres en cálculos de núcleo	171
11.1 Revisión de la configuración del núcleo	171
11.2 Ejercicios de propagación de incertidumbres	172
11.2.1 Datos nucleares	172
11.2.1.1 Resultados en k-efectiva	173
11.2.1.2 Resultados en distribución de potencia	175
11.2.2 Datos nucleares y variables tecnológicas	176
11.2.2.1 Resultados en k-efectiva	176
11.2.2.2 Resultados en distribución de potencia	177
12 Efectos de la generación y optimización de librerías de secciones eficaces sobre transitorios operacionales	179
12.1 Introducción	179
12.2 Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR . . .	180
12.2.1 Descripción del <i>OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO2 core transient benchmark</i>	180
12.2.2 Librerías de secciones eficaces	181
12.2.2.1 Librería de secciones eficaces proporcionada en el <i>benchmark</i> (Librería-A)	182
12.2.2.2 Librería de secciones eficaces generada usando los mismos puntos de malla que en el <i>benchmark</i> (Librería-B)	182
12.2.2.3 Librería de secciones eficaces generada usando una malla de puntos optimizada (Librería-C)	183
12.2.3 Resultados	183
12.2.3.1 Parte III: Estacionario	183
12.2.3.2 Parte IV: Transitorio	185
12.3 Análisis de un transitorio MSLB en un PWR	187

12.3.1 Descripción de las especificaciones	188
12.3.2 Librerías de secciones eficaces	189
12.3.3 Resultados	190
12.4 Análisis de un transitorio MSLB en un reactor VVER	191
12.4.1 Descripción de las especificaciones	191
12.4.2 Resultados	193
V CONCLUSIONES	197
13 Conclusiones y desarrollos futuros	199
13.1 Conclusiones	199
13.2 Desarrollos futuros	204
BIBLIOGRAFÍA	209
CURRICULUM VITAE	223

Lista de Figuras

2.1	Flujo de cálculo estándar para el análisis 3D de núcleos	18
3.1	Clasificación de las incertidumbres	32
3.2	Diferencia entre precisión y exactitud	33
3.3	Función de densidad de probabilidad	34
3.4	Función de distribución	35
3.5	Diagrama de fases de los datos nucleares	37
3.6	Estructura del formato tipo ENDF-6 para una subbibrería [30]	38
3.7	Ejemplos de distintas matrices de covarianzas en 56 grupos de energía	40
3.8	Diferencias entre la incertidumbre real y la calculada empleando una aproximación de primer orden	45
3.9	Esquema de la metodología basada en muestreo	46
4.1	Diagrama de flujo para los cálculos <i>lattice</i>	52
4.2	Esquema de la secuencia TRITON de SCALE [86]	53
4.3	Esquema de cálculo del autoblandaje de resonancias en SCALE [86]	55
4.4	Detalle del esquema de cálculo de autoblandaje de resonancias entre los códigos CENTRM y PMC [86]	56
4.5	Modelización de NEWT para un cuarto de <i>pin-cell</i> con un mallado de 4x4	56
4.6	Ejemplo de un histograma para k-efectiva tras varias ejecuciones con SAMPLER	59
4.7	Diagrama de flujo de la secuencia TSUNAMI-3D [104]	60
4.8	Diagrama de flujo para la propagación de incertidumbres determinista con COBAYA	64

4.9	Diagrama de flujo para la propagación de incertidumbres mediante muestreo con COBAYA	65
5.1	Modelo del reflector con NEWT para el PWR en el <i>benchmark</i> de UAM	72
5.2	Modelización de un cuarto de elemento combustible con NEWT para un cálculo homogeneizando a nivel de celda	76
5.3	Modelización de un cuarto de elemento combustible con NEWT con las diferentes regiones de homogeneización en un cálculo <i>pin-by-pin</i>	76
6.1	Esquema de los diferentes cálculos de la aproximación estándar	79
6.2	Esquema de la división de ejercicios en el <i>benchmark</i> de UAM	81
6.3	Especificaciones de la celda de TMI-1 en el <i>benchmark</i> de UAM [64]	82
6.4	Especificaciones del elemento combustible de TMI-1 en el <i>benchmark</i> de UAM [64]	82
6.5	Principales características del elemento combustible de TMI-1 en el <i>benchmark</i> de UAM	83
6.6	Configuración del núcleo de TMI-1 del <i>benchmark</i> de UAM [64]	84
7.1	Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas siguiendo una metodología basada en muestreo	91
7.2	Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas siguiendo una metodología determinista basada en teoría de perturbaciones	92
7.3	Esquema de una librería avanzada de secciones eficaces. [Unidades: Coef. Difusión cm , Secciones eficaces cm^{-1} , ADF adimensional]	94
7.4	Histogramas de la distribución de las secciones eficaces, coeficientes de difusión y factores de discontinuidad	96
7.5	Convergencia del valor de medio, desviación típica y <i>skewness</i> de la k-infinito con el número de historias (en el caso del valor medio se representa con una línea azul el valor correspondiente al caso nominal)	97
7.6	Representación de los coeficientes de sensibilidad más importantes para el parámetro $\Sigma_{abs,1}$ con la energía	100
7.7	Comparación de las matrices de correlación para el caso de referencia obtenidas con SAMPLER y con TSUNAMI-IP	101
7.8	Comparación de las correlaciones obtenidas para el caso de referencia entre SAMPLER y TSUNAMI-IP	102

7.9	Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con la matriz de covarianzas de los datos nucleares	103
7.10	Comparación de las matrices de correlación al variar la matriz de covarianzas de los datos nucleares: estructura en 56 grupos en la parte superior y con 44 en la parte inferior	104
7.11	Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con el tipo de elemento combustible	108
7.12	Comparación de las matrices de correlación para diferentes tipos de elementos	110
7.13	Representación esquemática del modelo de <i>colorset-1D</i>	111
7.14	Representación esquemática del modelo de <i>colorset-2D</i>	112
7.15	Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con la configuración	113
7.16	Comparación de las matrices de correlación para diferentes configuraciones	114
7.17	Variación del coeficiente de sensibilidad de la <i>k</i> -infinito con respecto a la dispersión del hidrógeno para diferentes configuraciones	115
7.18	Variación de las correlaciones de la <i>k</i> -infinito con las secciones eficaces al modificar la configuración	116
7.19	Comparación de los valores de incertidumbre de las secciones eficaces homogeneizadas con las condiciones de operación	118
7.20	Comparación de las matrices de correlación para diferentes condiciones de operación	119
7.21	Variación de las incertidumbres en las secciones eficaces con el nivel de homogeneización	121
7.22	Matriz de correlaciones para un elemento homogeneizando a nivel <i>pin-by-pin</i>	121
7.23	Variación de las incertidumbres en las secciones eficaces con el tipo de elemento combustible para el núcleo de TMI-1	122
7.24	Matriz de correlaciones completa a nivel nodal	123
8.1	Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas muestreando variables geométricas e isotopía NEMTAB	129
8.2	Comparación entre incertidumbres tecnológicas y debidas a los datos nucleares en el caso de la celda	131
8.3	Comparación entre incertidumbres tecnológicas y debidas a los datos nucleares para el caso de elemento combustible	133

8.4	Matriz de correlaciones entre parámetros (k-infinito y secciones eficaces homogeneizadas) obtenidos muestreando los datos nucleares (DN) y variables tecnológicas (IT)	134
9.1	Comparación de valores de k-infinito entre cálculos en multigrupos con KENO	138
9.2	Comparación del ratio entre el valor de k-infinito obtenido en un cálculo en multigrupos y en energía continua con KENO	138
9.3	Comparación del ratio en los valores de las secciones eficaces obtenidos entre el cálculo en multigrupos y en energía continua con KENO	142
9.4	Ratio entre el valor de la k-infinito calculada por NEWT y la calculada por KENO	146
10.1	Error de interpolación para diferentes pasos de malla	152
10.2	Ejemplo de la función del error objetivo para la sección eficaz de fisión térmica	154
10.3	Ejemplo del error de interpolación para la sección eficaz de fisión térmica empleando mallas con diferentes anchos	155
10.4	Ejemplo de la curva intersección entre las funciones del error objetivo y el de interpolación	155
10.5	Obtención de la malla optimizada para el caso de pasos óptimos crecientes con el valor de la variable de estado	158
10.6	Construcción de la malla de puntos sobre ρ para diferentes valores de T (figura 10.6a), de la malla de puntos sobre T para diferentes valores de ρ (figura 10.6b) y malla final 2-D regular (figura 10.6c)	159
10.7	Sensibilidades relativas de la k-efectiva respecto a la sección eficaz de absorción en el grupo rápido vs. $\rho - C_B$ y $T_f - T_m$	163
10.8	Sensibilidades relativas de la k-efectiva respecto a la sección eficaz de nefisión en el grupo rápido vs. $\rho - C_B$ y $T_f - T_m$	163
10.9	Representación de los errores de interpolación de la sección eficaz de absorción en el grupo rápido vs. ancho de malla para diferentes valores de densidad	164
10.10	Proyecciones bidimensionales de la malla fina con un nivel de precisión de 5 pcm	165
10.11	Proyecciones bidimensionales de la malla intermedia con un nivel de precisión de 10 pcm	165
10.12	Proyecciones bidimensionales de la malla gruesa con un nivel de precisión de 25 pcm	166

10.13	Esquema alternativo para la obtención de una malla optimizada	167
11.1	Esquema del núcleo del ejercicio I-3 del <i>benchmark</i> de UAM	172
11.2	Convergencia del valor medio de k-efectiva del núcleo con el número de muestras para un cálculo nodal ARO	174
11.3	Histogramas de la k-efectiva obtenidos para la configuración ARO (izda.) y ARI (dcha.)	174
11.4	Distribuciones de potencia y su incertidumbre a ARO	175
11.5	Distribuciones de potencia y su incertidumbre a ARI	175
11.6	Distribuciones de potencia en el núcleo a ARO (izquierda) y a ARI (derecha)	177
11.7	Distribución de la incertidumbre de la potencia en el núcleo	177
12.1	Disposición de elementos combustibles y bancos de control en el núcleo PWR MOX/UO ₂	181
12.2	Evolución de la potencia durante el transitorio de expulsión de barra de control	186
12.3	Disposición de elementos combustibles y bancos de control en el núcleo para análisis de un MSLB en el proyecto NURESAFE	188
12.4	Evolución de la potencia durante el transitorio MSLB	190
12.5	Evolución de la reactividad durante el transitorio MSLB	191
12.6	Disposición radial de los bancos de control en el núcleo VVER	192
12.7	Perfil axial de la potencia para el estado estacionario 1a con COBAYA y DYN3D	194
12.8	Evolución de la potencia del núcleo VVER durante el transitorio MSLB	195

Lista de Tablas

2.1	Estructuras en pocos grupos de energía	22
3.1	Definición de los distintos tipos de archivos (MF) en el formato ENDF . . .	38
3.2	Definición de algunos tipos de reacción (MT) en el formato ENDF	39
5.1	Valores de k-efectiva obtenidos con COBAYA para la configuración <i>colorset</i> 1D	73
5.2	Valores de la k-efectiva obtenidos con COBAYA para un núcleo ficticio y comparación con KENO	74
5.3	Valores de k-efectiva obtenidos con COBAYA para un elemento <i>pin-by-pin</i> y comparación con el valor de NEWT	77
6.1	Valores de la variables termohidráulicas a HZP y HFP	82
6.2	Especificaciones de los diferentes tipos de elementos combustibles	84
7.1	Valores promedio, nominal y de incertidumbre en las secciones eficaces . . .	97
7.2	Ránking de los principales contribuyentes a la incertidumbre de la k-infinito y de las secciones eficaces	98
7.3	Ránking de los principales coeficientes de sensibilidad para la k-infinito y las secciones eficaces	99
7.4	Ránking de los principales contribuyentes a la incertidumbre de la k-infinito y de las secciones eficaces con la matriz de covarianzas 44COV-SCALE6.1	105
7.5	Especificaciones de diferentes tipos de elementos combustibles	106
7.6	Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos sin quemar	107
7.7	Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos a un quemado de 20 MWd/tHM	107

7.8	Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos a un quemado de 40 MWd/tHM	107
7.9	Cálculo de la incertidumbre de la k-efectiva para dos tipos de elementos utilizando diferentes matrices de covarianzas	109
7.10	Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes configuraciones	112
7.11	Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes condiciones de operación	117
7.12	Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes regiones de homogeneización en cálculos <i>pin-by-pin</i>	120
8.1	Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas	130
8.2	Valores nominales e incertidumbres de las secciones eficaces	130
8.3	Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas	132
8.4	Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas	132
9.1	Comparación de valores de k-infinito entre el cálculo en energía continua y en multigrupos con KENO	137
9.2	Comparación de los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre el cálculo en energía continua y en multigrupos con KENO	140
9.3	Diferencias en los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre cálculos en multigrupos y en energía continua con KENO [Valores expresados en %]	141
9.4	Comparación de resultados al variar opciones de cálculo en NEWT	144
9.5	Comparación de valores de k-infinito entre cálculos en multigrupos con KENO y NEWT	145
9.6	Diferencias en los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre cálculos de NEWT y de KENO, ambos en 56 grupos de energía [Valores expresados en %]	147
10.1	Ejemplo de dos puntos de interpolación elegidos para la densidad (kg/m^3) y los correspondientes <i>data-points</i> al emplear tres pasos de malla diferentes	157
10.2	Rango de variación de las variables de estado	161

11.1 Resultados de k-efectiva y su incertidumbre	173
11.2 Comparación de resultados de k-efectiva y su incertidumbre	176
12.1 Código <i>lattice</i> y puntos <i>branch</i> para la librería proporcionada en el <i>benchmark</i> (LIB-A)	182
12.2 Código <i>lattice</i> y puntos <i>branch</i> para la librería generada con APOLLO2 usando la misma malla que en el <i>benchmark</i> (LIB-B)	183
12.3 Código <i>lattice</i> y puntos <i>branch</i> para la librería generada con APOLLO2 usando la malla optimizada (LIB-C)	183
12.4 Comparación de la concentración de boro crítico y los errores en la potencia por elemento	184
12.5 Comparación de resultados en la ejecución del transitorio	186
12.6 Puntos <i>branch</i> de la librería optimizada para el análisis del MSLB	189
12.7 Puntos <i>branch</i> de la librería reducida para el análisis del MSLB	190
12.8 Definición de estados estacionarios del <i>benchmark</i> V1000-CT2	193
12.9 Resultados obtenidos con COBAYA para los estados estacionarios	194

Parte I

INTRODUCCIÓN

Capítulo 1

Introducción

1.1. Antecedentes de la tesis

Un reactor nuclear de potencia es un dispositivo donde se mantiene bajo control una reacción en cadena de fisión nuclear, extrayendo y utilizando la energía producida para la generación de electricidad. La parte fundamental de la instalación es el núcleo, donde se ubica el material combustible que se fisiona y debe ser refrigerado de manera continua. La Física de Reactores analiza la evolución del estado del núcleo durante la operación para predecir en cada momento las distribuciones de flujo y potencia, variables termohidráulicas y composición isotópica de los materiales.

Los códigos de cálculo disponibles en la actualidad, surgidos gracias al gran desarrollo computacional experimentado en los últimos tiempos, han permitido que la simulación sea a día de hoy una herramienta indispensable de apoyo al diseño y la explotación de los reactores nucleares. Estas herramientas computacionales permiten predecir el comportamiento de un reactor nuclear, optimizar su operación y, más aún, asegurar su funcionamiento de acuerdo a unas condiciones compatibles con los requerimientos de seguridad.

Históricamente, los códigos utilizados en el campo de la simulación en ingeniería nuclear eran deliberadamente pesimistas. Es decir, las simulaciones se llevaban a cabo con una serie de hipótesis y modelos de tipo conservador para contrarrestar las aproximaciones realizadas y proporcionar resultados de carácter envolvente. Esto afectaba sobre todo a las aplicaciones de licencia donde se evalúa el comportamiento integral de la central y se emplean fundamentalmente códigos de planta [102]. Sin embargo, la tendencia actual es evolucionar hacia los llamados cálculos *best-estimate* o de estimación óptima que incluyen modelos detallados y de carácter realista sin hipótesis conservadoras. Ello permite un diseño y operación de la planta más óptimo a la vez que se mejora la competitividad y seguridad.

Adicionalmente, un requisito fundamental de las metodologías *best-estimate* es complementar los resultados con una cuantificación rigurosa de las incertidumbres o márgenes de confianza, dando lugar a las denominadas metodologías *best-estimate plus uncertainties* (BEPUs) [98].

El análisis *best-estimate* de transitorios en reactores de agua ligera requiere la simulación de la fenomenología multi-física que tiene lugar en el seno del núcleo del reactor. Los métodos de alta fidelidad existentes para modelar la neutrónica, la termohidráulica y la termomecánica deben ser acoplados entre sí para simular correctamente este complejo sistema. Así, los cálculos *best-estimate* exigen el empleo de códigos neutrónicos con modelos de cinética tridimensional acoplados con códigos termohidráulicos que analicen de forma realista los fenómenos fluidodinámicos y de transmisión de calor en refrigerante y barra. Una prueba del creciente interés en este tipo de cálculos se encuentra en el proyecto NURESAFE [85], que dedica uno de sus paquetes de trabajo a la simulación realista de un accidente de rotura de la línea principal de vapor (MSLB) en reactores PWR y VVER.

Los códigos neutrónicos tienen que aportar la distribución de potencia, que estará determinada por la distribución de flujo neutrónico, solución de la ecuación de transporte neutrónico o ecuación de Boltzmann, que es el modelo más preciso para determinar dicha distribución al considerar la dependencia espacial, energética y angular. La resolución de esta ecuación para un transitorio en una geometría 3D de un núcleo completo acoplada con un código termohidráulico no es viable a día de hoy, y se recurre a la resolución de una de sus simplificaciones, la ecuación de difusión en pocos grupos de energía. Con el objeto de obtener una buena precisión en los cálculos de difusión del núcleo de un reactor, resultan necesarias técnicas de homogeneización y de equivalencia. El núcleo del reactor es dividido en un conjunto de dominios homogéneos (por ejemplo, elementos combustibles o *pin-cell*) para los cuales se necesitan conocer las secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas en pocos grupos. Este proceso de homogeneización y condensación se realiza preservando las tasas de reacción para lo cual se requieren las soluciones de referencia obtenidas a partir de un cálculo de transporte previo (generalmente un cálculo en red regular). Además de las secciones eficaces, se requieren otros parámetros tales como los factores de discontinuidad para asegurar la equivalencia física entre la solución de referencia y la solución del modelo simplificado de la ecuación de transporte. Todas estas constantes se compilan en librerías para condiciones específicas del reactor que constituyen la entrada para el código de núcleo.

Así pues, para el cálculo 3D de núcleo completo se requieren simuladores de núcleo que resuelvan la ecuación de difusión y librerías de constantes homogeneizadas y en pocos grupos de energía que cubran el espacio paramétrico de operación. Durante los proyectos europeos NURESIM [25] y NURISP [24] del 6º y 7º Programa Marco, el grupo de investigación en Física de Reactores de la UPM dedicó mucha atención al desarrollo del simulador de núcleo COBAYA. Posteriormente, durante el proyecto europeo NURESAFE del 7º Programa Marco, se han abordado tareas de actualización y reorganización para mejorar su integración en la nueva versión de la plataforma SALOME [106] y facilitar su acoplamiento con cualquier otro código de la plataforma, enfocándose también en la legibilidad y mantenibilidad de COBAYA. Así pues, se dispone de un código de núcleo preciso y suficientemente verificado.

Sin embargo, estudios realizados por distintos autores [42] muestran que los resultados de los códigos de difusión pueden ser más sensibles al formalismo de secciones eficaces empleado que a otros aspectos como el tipo de *solver* nodal o el esquema de acoplamiento termohidráulico. Se entiende por formalismo al conjunto de características y opciones adoptadas para la homogeneización y condensación de secciones eficaces. Más adelante se verá que este formalismo incluye las incertidumbres debidas a los métodos y modelos

propios del esquema particular que se esté utilizando. Por consiguiente, para cálculos de núcleo *best-estimate* es tan importante disponer de un simulador de núcleo preciso, como de un adecuado procedimiento de generación de las librerías requeridas. En esta tesis, y en el contexto del proyecto NURESAFE, se ha dedicado un gran esfuerzo a la generación de adecuadas librerías de secciones eficaces. En concreto dentro de NURESAFE, en el paquete de trabajo WP1.2 del subproyecto SP1 de física del núcleo, denominado “Simulación de alto orden de un MSLB en un PWR” había una tarea dedicada exclusivamente a la “preparación de las librerías de secciones eficaces avanzadas para la simulación de núcleo completo” del transitorio mencionado.

Por otra parte, el análisis BEPU requiere aportar los resultados con una rigurosa cuantificación de sus incertidumbres. Consciente de la importancia de las incertidumbres, el Comité de Ciencia Nuclear de la OCDE/NEA constituyó en 2005 un grupo de expertos que ha definido el “*OECD/NEA Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modeling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs*” [64]. Se trata de un ejercicio a nivel internacional cuyo objetivo es contribuir al desarrollo y evaluación de métodos de cuantificación de incertidumbres para simulaciones de reactores multi-escala y multi-física [6]. El problema es muy complejo, ya que involucra distintas disciplinas, por lo que la hoja de ruta del *benchmark* lo dividió en varias fases, estando dedicada la primera de ellas a los cálculos neutrónicos.

El grupo de investigación en Física de Reactores de la UPM está participando en el *benchmark* de UAM en el área de la propagación de incertidumbres en los cálculos neutrónicos gracias a un acuerdo específico de colaboración con el Consejo de Seguridad Nuclear (CSN). La propagación de incertidumbres en los cálculos de neutróica requiere identificar y analizar las principales fuentes de error e incertidumbre así como una capacidad de simulación computacional que incluye el procesamiento de los datos nucleares y sus covarianzas, la utilización de códigos de transporte para la obtención de librerías, el empleo de un simulador de núcleo y la implementación de técnicas de propagación de incertidumbres. La disponibilidad del código COBAYA y la capacidad de generar sus librerías de entrada hacen abordable este tipo de análisis de cuantificación de incertidumbres en cálculos 3D de núcleo.

Con los antecedentes descritos y con los objetivos de cubrir las necesidades planteadas de generación de librerías avanzadas y de cuantificación de incertidumbres que conduzcan a cálculos BEPU, se inició este trabajo de investigación.

1.2. Objetivos y contribuciones originales

El objetivo central de la tesis ha sido identificar y analizar las fuentes de error e incertidumbre en cálculos puramente neutrónicos y generar librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas y en pocos grupos de energía para cálculos de difusión de núcleo completo, tanto a nivel nodal como de *pin-cell*. El calificativo de librería avanzada hace referencia a dos ideas principales: librería adecuada para cálculos *best-estimate* y librería con cuantificación de incertidumbres. Estas librerías permiten una minimización de errores así como llevar a cabo cálculos neutrónicos BEPU de reactores de agua ligera.

En relación con la generación de librerías *best-estimate*, las contribuciones originales de la tesis son las siguientes:

- Revisión del procedimiento de generación de secciones eficaces a escalas nodal y *pin-by-pin* para obtener librerías que permitan que el código de difusión conduzca a resultados lo más próximos posible a los que proporcionaría teoría de transporte. Para ello, se han evaluado las técnicas de homogenización y se ha tenido en cuenta el fuerte acoplamiento existente entre el código de transporte de elemento empleado y el simulador de núcleo. Así, los factores de discontinuidad nodales y por *pin-cell* incluidos en las librerías han sido determinados a partir de los resultados de transporte proporcionados por el código de elemento teniendo en cuenta la discretización del operador de bajo orden, en este caso difusión, utilizado en COBAYA tanto a nivel nodal como *pin-by-pin*.
- Desarrollo de procesos de automatización para la generación de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas.
- Generación de librerías avanzadas de secciones eficaces, incluyendo factores de discontinuidad por interfaz y factores de reconstrucción de potencia, a escala nodal y de celda para su aplicación en la simulación de transitorios en reactores PWR y VVER [73, 120, 119, 76, 117].
- Contribución al desarrollo del código de difusión COBAYA4 [48].

En relación con la cuantificación de incertidumbres, las contribuciones originales de la tesis son las siguientes:

- Identificación de las fuentes de incertidumbre neutrónicas, y de manera particular cuando se aplica el esquema de cálculo habitual en la industria nuclear conocido como aplicación estándar.
- Propagación de incertidumbres debidas a los datos nucleares a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas, y análisis de las matrices globales de covarianzas. Para ello, se ha hecho uso del sistema de códigos SCALE6.2.
- Propagación de incertidumbres tecnológicas a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas, utilizando el sistema SCALE6.2.
- Estudio de los errores introducidos por el formalismo para la obtención de secciones eficaces: evaluación del error introducido por el autoblandaje de las resonancias y el cálculo *lattice*, y determinación del sesgo asociado.
- Desarrollo de una metodología para la optimización de librerías tabuladas basada en el empleo de coeficientes de sensibilidad para minimizar errores de interpolación [121]. Teniendo en cuenta que las librerías suelen estar tabuladas en función de las variables de realimentación, y siendo imposible precalcular las secciones eficaces homogeneizadas en todos los puntos del espacio paramétrico, es necesario seleccionar un cierto número de puntos representativos llamados puntos de malla o "*data-points*" donde

se llevan a cabo los cálculos de transporte. Con esta metodología se optimizan los puntos de malla reduciéndose el número de cálculos de transporte asociados.

- Desarrollo de una metodología alternativa a la anterior más práctica y susceptible de ser utilizada *on-the-fly* y evaluación de ambas metodologías en el análisis de diferentes transitorios en PWR [122].
- Aplicación de diferentes técnicas de propagación de incertidumbres en cálculos de núcleo con el código de difusión COBAYA.

Tras los trabajos realizados se propone la secuencia de cálculo SCALE6.2/COBAYA como una herramienta potente para el análisis neutrónico BEPU, generando con SCALE las librerías de secciones eficaces optimizadas con cuantificación de incertidumbres para su empleo por el simulador de núcleo COBAYA.

1.3. Estructura de la tesis

La tesis está estructurada en cinco grandes apartados junto con la bibliografía, que incluye todos los textos de referencia empleados en este trabajo.

El primer apartado de introducción (Capítulo 1) tiene un triple objetivo. En primer lugar se establecen los antecedentes, comentando los trabajos anteriores conducentes a la proposición de esta tesis y encuadrando los contenidos de la tesis dentro de la situación actual. A continuación se han definido los objetivos fundamentales de este trabajo de investigación y por último, se detalla el orden en que se presentan los desarrollos de esta tesis doctoral. Se ha añadido una lista de acrónimos, abreviaturas y términos del inglés técnico a los que se hace mención en los distintos capítulos.

El segundo apartado se corresponde con el estado del arte, donde se revisan las bases teóricas sobre las que se sustenta este trabajo de investigación. Como el tema principal del que trata esta tesis es sobre la propagación de incertidumbres en cálculos neutrónicos este apartado consta de dos capítulos fundamentales. Se lleva a cabo en primer lugar (Capítulo 2) una revisión de los métodos para el análisis 3D de núcleos de reactores, distinguiendo entre aquellos métodos basados en la ecuación de transporte, lo que sería el modelo más detallado posible, y los que lo hacen en la aproximación de difusión. En ambos casos se analizan ventajas y desventajas. En segundo lugar, se exponen en el Capítulo 3 cuales son las fuentes de incertidumbre genéricas en cálculos neutrónicos, clasificándose en tres categorías: datos nucleares, incertidumbres tecnológicas y debidas a los métodos y modelos. En este mismo capítulo se analizan también cuales son las metodologías para la propagación de incertidumbres. Finalmente el apartado se cierra con un capítulo (Capítulo 4) donde se hace una breve descripción de los códigos utilizados a lo largo de este trabajo de tesis.

En el tercer apartado se incluyen la mayoría de las contribuciones originales aportadas en la tesis. Se comienza este apartado (Capítulo 5) haciendo una revisión del método de generación de librerías de secciones eficaces, pero incluyendo algunas novedades que suplen algunas de las carencias que presentaba el método clásico, como por ejemplo la

homogeneización a nivel de celda o el cálculo de los factores de discontinuidad, etc. Al hacer este análisis se observará que los resultados finales obtenidos con un simulador de núcleo, están muy influenciados por la capacidad de reproducir en el código de difusión algunas de las características impuestas en el código *lattice*. Dicho de otro modo, existe un acoplamiento muy rígido entre código *lattice* y simulador de núcleo; ya que no se trata únicamente generar de parámetros equivalentes en el primero y utilizarlos en el segundo, sino de utilizarlos con la formulación adecuada de manera que se reproduzcan más fielmente los resultados de transporte. Se propone el sistema SCALE6.2/COBAYA como herramienta para el análisis neutrónico.

El Capítulo 6 introduce el tema de las incertidumbres, presentando el *benchmark* de UAM y particularizando la fuentes de incertidumbre para el esquema de cálculo habitual empleado en el análisis de reactores, conocido como aproximación estándar. Las incertidumbres debidas a los métodos y modelos utilizados se desarrollan por tanto para este esquema de cálculo y se identifican las fuentes de error e incertidumbres neutrónicas que serán objeto de atención a lo largo de la tesis.

Los siguientes capítulos giran todos ellos en torno a la propagación de las diferentes formas de incertidumbre. Así, en el Capítulo 7 se propagan las incertidumbres debidas a los datos nucleares a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas. Estas incertidumbres se incluyen en forma de matriz de covarianzas. Se ilustra, por tanto, para un elemento de referencia el esquema de cómo debe ser una librería avanzada de secciones eficaces y se estudia la dependencia de las covarianzas con diferentes aspectos tales como el tipo de elemento, la vecindad o las condiciones de operación. En el Capítulo 8 se propagan las incertidumbres tecnológicas también a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas y se comparan con respecto a las anteriores para ver la importancia relativa de cada una.

Las incertidumbres debidas a los métodos y modelos aplicados se tratan en los siguientes capítulos. En el Capítulo 9 se realiza una estimación de la incertidumbre debida a la aproximación en multigrupos y a las opciones del cálculo *lattice*. Ello se corresponde con las primeras fases de la aproximación estándar, conocidas como *cell physics* y *lattice physics*. Relacionado con el cálculo de núcleo o *core physics* se ha desarrollado una metodología (Capítulo 10) que permite minimizar el error de interpolación en las secciones eficaces al emplear librerías en formato tabular. Con la metodología propuesta se puede obtener una distribución de puntos para los cuales se dan los valores de las secciones eficaces.

El cuarto apartado consiste en la realización de ejercicios a escala de núcleo completo. El primero de ellos (Capítulo 11) culmina la propagación de incertidumbres al nivel máximo posible, desde el punto de vista puramente neutrónico, con un cálculo del núcleo para la central nuclear de *Three-Mile Island-1* (TMI-1) obteniéndose resultados (*k*-efectiva y distribuciones de potencia) con sus incertidumbres, comparando cuando se propagan únicamente incertidumbres debidas a datos nucleares o se hace también junto con las tecnológicas. En el Capítulo 12 se analizan diferentes transitorios poniendo de manifiesto la influencia que tienen sobre los resultados los efectos tanto de la generación de las librerías de secciones eficaces como de su optimización.

El quinto y último apartado recoge las conclusiones (Capítulo 13) sobre el trabajo realizado, y a continuación se presentan futuras líneas de desarrollo.

1.4. Acrónimos

Tecnológicos

ACMFD	Analytic Coarse Mesh Finite Differences	GPT	Generalized Perturbation Theory
ADF	Assembly Discontinuity Factor	HFP	Hot Full Power
APSR	Axial Power Shape Rods	HZP	Hot Zero Power
ASAP	Adjoint Sensitivity Analysis Procedure	HPC	High Performance Computing
ARI	All Rods In	IDF	Interface Discontinuity Factor
ARO	All Rods Out	IT	Incertidumbre Tecnológica
BEPU	Best-Estimate Plus Uncertainties	JEFF	Joint Evaluated Fission and Fusion
BOC	Begining Of Cycle	JENDL	Japanese Evaluated Nuclear Data Library
BWR	Boiling Water Reactor	LWR	Light Water Reactor
CDF	Cumulative Distribution Function	MG	Multi-Grupos
CE	Continuous Energy	MOC	Method Of Characteristics
CFD	Computational Fluid Dynamics	MOX	Mixed OXide
CMFD	Coarse Mesh Finite Differences	MSLB	Main Steam Line Break
DF	Discontinuity Factor	NDL	Nuclear Data Library
DN	Datos Nucleares	PDF	Probability Density Function
EAF	European Activation File	PWE	Power-Weighted Error
ENDF	Evaluated Nuclear Data File	PWR	Pressurized Water Reactor
EOC	End Of Cycle	SCDF	Single Cell Discontinuity Factor
ESC	Extended Step Characteristic	SET	Simplified Equivalence Theory
EWE	Error-Weighted Error	SPH	Super-Homogenization
FSAP	Forward Sensitivity Analysis Procedure	UQ	Uncertainty Quantification
GET	Generalized Equivalence Theory	VVER	Voda-Vodyanoi Energetichesky Reaktor

Institucionales

BNL	Brookhaven National Laboratory
CEA	Commissariat à l'Energie Atomique
CSEWG	Cross Section Evaluation Working Group
CSN	Consejo de Seguridad Nuclear
EDF	Electricité de France
ENUSA	Empresa Nacional del Uranio, Sociedad Anónima
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit
IRSN	Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire
LANL	Los Alamos National Laboratory
NCSU	North Caroline State University
NEA	Nuclear Energy Agency
NRC	Nuclear Regulatory Commission
NURESIM	NUclear REactor SIMulation
NURISP	NUclear Reactor Integrated Simulation Project
NURESAFE	NUclear REactor SAFEty simulation platform
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
ORNL	Oak Ridge National Laboratory
SAPHYR	Advanced System for Reactor Physics
SEANAP	Sistema Español de Análisis de Núcleos de Agua a Presión
TMI-1	Central nuclear de Three Mile Island, unidad 1
UAM	Uncertainty Analysis in Modelling
UPM	Universidad Politécnica de Madrid

Parte II

ESTADO DEL ARTE

Capítulo 2

Métodos neutrónicos para análisis 3D de núcleo

2.1. Introducción

Las ecuaciones neutrónicas describen el transporte de neutrones a través de la materia y las alteraciones que en ésta se producen debido a los procesos nucleares inducidos. En un reactor nuclear la población neutrónica viene gobernada por la ecuación de transporte neutrónico o ecuación de Boltzmann mientras que la composición isotópica (de la cual depende la población neutrónica) y su evolución están gobernadas por las ecuaciones de Bateman. En este capítulo y en toda la tesis nos centraremos únicamente en la primera familia de códigos neutrónicos, es decir, los que determinan la evolución de la población neutrónica sin entrar en cálculos de quemado.

En este capítulo se hace una revisión de los diferentes métodos empleados para el análisis 3D de núcleos. Básicamente los códigos neutrónicos para el análisis de reactores pueden clasificarse en dos grandes grupos atendiendo a la ecuación que resuelven. De esta manera encontramos los códigos de transporte que resuelven la ecuación de transporte neutrónico para lo cual existen dos grandes familias de métodos: los deterministas y los estocásticos. Y en paralelo a los códigos de transporte tenemos los códigos de difusión, muchas veces llamados como códigos o simuladores de núcleo, que resuelven la ecuación de difusión ya sea en malla fina (*pin-by-pin*) o en malla gruesa, siendo los métodos nodales los utilizados en este último caso.

El cálculo de un núcleo completo heterogéneo 3D usando métodos basados en la teoría del transporte neutrónico no ha sido planteado hasta hace pocos años debido a una limitación computacional. La resolución de este problema requiere computadoras con gran capacidad de memoria y potencia de cálculo como los supercomputadores, inexistentes hasta hace pocos años. La tendencia más extendida actualmente para el análisis y diseño de núcleos LWR, conocida como aproximación estándar, evita la realización de cálculos de núcleo completo basados en la ecuación de transporte y recurre a códigos de difusión.

2.2. Métodos basados en la ecuación de transporte

2.2.1. La ecuación de transporte neutrónico y sus métodos de resolución

La ecuación que rige la evolución temporal de la población neutrónica y su distribución en el núcleo del reactor es la ecuación de transporte de Boltzmann, deducida a partir del planteamiento de una serie de hipótesis sobre el comportamiento de los neutrones. La ecuación de transporte se aplica al flujo neutrónico angular Ψ definido en un espacio fásico hexadimensional. Es decir, el flujo angular se extiende sobre un dominio espacial, angular y energético caracterizado por 6 variables independientes $(x, y, z, \theta, \varphi, E)$ más la variable temporal. Si denominamos $\vec{\Omega}$ al vector dirección, es decir, el vector unitario que da la dirección del movimiento del neutrón, se puede expresar en coordenadas esféricas como

$$\vec{\Omega} = (\sin\theta \cdot \cos\varphi, \sin\theta \cdot \sin\varphi, \cos\theta) \quad (2.1)$$

siendo φ el ángulo azimutal y θ el ángulo polar. De la misma manera, identificando como $\vec{r}$ el vector posición tenemos

$$\vec{r} = (x, y, z) \quad (2.2)$$

y podemos expresar la ecuación de transporte como

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi + \Sigma_t \Psi = q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (2.3)$$

donde $q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$ representa el término fuente que viene dado por

$$\begin{aligned} q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = & \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_E \int_{\Omega} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' dE' + \\ & + \int_E \int_{\Omega} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' dE' + S_{ext} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Debido al carácter del término fuente la expresión de la ecuación de transporte nunca podrá quedar como una ecuación diferencial pura. La expresión 2.3 representa la forma íntegro-diferencial de la ecuación, y que por integración del operador diferencial se puede expresar también en forma integral. Los métodos deterministas surgen como métodos de resolución de la ecuación de transporte dependiendo de que forma de la ecuación resuelvan, como veremos en el siguiente apartado. Las otras técnicas de resolución son muy diferentes a las técnicas deterministas y se basan en una simulación probabilista, por lo que también se las conoce como técnicas de Monte Carlo, y las veremos en el apartado 2.2.1.2.

2.2.1.1. Métodos deterministas

Los métodos deterministas recurren a una discretización del dominio sobre el que se extiende el flujo angular, esto es, una discretización del espacio, ángulo de dirección de los neutrones y energía de los mismos. La discretización de esta última variable da lugar a lo que se conoce como **aproximación en multigrupos**, consistente en dividir el dominio energético en un número determinado G de grupos dentro de los cuales se asume que las secciones eficaces son constantes. De este modo la ecuación de transporte pasa a estar expresada como un grupo de G ecuaciones acopladas, lo que implica un importante ahorro en cantidad de información necesaria para los cálculos con respecto a un cálculo en energía continua así como en capacidad de computación necesaria. La aproximación en multigrupos es una técnica común a todos los métodos deterministas.

Conviene destacar que no es el objetivo de este apartado realizar una revisión exhaustiva de los diferentes métodos numéricos ya que excede el alcance de esta tesis. Sin embargo sí pretende ilustrar cuales son los tratamientos que realiza cada uno de aquéllos y que forma de la ecuación de transporte resuelven.

- En primer lugar, los métodos de **ordenadas discretas** (S_N) y **armónicos esféricos** (P_N) resuelven la ecuación expresada de forma íntegro-diferencial. Se diferencian entre sí atendiendo al tratamiento que se realiza de la variable angular. En el primer caso, se discretiza la componente angular eligiendo un número finito de direcciones en las que se resuelve la ecuación de transporte. Asociada a cada una de las direcciones se define una función de peso w_m con objeto de minimizar el error integral sobre el ángulo sólido.

Los métodos P_N por el contrario consideran la componente angular como un desarrollo en serie de armónicos esféricos. Precisamente a partir de la aproximación P_1 se puede obtener la ecuación de difusión, de la que más adelante hablaremos. Respecto a la componente espacial se pueden considerar discretizaciones tanto en diferencias finitas como en elementos finitos.

- Los métodos P_{ij} conocidos como **probabilidades de colisión** resuelven la ecuación integral donde la variable angular ha sido integrada, por lo que la incógnita pasa a ser el flujo escalar ϕ en lugar del angular Ψ asumiendo condiciones de isotropía. Emplea las suposiciones de flujo plano y fuente plana en cada región. Son cálculos rápidos y su uso está muy generalizado.
- Finalmente, está el **método de características** (MOC) que resuelve la ecuación característica, siguiendo trayectorias rectas de los neutrones que cruzan todo el dominio (*tracking*) realizando un cálculo iterativo del flujo sobre dichas trayectorias. Utiliza un método de *tracking* similar a los métodos P_{ij} pero no se restringe a condiciones de isotropía. Su aplicación se ha generalizado mucho en los últimos tiempos debido a su mayor precisión que los anteriores y al aumento de las capacidades computacionales.

Una descripción más detallada de cada método puede encontrarse en [60] donde pueden consultarse además las ventajas y desventajas de cada uno en términos de tiempos de cálculo, recursos de memoria demandados y nivel de precisión.

La aplicación de métodos deterministas a cálculos de núcleo completo 3D empieza a ser una realidad, algo impensable años atrás. Prueba de ello es la liberación en Diciembre de 2012 de la primera versión del código APOLLO3 que ya se ha utilizado en cálculos tridimensionales en reactores refrigerados por sodio [93].

Los métodos considerados a día de hoy como viables para llevar a cabo cálculos de núcleo completo con una descripción bastante detallada del reactor son el MOC y el S_N [52]. El método MOC proporciona soluciones muy precisas en geometrías complejas y se aplica sin problema a cálculos de núcleo completo en 2D [26, 87]. La extensión al 3D se lleva a cabo mediante un método de fusión que combina un cálculo MOC 2D en la dirección radial y una solución axial con un método nodal. Tal es el caso de los códigos CHAPLET-3D [81] y DeCART [70], que utiliza mallados refinados en la dirección radial mientras que en la dirección axial son más gruesos para reducir el número de planos. Este último código se ha empleado acoplado con un código CFD para llevar a cabo simulaciones en un núcleo PWR en condiciones estacionarias, lo que muestra el nivel de progreso que se está alcanzando[74]. Una excelente revisión de estos métodos y las perspectivas futuras de los cálculos de transporte deterministas 3D puede encontrarse en [109].

Una línea en vías de desarrollo basada en el método de ordenadas discretas ha sido publicada en [97], donde se emplea un método de ordenadas discretas que utiliza una descomposición en subdominios para superar las limitaciones computacionales del método, junto con una aceleración nodal para alcanzar una convergencia más rápidamente.

Pese a todo lo anterior, aún sigue siendo un desafío la aplicación de estos métodos a cálculos 3D de núcleo y la extensión generalizada de su uso por parte de la industria y organismos reguladores.

2.2.1.2. Métodos estocásticos

Suele decirse que las técnicas deterministas proporcionan una solución exacta a un problema aproximado mientras que las técnicas de Monte Carlo ofrecen una solución aproximada a una representación exacta del problema. Gracias al avance producido en los últimos años en la informática y disponer de ordenadores cada vez más rápidos, la aplicación de los códigos estocásticos se ha extendido muchísimo siendo ampliamente utilizados en los análisis de física de reactores. Mientras que en el pasado los métodos de Monte Carlo se empleaban principalmente para cálculos de blindaje y criticidad, recientemente se han ido aplicando cada vez más a la determinación de distribuciones de potencia y otros parámetros de diseño.

Entre las principales ventajas que ofrecen destacan el hecho de que permiten modelar de una forma más exacta la geometría del problema, junto con el hecho de que no emplean la aproximación en multigrupos. Esto conlleva un tratamiento más detallado de los datos nucleares al considerar por ejemplo las secciones eficaces continuas en energía.

Actualmente, mediante el método de Monte Carlo es totalmente factible calcular la distribución de flujo tridimensional para un estado estacionario en un reactor nuclear gracias a la capacidad de paralelización que ofrecen los códigos de este tipo. Incluso en problemas donde se requiere la evolución temporal del flujo como pueden ser cálculos de quemado es

posible simularlos con códigos de Monte Carlo como una sucesión de estados estacionarios donde las condiciones del sistema se mantienen fijas durante cada paso de quemado [116].

Sin embargo, la simulación de transitorios es aún un asunto por resolver, lo cual supone el principal desafío de esta técnica. Pese a que en los últimos años se ha planteado el acoplamiento de códigos estocásticos con códigos termohidráulicos de subcanal [128, 101, 62, 63, 32] la gran limitación está asociada a la cinética ya que a día de hoy no se dispone de ninguna herramienta consolidada para cálculos de Monte Carlo no estacionarios[129]. Adicionalmente está también el efecto de realimentación sobre las secciones eficaces que tienen las variables termohidráulicas, que exige un procesamiento de las primeras en cada actualización de las segundas. En este punto las simulaciones estocásticas no resultan aún prácticas para cálculos rutinarios [96].

Los códigos de Monte Carlo más empleados a día de hoy para cálculos de reactores son MCNP [126], TRIPOLI [40], KENO [51] y SERPENT [88].

2.3. Aproximación estándar

Se conoce con el nombre de aproximación estándar a la metodología más extendida para el diseño y análisis de núcleos LWR. Un esquema de la misma se muestra en la figura 2.1.

Esta metodología se basa en la idea de que en la resolución de la ecuación de transporte un medio heterogéneo puede ser sustituido por un medio homogéneo y obtener la misma solución promedio si los parámetros de ese medio homogéneo están adecuadamente determinados. El cálculo del reactor se aborda mediante una serie de pasos en los que se va homogeneizando progresivamente la heterogeneidad y se va aumentando la dimensionalidad, a la vez que se va haciendo un colapsamiento energético para finalmente aplicar teoría de difusión en pocos grupos al reactor homogéneo y obtener así una solución equivalente.

Como se aprecia en la figura 2.1 esta aproximación consta de tres cálculos conforme a los niveles de escala presentes en un reactor nuclear: celda elemental, elemento combustible (agregación de celdas) y el reactor en su totalidad (agregación de elementos combustibles). Los dos primeros niveles son cálculos de transporte 1D y 2D respectivamente y normalmente se realizan consecutivamente dentro del mismo código, mientras que el tercer nivel es un cálculo de difusión con un simulador de núcleo.

El primer nivel de cálculo corresponde a las celdas estructurales, que es donde se producen las variaciones más fuertes del flujo. Por ello, son cálculos de transporte 1D (en las últimas versiones de algunos códigos está implementado un cálculo MOC 2D) en muchos grupos de energía (o incluso en energía continua) de la celda estructural en red regular infinita. Este cálculo realiza un proceso llamado autoblandaje de las resonancias, o en inglés *self-shielding*, para transformar la librería en multigrupos independiente del problema en una librería dependiente del problema o “autoblandada”, adecuada para ser utilizada en cálculos de transporte. Esta transformación se debe a que el procesamiento que se hace de las librerías evaluadas para obtener una librería en multigrupos se hace promediando las secciones eficaces con un flujo correspondiente a unas hipótesis muy genéricas:

Figura 2.1: Flujo de cálculo estándar para el análisis 3D de núcleos

- Espectro de flujo genérico asintótico que para un reactor térmico tiene la forma de un maxweliano en el rango térmico, $1/E$ en el rango de resonancias y espectro de fisión en el rango rápido.
- Absorbente en dilución infinita, es decir, que la concentración del material absorbente no afecta al espectro neutrónico. No se consideran las depresiones locales del flujo en las resonancias
- Condiciones de red regular infinita

Por ello las secciones eficaces en multigrupos deben ser corregidas por el cálculo de autoblandaje. El fenómeno del autoblandaje tiene dos contribuciones. En un sistema homogéneo consistente en una mezcla de absorbente y moderador, la absorción resonante depende principalmente de la cantidad relativa de absorbente y moderador en la composición. Es lo que se conoce como autoblandaje energético. Si además se trata de un sistema heterogéneo donde el absorbente está dispuesto en celdas, separado del moderador, la absorción resonante depende también de la geometría y se conoce como autoblandaje espacial. Por último si la celda está rodeada de tubos de agua o aislada sucede que las absorciones resonantes no son iguales que en condiciones de red regular, y deben ser modificadas por el llamado factor Dancoff que tiene en cuenta la interacción entre múltiples celdas y la probabilidad de escape de regiones absorbentes.

Finalmente hay que apuntar también que el cálculo de autoblandaje está relacionado con el efecto Doppler que causa un ensanchamiento de las resonancias al aumentar la temperatura. En el cálculo de celda también se tiene en cuenta la temperatura real del problema para hacer la corrección pertinente y tener en cuenta este efecto.

El segundo nivel de cálculo se trata de un cálculo de elemento con condiciones de contorno reflectivas. A partir de la librería en multigrupos dependiente del problema se lleva a cabo un cálculo de transporte 2D en un número de grupos de energía que puede ir desde menos de 100, como es el caso de SCALE6.2 que puede ser en 56 grupos, a más de 100 o 200. Por ejemplo en SCALE6.1 la librería en multigrupos estaba estructurada en 238 grupos mientras que en SCALE6.2 se dispone de una librería en 252. En el caso del código APOLLO se utiliza un esquema de cálculo industrial conocido como *two-level*, donde el cálculo de *self-shielding* se hace en 281 grupos y tras una condensación a una estructura en menor número de grupos (37, 51 o 70) tiene lugar el cálculo de elemento [77].

Tras el cálculo de transporte tiene lugar un promediado que permite obtener secciones eficaces macroscópicas en regiones homogeneizadas (todo el elemento combustible o $1/4$ si es simétrico) y condensadas en pocos grupos de energía. Al promediar espacial y energéticamente con el espectro de flujo se reducen los parámetros de la geometría real a sistema más sencillos pero neutrónicamente equivalentes. Para garantizar esta equivalencia el promedio se hace preservando la tasas de reacción del sistema antes y después de la homogeneización.

A los cálculos de transporte realizados para la generación de secciones eficaces homogeneizadas y en pocos grupos de energía se les conoce como cálculos *lattice* y a los códigos que los realizan códigos *lattice*. El método de probabilidades de colisión fue el método por excelencia empleado para este fin gracias a su rapidez, aunque últimamente códigos basados en ordenadas discretas y MOC también se utilizan para ello.

Finalmente la última etapa de la aproximación se trata de un cálculo de difusión a nivel de núcleo completo 3D. Los cálculos del núcleo con códigos de difusión se basan en tablas de secciones eficaces macroscópicas, pre-generadas por los cálculos de transporte en la fase anterior, para regiones homogeneizadas y en pocos grupos de energía (típicamente dos). En la siguiente sección se tratará más en detalle como puede ser la elección de las regiones homogéneas y los cálculos a los que da lugar.

Es importante tener presente este esquema de cálculo en el análisis de núcleos ya que cada paso en la cadena de propagación de incertidumbres está ligado a cada una de las fases de este esquema como veremos en el capítulo 6.

2.4. Métodos basados en la ecuación de difusión neutrónica

2.4.1. La ecuación de difusión

La aproximación de difusión constituye sin ninguna duda el método más ampliamente utilizado para el análisis tridimensional de núcleos. Surge gracias a la aplicación de una serie de simplificaciones en las discretizaciones en los dominios angular y energético de la ecuación de transporte.

En primer lugar la aproximación angular elimina la dependencia angular del flujo neutrónico integrando éste sobre todas las direcciones del espacio:

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{\Omega} \Psi(\vec{r}, E, \Omega') d\Omega' \quad (2.5)$$

En realidad, el conocimiento del flujo escalar ϕ es suficiente para la mayoría de las aplicaciones sin necesitar el flujo angular Ψ cuya componente angular hace muy complicado su manejo. Junto a aquél, es necesario definir otra variable adicional conocida como densidad de corriente cuya expresión es:

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = \int_{\Omega} \Psi(\vec{r}, E, \Omega') \Omega' d\Omega' \quad (2.6)$$

Analizando la expresión 2.6 vemos que la corriente constituye el momento de orden 1 del flujo. Se trata de una magnitud vectorial no dependiente de la dirección que da un balance del flujo angular en todas las direcciones del espacio. El vector resultante indica la dirección predominante de movimiento de los neutrones, apuntando en la dirección donde es máximo el transporte de partículas.

La aproximación de difusión se obtiene a partir de la aproximación P_1 de la ecuación de transporte donde la primera suposición que se hace es considerar que el flujo angular tiene una débil dependencia con la variable angular, o lo que es lo mismo, suponer que el flujo angular es linealmente anisótropo de forma que se pueda expresar como:

$$\Psi(\vec{r}, E, \Omega) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E) + \frac{3}{4\pi} \vec{\Omega} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E) \quad (2.7)$$

Esta aproximación no es válida en zonas donde la dependencia angular del flujo cambie fuertemente. Es decir, cerca de una fuente o un fuerte absorbente como una barra de control, o cerca de la interfase con el vacío. Se trata de situaciones en donde una gran cantidad de neutrones van en una dirección y una pequeña cantidad en otra diferente, invalidando la hipótesis de isotropía o anisotropía lineal.

La segunda ecuación de la aproximación P_1 nos da una relación entre la corriente y el flujo escalar, y se obtiene suponiendo que la variación temporal de la corriente es mucho menor que el gradiente de flujo. Matemáticamente su expresión es:

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = -D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E) \quad (2.8)$$

conocida como ley de Fick, en la que el operador definido como coeficiente de difusión de define así:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3} \left[\Sigma_t(\vec{r}, E) - \frac{\int_0^\infty \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E) J_u(\vec{r}, E') \cdot dE'}{J_u(\vec{r}, E)} \right]^{-1}; \quad u = x, y, z \quad (2.9)$$

Las dos ecuaciones P_1 se combinan para dar la ecuación de difusión en energía continua, que en estado estacionario es:

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) = \\ & = \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E) J_u(\vec{r}, E') \cdot dE' + \chi(E) \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') \cdot dE' + Q_{ex}(\vec{r}, E) \end{aligned} \quad (2.10)$$

obtenida postulando las hipótesis de:

- La dirección de un neutrón no tiene efecto en la probabilidad de colisión con un núcleo
- Flujo angular linealmente anisótropo
- Pequeña variación de la corriente.

Respecto al dominio energético se aplica de nuevo la aproximación en multigrupos, ya que en la ecuación 2.10 las magnitudes varían de forma continua con la energía, lo que no resulta práctico a la hora de aplicar métodos de resolución. Para eliminar la dependencia con la energía, la ecuación 2.10 se integra sobre G intervalos en el dominio energético, obteniendo G ecuaciones:

2 grupos	4 grupos	8 grupos	Límite inferior de energía	Rango de energías
1	1	1	2.2313 MeV	Fisión
		2	0.82085 MeV	Fisión
		3	9.1188 keV	Resonancias no resueltas
	2	4	0.13007 keV	Resonancias resueltas
		5	3.9279 eV	Resonancias resueltas
	3	6	0.62506 eV	Resonancias anchas
2	4	7	0.15572 eV	Térmico
		8	0 eV	Térmico

Tabla 2.1: Estructuras en pocos grupos de energía

$$\begin{aligned}
-\nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{sg' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) \\
+ \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) + S_g(\mathbf{r})
\end{aligned}
\quad g = 1, \dots, G \quad (2.11)$$

Típicamente se emplean 2 grupos de energía en los cálculos de difusión, aunque también son frecuentes estructuras en 4 y 8 grupos. Para el caso de reactores rápidos se emplean 33 grupos de energía para tratar adecuadamente las relaciones espectrales. La estructura habitual en 2 grupos suele tener el corte energético entre niveles a 0.625 eV justo por encima de la última resonancia del Pu-240 y resonancias anchas de U y Pu. Un ejemplo de estructuras en 2, 4 y 8 grupos de energía para LWR se da en la tabla 2.1 identificando los rangos con la forma de las secciones eficaces de los átomos que se fisionan.

Para resolver el conjunto de ecuaciones 2.11 numéricamente, el núcleo del reactor es discretizado en nodos o celdas donde las propiedades nucleares se supone que permanecen constantes. Esta discretización hace referencia al problema de la homogeneización espacial sobre la que se basan los métodos de la teoría de difusión:

1. Homogeneización a nivel de celda, definida como una sola región en donde se ha homogeneizado la barra de combustible con su huelgo, vaina y refrigerante asociados. Esto da lugar a los métodos *pin-by-pin* o de malla fina.
2. Homogeneización de una fracción axial del elemento combustible o 1/4 de elemento, siendo los métodos nodales los métodos más ampliamente utilizados para la resolución de las ecuaciones.

Ambos se analizan brevemente en las siguientes subsecciones:

2.4.2. Métodos *pin-by-pin*

La realización de cálculos de núcleo 3D con un nivel de detalle a escala de celda ha sido investigada por varias organizaciones en las últimas décadas, como el Grupo de Física de Reactores de la UPM que desarrolló en los años 80 una formulación de difusión en malla fina en 2D y 2 grupos de energía, y que ha sido ampliamente aplicada a las centrales nucleares españolas de tipo PWR.

Para la resolución del problema en malla fina además de la aproximación por difusión es posible emplear otro método conocido como SP_3 siendo otra aproximación de la ecuación de transporte más precisa a costa de un mayor consumo de recursos computacionales. El método SP_3 ha sido por ejemplo incluido en los códigos DYN3D [8] y SCOPE2 [124, 125].

Volviendo a la resolución en malla fina mediante difusión hablaremos a continuación de los códigos COBAYA3 y su evolución COBAYA4, desarrollados por el Grupo de Física de Reactores de la UPM. COBAYA3 respecto a la formulación inicial incluye una serie de mejoras como la extensión del cálculo a tres dimensiones y un mayor número de grupos de energía [53]. Más concretamente presenta las siguientes características:

- Recurre a la descomposición en subdominios del problema para hacer uso de la paralelización empleando varias CPU simultáneamente [55]. Esta técnica se basa en el particionamiento del dominio de cálculo en regiones espaciales distintas que son tratadas por separado en diferentes procesadores y a la vez acopladas entre ellas a través de unas condiciones de contorno en las superficies que conectan subdominios entre sí. Particularmente, COBAYA3 emplea el algoritmo de disecciones alternadas basada en el método alterno de Schwarz. Divide la geometría del núcleo en cuartos de elemento combustible, incluyendo toda la longitud axial para poder tener en cuenta el acoplamiento termo-hidráulico. Estos cuartos de elemento se agrupan siguiendo cuatro combinaciones alternativas formadas por elementos combustibles completos, cuartos de elementos vecinos (*color-set*) o mitades de elementos en la dirección horizontal y vertical. El cálculo de todos los subdominios del núcleo en una determinada disección se denomina barrido. En dos barridos consecutivos se cambia la disposición de las disecciones garantizándose que de una disección a otra hay una superposición parcial de ambas. Es decir, hay un solape de manera que las fronteras de la primera disección están contenidas parcialmente dentro de la siguiente.
- La convergencia de los problemas de núcleo es acelerada con una solución nodal calculada entre cada barrido de cálculo. Para ello se utiliza el *solver* nodal ANDES implementado en COBAYA que produce una solución nodal empleando las secciones eficaces y factores de discontinuidad provenientes de la solución *pin-by-pin*.
- Permite la resolución de problemas estacionarios acoplados con el código termo-hidráulico de subcanal *COBRA-TF* [68, 67]; si bien este modelo de acoplamiento es un modelo rígido *ad-hoc* para ambos códigos programado directamente en el código fuente de COBAYA.

El desarrollo de computadores con más memoria permitió la posibilidad de llevar a cabo cálculos de núcleo completo *pin-by-pin* sin la necesidad de recurrir a la técnica de descom-

posición en subdominios, única alternativa hasta el momento. Por ello en COBAYA4 tras una reordenación de la fuente del código se optó por obviar la técnica de disecciones alternadas y los cálculos *pin-by-pin* se hacen en un solo dominio, sin necesidad de paralelizar, donde además el acoplamiento con códigos termo-hidráulicos se hace utilizando novedosas técnicas de *medcoupling* en lugar del acoplamiento interno que había en COBAYA3. Además estos cálculos pueden ser desarrollados dentro de la plataforma de *software* SALOME desarrollada en los proyectos europeos NURESIM [25]/NURISP [24]/NURESAFE [21].

2.4.3. Métodos nodales

Existen varios tipos de métodos nodales para la resolución de la ecuación de difusión, y en todos ellos se encuentran en una fase elevada de madurez siendo muy extendida su aplicación gracias a que proporcionan soluciones con suficiente precisión unido a tiempos de cálculo reducidos. Las mayores limitaciones se deben a la homogeneización de regiones materiales considerablemente grandes (un cuarto de elemento combustible) y a la condensación en pocos grupos de energía.

No es el objetivo de esta tesis analizar en detalle cada método nodal y discutir sus ventajas e inconvenientes. Simplemente se limita a enumerar los más relevantes. Un análisis exhaustivo de ellos se puede encontrar en [91], donde destacan para geometría cartesiana el método de integración transversal, los métodos nodales polinomiales y los métodos analíticos.

El *solver* ANDES implementado en COBAYA3 y COBAYA4 está basado en el método ACMFD (*Analytic Coarse Mesh Finite Differences*) y permite la resolución de la ecuación de difusión en multigrupos en geometrías 3D rectangulares y hexagonales. [92]

A la hora de aplicar métodos nodales a núcleos LWR de forma fiable y satisfactoria se requiere, además de códigos de difusión precisos a nivel nodal, metodologías adecuadas para producir adecuadamente parámetros “equivalentes” (secciones eficaces y factores de discontinuidad) usados como input en los códigos. Ello se corresponde con la primera fase de la aproximación estándar que se vio en el apartado 2.3. Estos parámetros abarcan regiones homogéneas normalmente correspondientes a un elemento combustible, y se calculan como se vio previamente por los códigos *lattice* mediante un pesado de las secciones eficaces dependientes espacialmente con la solución de flujo obtenida en un cálculo de elemento con condición de contorno reflectiva (corrientes netas nulas). En este sentido se han desarrollado metodologías para funcionalizar los parámetros “equivalentes” con las variables de estado termohidráulicas [118].

2.4.4. Corrección de los métodos de difusión por transporte

La idea básica de la homogeneización es reemplazar los nodos heterogéneos por otros homogéneos, de forma que el cálculo del sistema homogeneizado preserve los valores medios que se obtendrían de la solución hipotética del sistema heterogéneo original con un método de más alto orden. Como esta solución no es conocida, se tienen que determinar parámetros homogeneizados de un problema de referencia cuya solución sea próxima a la real, que suele

ser un cálculo de elemento con condiciones de contorno de corriente neta nula.

Sin embargo, no es posible que el cálculo homogéneo preserve todos los detalles del heterogéneo. Aunque se recalcularan las constantes en multigrupos con el espectro y condiciones de contorno obtenidas del cálculo completo del sistema heterogéneo, la solución de la ecuación homogeneizada no sería capaz de reproducir los valores medios de referencia. Ello es debido a que la imposición de continuidad del flujo y corriente a través de las interfases es demasiado restrictiva para permitir la preservación simultánea de los flujos medios, tasas de reacción y corrientes del problema heterogéneo. La idea entonces es introducir unos factores de corrección del flujo en las interfases nodales, de forma que se permita que el flujo homogéneo sea discontinuo en dichas interfases y así el cálculo del sistema homogéneo pueda reproducir los valores medios del problema de referencia.

Esos factores de corrección no sólo tienen en cuenta los efectos de homogeneización, también tienen en cuenta las demás aproximaciones implícitas en un cálculo de difusión nodal, es decir, efectos de condensación, efectos de malla gruesa y efectos de transporte [84].

- Los efectos de condensación energética proceden de colapsar desde los 40-200 grupos usados típicamente por los códigos *lattice* a un número reducido de grupos (típicamente de 2 a 8 grupos para cálculos de LWR) para los cálculos de difusión del núcleo completo. Esa condensación conlleva una pérdida de precisión de la dependencia espectral.
- Los efectos de malla gruesa engloban los errores asociados a la discretización espacial.
- Los efectos de transporte involucran los errores producidos al introducir simplificaciones para pasar de la ecuación de transporte a la de difusión. Es bien sabido que la aproximación de difusión no es precisa en zonas donde hay un fuerte gradiente del flujo. En un cálculo típico de núcleo, estas zonas son las fronteras con el reflector, zonas próximas a materiales fuertemente absorbentes (una barra de control insertada) o cuando dos elementos muy diferentes se ubican uno junto al otro (por ejemplo un elemento de UO_2 y otro de MOX).

A la hora de calcular estos factores de corrección existen varios métodos, siendo la denominada Teoría de Equivalencia Generalizada GET (*Generalized Equivalence Theory*) y el método de superhomogeneización (SPH) los más extendidos.

2.4.4.1. Teoría General de Equivalencia

Los factores de discontinuidad (IDF, *Interface Discontinuity Factors*) basados en GET son la opción más común para corregir el compendio de errores implícitos en los cálculos de difusión [113]. Estos factores intervienen en las ecuaciones discretizadas en los términos de la corriente como un parámetro adicional, respetando los valores calculados de las secciones eficaces y manteniendo las tasas de reacción inalteradas. Dependiendo del tipo de cálculo que se realice y el nivel de homogeneización aplicado, la definición de estos factores varía.

Definición de los factores de discontinuidad a nivel de celda

Se definen como el cociente del flujo heterogéneo en la frontera ϕ_S^{het} , que es el obtenido por la solución de la ecuación de transporte; y el flujo homogéneo ϕ_S^{hom} , obtenido de la solución de difusión. Estos factores se obtienen por grupo de energía:

$$f_g = \frac{\phi_S^{het}}{\phi_S^{hom}} \quad (2.12)$$

Para el caso de una celda aislada con condiciones de contorno reflectiva el factor correspondiente se denomina SCDF *Single Cell Discontinuity Factor*. En este caso concreto y por la condición de contorno reflectiva sucede que la corriente en las interfaces es nula y que el flujo homogéneo en la interfaz es igual al flujo medio. Por ello, el factor de discontinuidad se puede obtener directamente tras el cálculo de transporte como el cociente del flujo en la superficie y el flujo medio de la celda; y este factor es el mismo en todas las interfaces de la celda.

$$J^{het} = 0 \Rightarrow \phi_S^{hom} = \bar{\phi}^{het} \Rightarrow f_{SCDF} = \frac{\phi_S^{hom}}{\bar{\phi}^{het}}$$

En el caso de que la celda no esté en condiciones de red regular sino que tenga un entorno, los factores de discontinuidad son diferente para cada interfaz al ser diferentes las corrientes en cada una de ellas. Para poder calcular los factores se necesita la formulación del operador de bajo orden, difusión, y la discretización que se emplee. En el caso concreto de COBAYA se utiliza la formulación de diferencias finitas:

$$J^{het} = -D \frac{\phi_S^{hom} - \bar{\phi}^{het}}{h/2}$$

donde h es la anchura de la celda. Con esta formulación el flujo homogéneo en la superficie se calcula como

$$\phi_S^{hom} = -\frac{J^{het} \cdot h}{2D} + \bar{\phi}^{het}$$

y se puede computar el factor de discontinuidad aplicando la relación 2.12. Los factores de discontinuidad así definidos e introducidos en el cálculo de difusión conservan los valores del flujo y corriente neta en la interfase que se obtienen en la solución de transporte, mientras que el flujo homogéneo se permite que sea discontinuo en la frontera para permitir que las demás variables se preserven [110].

En resumen, para poder calcular los IDF a nivel de celda el código de transporte debe suministrar por grupo de energía la siguiente información:

- Flujo medio de la celda
- Flujos en las interfaces
- Corrientes en las interfaces
- Coeficiente de difusión

Definición de los factores de discontinuidad a nivel nodal

A nivel nodal, la definición de los factores GET por grupo de energía nos lleva hasta una matriz G por G diagonal para cada nodo, donde los elementos de la diagonal son los IDF.

$$|\phi_g^{het}\rangle_{\pm\frac{h}{2}} = F_d |\phi_g^{hom}\rangle_{\pm\frac{h}{2}} = \begin{bmatrix} f_{g,1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & f_{g,G} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{g,1}^{hom} \\ \vdots \\ \phi_{g,G}^{hom} \end{bmatrix}$$

En un cálculo de elemento aislado, con corriente neta nula, el perfil de la distribución de flujo homogéneo sería plano, de forma que el flujo homogéneo en la interfase es igual al flujo medio de la solución de transporte heterogénea de elemento aislado. El factor correspondiente se denomina Single Assembly Discontinuity Factor (ADF) y puede ser computado directamente a partir de la solución de transporte como el cociente de los flujos de interfase y medio:

$$J^{het} = 0 \implies \phi_S^{hom} = \bar{\phi}_g^{het} \implies f_{SADF} = \frac{\phi_S^{het}}{\bar{\phi}_g^{het}}$$

Al igual que en el caso de la celda, si el elemento no se encuentra en malla infinita se tienen corrientes no nulas en el contorno y los IDF dependerán del método de cálculo nodal de difusión para obtener el flujo homogéneo en la superficie. El *solver* nodal de COBAYA está basado en el método ACMFD que lo calcula como

$$R \cdot |\phi_g^{hom}\rangle_{(\pm h/2)} = C^f R \cdot |\bar{\phi}_g\rangle \mp \frac{H}{2} C^j R \cdot D_g^{-1} |J_g\rangle_{(\pm h/2)} - |T\rangle_{(\pm h/2)}$$

donde R , C^f y C^j son matrices de dimensión G por G. El vector T está relacionado con las fugas transversales.

Resulta entonces que para calcular los IDF a nivel nodal el cálculo de transporte debe aportar por grupo de energía:

- Flujos medios del nodo
- Corrientes en las interfaces (permitirán determinar el vector asociado a las fugas transversales)
- La matriz de difusión en multigrupos (incluye las secciones eficaces de absorción, dispersión, fisión y el coeficiente de difusión)
- Flujos en las interfaces

2.4.4.2. Método de super-homogeneización

Otra opción para calcular factores de discontinuidad es usar el método SPH, que perturba el sistema de secciones eficaces para conservar tanto las tasas de reacción como las corrientes

de neutrones de una celda o nodo hacia el vecino; resultando un proceso más complejo al introducir una parametrización zonal del entorno que afecta a las secciones eficaces. Las tasas de reacción promedio se mantienen constantes introduciendo un factor multiplicativo en las secciones eficaces, μ , el cual tiene que ser obtenido mediante un procedimiento iterativo usando la formulación del sistema homogéneo. No contiene una dependencia direccional haciendo más difícil su uso en la discriminación del entorno. [59, 61]

$$\tilde{\Sigma} \cdot \bar{\phi}^{hom} = \Sigma \cdot \bar{\phi}^{het}$$

$$\tilde{\Sigma} = \mu \cdot \Sigma$$

$$\mu = \frac{\bar{\phi}^{het}}{\bar{\phi}^{hom}}$$

2.4.4.3. Método de equivalencia de Selengut

Los factores de discontinuidad conocidos como Selengut resultan de aplicar una *Black Box Homogenization* a la celda. Estos factores preservan las corrientes parciales de transporte en la frontera entre celdas $J_{\pm}^{het}$ al contrario de la teoría de equivalencia que preserva los valores de corriente y flujo en la superficie. Para que en el caso de los factores GET se preservaran las corrientes parciales debía suceder que el operador de alto orden fuera también un operador de difusión, que no es lo habitual. Los factores Selengut preservan las corrientes parciales para cualquier otro operador de alto orden [107]. Se definen como:

$$f = 2 \cdot \frac{J_{-}^{het} + J_{+}^{het}}{\phi_S^{hom}}$$

Los factores Selengut y GET se aplican de la misma manera dentro de la ecuación discretizada de la corriente por lo que no se requieren desarrollos adicionales dentro de los códigos de difusión para aplicar cualquiera de las dos definiciones.

2.4.4.4. Teoría Simplificada de Equivalencia

Esta teoría (SET *Simplified Equivalence Theory*)[75] permite reducir el número de parámetros que se dan en la librería dividiendo todas las secciones eficaces del mismo grupo de energía por el factor de discontinuidad correspondiente a ese grupo. Esto se puede hacer siempre que el elemento combustible sea simétrico para que todas las interfaces externas sean equivalentes y el valor del factor de discontinuidad sea el mismo en todas. Los nuevos valores de secciones eficaces así obtenidos permiten preservar las tasas medias de reacción.

Capítulo 3

Revisión de fuentes de incertidumbre neutrónicas y métodos de propagación

El establecimiento de metodologías *best-estimate* en reactores LWR para el diseño y análisis de seguridad, exige entender el origen de las incertidumbres, caracterizarlas y propagarlas para conocer la confianza en las variables de interés, y poder así introducir adecuados márgenes de diseño, así como decidir dónde se deben realizar esfuerzos adicionales para la reducción de las incertidumbres.

La estrategia más común para incorporar la incertidumbre en los resultados neutrónicos involucra dos pasos básicos: el primero consiste en la caracterización de las fuentes de incertidumbre, y el segundo en su propagación hasta los resultados finales. En este capítulo se hace una revisión de las fuentes de incertidumbre relacionadas con la neutrónica, así como una revisión de las metodologías disponibles para la propagación de incertidumbres en cálculos tridimensionales de reactores.

En primer lugar se hace una introducción al concepto de incertidumbre, su clasificación y las teorías para su representación. También se introducen los conceptos de covarianza y correlación. Seguidamente se analizan de un modo genérico cuáles son las distintas fuentes de incertidumbre en cálculos puramente neutrónicos, categorizándolas en tres tipos. Uno de esos tipos se corresponde con los métodos seleccionados para resolver los cálculos, y dependerá por tanto de las características de la metodología aplicada. Como se analizó en la sección 2.3 la metodología más extendida a día de hoy en el análisis tridimensional de reactores es la conocida como aplicación estándar. Por ello, en el capítulo 6 se profundiza en el análisis de las fuentes de incertidumbre para esta metodología concreta de aplicación en esta tesis, que al constar de varios cálculos sucesivos, requiere analizar qué incertidumbres van apareciendo en cada paso.

3.1. Concepto de incertidumbre y su representación

Incetidumbre

El término incertidumbre siempre aparece asociado a la medida de magnitudes. Los valores que toman las magnitudes físicas suelen conocerse de manera imperfecta debido a varias razones:

- Los aparatos de medida tienen una precisión limitada
- Los sistemas de control y los procesos de fabricación no son perfectos
- Los modelos matemáticos son versiones simplificadas de la realidad
- El conocimiento de expertos es limitado

Una primera definición de la incertidumbre de una magnitud física podría ser *la descripción del conjunto de valores que se le pueden atribuir*. En el Vocabulario Internacional de Metrología se dice que la incertidumbre de medida *es un parámetro, asociado al resultado de una medición, que caracteriza la dispersión de los valores que razonablemente podrían ser atribuidos al mensurando* (objeto que se mide).

Una tarea importante en Metrología y otras disciplinas es el estudio y análisis de cómo se propagan las incertidumbres, es decir, cómo se determina la incertidumbre de una variable x a partir de las incertidumbres de las medidas de N mensurandos, lo que obliga a adoptar un criterio de cuantificación de la incertidumbre. No cabe duda de que cuanto menor sea la incertidumbre de la medida mejor es ésta, es decir, el valor de la incertidumbre es el primer índice de la calidad de una medida, que es tanto mayor cuanto menor es aquella.

Durante los últimos 25 años, la comunidad de evaluación del riesgo, empezando por la comunidad dedicada a la seguridad nuclear, ha desarrollado una categorización de las incertidumbres muy efectiva y práctica en dos tipos: incertidumbres aleatorias y epistémicas. Una excelente revisión sobre esta clasificación puede encontrarse en el capítulo 2 de [99].

1. La **incertidumbre aleatoria** también denominada estocástica, objetiva o de tipo A, se debe a una aleatoriedad o variabilidad intrínseca (espacial, temporal...). La naturaleza fundamental de esta incertidumbre es el azar, por ejemplo en un proceso estocástico. La incertidumbre aleatoria existe debido a diferencias entre individuos, como la heterogeneidad aleatoria en una población que puede darse espacialmente o temporalmente. La incertidumbre aleatoria radica en el hecho de que comúnmente las magnitudes pueden tomar valores de un rango conocido, pero que el valor exacto irá variando por azar de unidad a unidad, de punto a punto espacial o de instante a instante. La representación matemática de este tipo de incertidumbre es una distribución de probabilidad. Algunos ejemplos de magnitudes escalares que tienen variabilidad aleatoria son: variabilidad en las dimensiones geométricas en diferentes partes de una pieza manufacturada o variabilidad de la temperatura atmosférica en un día dado en una localización dada.

2. La **incertidumbre epistémica** se define como la incertidumbre debida a la falta de conocimiento. También se la conoce como subjetiva o de tipo B. La fuente fundamental de incertidumbre epistémica es la información incompleta o conocimiento incompleto de cualquier tipo sobre el sistema de interés. La incertidumbre epistémica es una propiedad del modelador u observador mientras que la incertidumbre aleatoria es una propiedad del sistema que está siendo modelado u observado. La falta de conocimiento puede estar relacionada con la modelización del sistema, la resolución computacional del modelo o los datos empleados. Desglosemos brevemente cada uno de ellos. Los problemas de modelización incluyen la falta de conocimiento de las características o procesos en el sistema, del estado inicial del sistema o del entorno del mismo mientras que los problemas computacionales incluyen aproximaciones numéricas en algoritmos o estimaciones numéricas. Por último, los problemas relacionados con los datos se refieren al conocimiento incompleto de la información de entrada requerida para la simulación, y aproximaciones y correcciones que se hacen en el procesamiento de esos datos.

Por tanto, la característica fundamental de la incertidumbre epistémica es la ignorancia o desconocimiento ya sea en los datos, en la modelización o en la resolución computacional. Algunos autores, como Oberkampf [99], clasifican esta ignorancia en dos tipos: ignorancia consciente e ignorancia ciega.

- La primera de ellas es una ignorancia reconocida, al asumirse hipótesis o aproximaciones por razones prácticas. Corresponderían por ejemplo a las aproximaciones aplicadas en la modelización o al recurso al juicio de expertos ante la falta de datos experimentales. Esta ignorancia consciente conlleva una incertidumbre reconocida (*recognized uncertainty*) que es una incertidumbre epistémica.
- La ignorancia ciega lleva asociada la incertidumbre ciega (*blind uncertainty*), definida como la incertidumbre epistémica en la que no está reconocido que el conocimiento es incompleto y que ese conocimiento es relevante a la hora de modelizar el sistema de interés. Las causas más comunes de incertidumbres ciegas son errores humanos o fallos en el juicio. Algunos ejemplos son: errores de programación en *software* usados en simulación, errores en la preparación de los datos de entrada, hipótesis no asumibles, etc. No existen métodos fiables para estimar la magnitud de las incertidumbres ciegas y su impacto en un modelo y su simulación. Como consecuencia, como primera aproximación para tratar con estas incertidumbres es intentar identificarlas a través de diferentes técnicas como procedimientos y protocolos redundantes para operaciones o análisis, varios procedimientos para chequear las herramientas de *hardware* y *software*, empleo de diferentes instalaciones experimentales o la variedad de opinión de expertos.

En la figura 3.1 se muestra un esquema que ilustra la clasificación realizada de las incertidumbres

Diferencia entre incertidumbre y error

En muchas ocasiones no está clara la diferencia entre los conceptos de incertidumbre y error. El error en una cantidad se define como la desviación respecto al valor verdadero de

Figura 3.1: Clasificación de las incertidumbres

la cantidad, esto es, la diferencia entre el valor medido o calculado y el valor verdadero o de referencia:

$$\varepsilon = y_{\text{medida o calculada}} - y_{\text{verdadera}}$$

Es decir el concepto de error está asociado con el valor verdadero de una magnitud mientras que la incertidumbre, como vimos anteriormente, caracteriza la dispersión de los valores atribuidos. El error puede ser positivo o negativo mientras que la incertidumbre es siempre positiva.

Los errores de medición afectan a cualquier instrumento de medición y pueden deberse a distintas causas. Los que se pueden de alguna manera prever, calcular, eliminar mediante calibraciones y compensaciones se denominan deterministas o sistemáticos y se relacionan con la exactitud de las mediciones. Los que no se pueden prever, pues dependen de causas desconocidas o estocásticas se denominan aleatorios y están relacionados con la precisión del instrumento. Por ello, de acuerdo a lo anterior atendiendo a su naturaleza los errores admiten una clasificación en dos grandes vertientes: **errores aleatorios** y **errores sistemáticos** [7].

Del error aleatorio no se conocen las leyes o mecanismos que lo causan bien sea por su complejidad o bien por su mínima influencia en el resultado final. Se puede definir como el componente del error de medida que en sucesivas medidas varía de una forma impredecible. Por el contrario el error sistemático es el componente del error de medida que en sucesivas medidas permanece constante o varía de una manera predecible, al conocerse las leyes que lo causan. Por ello se dice que el error sistemático introduce un sesgo. Matemáticamente el error aleatorio se define como la diferencia entre el resultado de una medida y el valor medio que resultaría de un número infinito de medidas del mismo mensurando en las mismas condiciones. Por su parte el error sistemático es la diferencia entre el valor medio que resultaría de un número infinito de medidas del mismo mensurando y el valor verdadero del mensurando.

Por todo lo anterior también se distingue en metrología entre precisión de la medida y exactitud de la medida (en inglés serían los términos *precision* y *accuracy*). La primera de

ellas sería la proximidad del acuerdo entre los resultados de sucesivas medidas al mismo mensurando bajo las mismas condiciones mientras que la segunda de ellas (relacionada con el error sistemático) sería la proximidad entre los resultados de sucesivas medidas y el valor verdadero de la magnitud que se trata de medir. La figura 3.2 ilustra este hecho.

Figura 3.2: Diferencia entre precisión y exactitud

Muchos textos usan error e incertidumbre de forma intercambiable. La razón es que el error, puesto que en muchas ocasiones es desconocido y no hay certidumbre sobre su valor, puede tratarse como una incertidumbre. Sin embargo, esto no debería llevar a confusión o malinterpretación de su causa, con el fin de dirigir los esfuerzos a la reducción o eliminación de la fuente del error o la incertidumbre.

En el contexto de esta tesis, se preferirá utilizar el término incertidumbre cuando la fuente sea estocástica en su naturaleza o debida a una falta de conocimiento ciega, y el término error cuando la fuente sea debida a aproximaciones conscientes que se introducen por razones prácticas, y que por tanto conducen a desviaciones sistemáticas respecto al valor verdadero.

Representación de la incertidumbre

A continuación, se van a ofrecer unas pinceladas sobre la representación de la incertidumbre. Existen varias teorías para ello, y una revisión se puede encontrar en [98]. La primera en desarrollarse fue la llamada teoría de probabilidad, basada como su propio nombre indica, en el concepto de probabilidad. Ésta se define como el límite de la frecuencia relativa de sucesos aleatorios cuando el número de sucesos tiende a infinito. Se trata de una teoría adecuada para representar la incertidumbre aleatoria y, a veces, también la epistémica. El análisis de intervalos, la teoría de posibilidad y la teoría de la evidencia son otras teorías que permiten la caracterización de la incertidumbre, más utilizadas cuando la información disponible es escasa [98].

Figura 3.3: Función de densidad de probabilidad

Aquí se va a analizar la teoría de la probabilidad por ser la más extendida a la hora de la representación de incertidumbres. Se basa en el hecho de que si tuviésemos una magnitud, denominémosla cierta, ésta quedaría representada por un conjunto discreto de valores únicos. Sin embargo, si no sabemos a ciencia cierta los valores exactos que puede tomar la magnitud (magnitud incierta); ésta se trata como una variable aleatoria que se caracteriza por una **distribución de probabilidad**. Se trata de una función que asigna a cada suceso de la variable la probabilidad de que ocurra, y está definida sobre el conjunto de todos los sucesos, donde cada uno de los sucesos es un rango de valores de la variable aleatoria.

Una distribución de probabilidad se caracteriza por dos funciones: función de distribución (CDF) y una función de densidad de probabilidad (PDF). Veámoslo con un ejemplo práctico. Como veremos más adelante, las dimensiones de la pastilla de combustible se ajustan a una distribución normal que en el caso del BWR el valor medio son $0,60579 \text{ cm}$ con una desviación típica de $4,33 \cdot 10^{-4} \text{ cm}$, cuya función de densidad se representa en la figura 3.3. El significado de la función de densidad se interpreta como la probabilidad de que la variable aleatoria esté en una región específica del espacio de posibilidades estará dada por la integral de dicha función entre uno y otro límite de la mencionada región. De esta definición se desprende que la integral sobre todo el espacio es de valor unitario.

La función de distribución, llamada a menudo función de distribución acumulada, describe la probabilidad de que la variable aleatoria se sitúe en la zona de valores menores o iguales a un determinado valor. Para el mismo ejemplo de las pastillas de combustible la función de distribución viene representada en la figura 3.4. Por ejemplo, la probabilidad de que el radio de la pastilla sea menor o igual a $0,6060 \text{ cm}$ es 0.7 aproximadamente. En la misma figura se ve que es una función que tiende a 1, pues la probabilidad de que la pastilla tenga un radio menor o igual al valor máximo será a igual 1.

En ocasiones, en lugar de especificar la PDF o CDF para caracterizar la incertidumbre, se pueden dar descripciones parciales: momentos de la distribución (media, varianza, curtosis, ...) o regiones de probabilidad (unilateral o bilateral).

Covarianzas y correlaciones

En el caso de existir más de una variable aleatoria es necesario introducir el concepto de covarianza. La covarianza indica el grado de variación conjunta de dos variables aleatorias respecto al valor medio de cada una de ellas. Es una medida del grado en que dos variables aleatorias se mueven en la misma dirección o en direcciones opuestas la una respecto a la

Figura 3.4: Función de distribución

otra. Es el dato básico empleado para determinar si existe una dependencia entre ambas variables. Cuando los valores altos de una variable se corresponden fundamentalmente con los valores altos de la otras, y análogamente con los pequeños, indica que ambas variables tienen un mismo comportamiento por lo que su covarianza será positiva. Por el contrario, cuando a los mayores valores de una variable le suelen corresponder los menores de la otra, el comportamiento de ambas es contrario y su covarianza será negativa. El signo de la covarianza expresa la tendencia en la relación lineal entre las variables.

Sin embargo, la interpretación de su magnitud es un tanto abstracta y poco intuitiva. Resulta, por tanto, más práctico emplear la versión normalizada de la covarianza que es el coeficiente de correlación de Pearson. Se emplea habitualmente para medir la relación lineal entre dos variables aleatorias en lugar de la covarianza ya que es independiente de la escala de medida de las variables. La relación entre el coeficiente de correlación y la covarianza viene dada por la expresión:

$$\rho_{XY} = \frac{cov_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y}$$

siendo el numerador la covarianza entre dos variables aleatorias X e Y, y el denominador el producto de las desviaciones típicas de ambas variables. Su valor está comprendido entre $[-1, 1]$ siendo 1 cuando existe una relación directa positiva; 0 cuando no existe y -1 cuando existe una relación inversa total.

3.2. Fuentes de incertidumbre en cálculos neutrónicos

En esta sección se van a desglosar cuáles son las fuentes de incertidumbre en cálculos neutrónicos. Atendiendo al origen de las incertidumbres se clasifican éstas en tres categorías: datos nucleares, incertidumbres tecnológicas y debidas a métodos y modelos.

Las incertidumbres en los datos nucleares son aquéllas debidas al desconocimiento del valor exacto de la magnitud de una variable que interviene en las ecuaciones que rigen la neutrontica. El origen de las incertidumbres tecnológicas se debe en cambio al proceso tecnológico propio de fabricación y manufactura de los dispositivos y elementos que conforman el reactor: barras de combustible, elementos combustible, etc. Finalmente, las simplificaciones

en la modelización del sistema y las aproximaciones inherentes al método de resolución de las ecuaciones neutrónicas introducen errores cuyo valor se desconoce, motivo por el cual son tratados como una incertidumbre.

En las siguientes secciones se van desglosando cada una de ellas.

3.2.1. Datos nucleares

Como se comentó al revisar los métodos de cálculo neutrónicos en el capítulo 2, el comportamiento neutrónico del reactor está definido por dos ecuaciones que gobiernan espacial y temporalmente el movimiento de los neutrones y el inventario isotópico, regidos por la ecuación de Boltzmann y ecuaciones de Bateman, respectivamente. Ya se especificó también que esta tesis estará centrada únicamente en la ecuación de transporte, para la cual se analizarán qué datos exactamente son los que están involucrados y cuáles tienen incertidumbre. Sin embargo se hará brevemente una mención de cuales serían además en el caso de tener en cuenta el quemado.

Vamos por tanto a centrarnos ahora en la ecuación de transporte estacionaria, cuya expresión se recuerda:

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi + \Sigma_t \Psi = & \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_E \int_{\Omega} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' dE' + \\ & + \int_E \int_{\Omega} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' dE' \end{aligned} \quad (3.1)$$

Las incertidumbres vendrán de aquellos datos o términos que estén presentes en la ecuación 3.1. Más concretamente se observa que estos son:

- Secciones eficaces microscópicas (aparecen dentro de las secciones eficaces macroscópicas)
- Distribución energética y angular de los neutrones dispersados
- Número medio de neutrones emitidos por fisión (ν)
- Espectro de neutrones emitidos (χ)

Estos datos se proporcionan en las librerías de datos evaluadas. La figura 3.5 muestra el diagrama de actividades asociadas a los datos nucleares. La primera de ellas consiste en la producción de los datos nucleares, bien sea a partir de experimentos o bien por la aplicación de modelos teóricos en aquellos casos donde las mediciones experimentales no sean posibles. Toda la ingente información experimental se registra en una base de datos con formato EXFOR. Seguidamente viene una fase importantísima que es la evaluación de los datos obtenidos en la fase anterior. Los datos evaluados se producen tras un proceso de selección, análisis, comparación crítica y renormalización de los datos experimentales disponibles, complementados con los resultados de modelos nucleares. Los datos evaluados se almacenan de forma ordenada en las librerías evaluadas o librerías de datos nucleares (NDL) en un

Figura 3.5: Diagrama de fases de los datos nucleares

formato denominado ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Las librerías evaluadas pueden ser de propósito general o de propósito específico, como es el caso de la EAF, *European Activation File*.

La dificultad de evaluación de los datos nucleares, junto a los requerimientos de control, calidad y revisión exigidos dada su trascendencia, ha motivado que varias instituciones internacionales supervisen este trabajo. Así, el equipo JEFF (*Joint Evaluated Fission and Fusion File*) integrado dentro de la NEA, es responsable de la librería JEFF cuya última versión es la 3.2. La librería ENDF/B, de uso muy generalizado, es gestionada por el *Cross Section Evaluation Working Group* (CSEWG) del *National Nuclear Data Center* en Estados Unidos.

La siguiente actividad relacionada con los datos nucleares es el procesamiento, y se volverá sobre ella más adelante en el capítulo 6.

Volviendo de nuevo a las librerías evaluadas de datos nucleares, el formato ENDF-6 permite almacenar cualquier tipo de dato nuclear. Para ello se recurre a una estructura en diferentes niveles jerarquizados, codificados cada uno con un identificador, como se ilustra en la figura 3.6. El primer nivel consiste en el tipo de librería y viene dado por el identificador NLIB. NLIB=0 se corresponde con la librería ENDF/B mientras que NLIB=2 con la JEFF. El siguiente nivel conocido como sublibrería (NSUB) determina la partícula incidente, siendo NSUB=10 para el caso de neutrones y que aplica en nuestro caso. Seguidamente se debe seleccionar el material (MAT), que designa el nucleido blanco de la reacción. A continuación se hace una subdivisión para el material escogido en unidades denominadas archivos (MF) donde cada unidad contiene una determinada información. En la tabla 3.1 se detalla la información disponible en cada archivo. La última división se hace en secciones (MT), donde cada sección describe una reacción particular. En la tabla 3.2 se recogen las diferentes reacciones de las que hay datos. Información más detallada sobre el formato ENDF puede encontrarse en el manual [30], disponible de manera libre en internet.

Retomando los datos enumerados previamente que intervienen en la ecuación estacionaria de transporte se comprueba que de todos ellos hay datos tanto de valores nominales como de covarianzas. Para las secciones eficaces se ofrecen en el archivo MF=3 los valores nomi-

Figura 3.6: Estructura del formato tipo ENDF-6 para una sublibrería [30]

MF	Descripción
1	Información general
2	Parámetros de resonancia
3	Secciones eficaces
4	Distribución angular de partículas secundarias
5	Distribución energética de partículas secundarias
6	Distribución energía-ángulo de partículas secundarias
7	Datos de dispersion térmica
8	Decaimiento radiactivo y rendimientos de fisión
9	Multiplicidad para la producción de nucleidos radiactivos
12-15	Producción de radiación γ : sección eficaz, distribución angular, distribución energética
31-32	Covarianzas: ν y parámetros de resonancia
33-35	Covarianzas: secciones eficaces, distribución angular, distribución energética

Tabla 3.1: Definición de los distintos tipos de archivos (MF) en el formato ENDF

MT	reacción	Descripción
1	(n,total)	Sección eficaz total
2	(n,elas)	Dispersión elástica
4	(n,n')	Dispersión inelástica
16	(n,2n)	Producción de dos neutrones más un residual
17	(n,3n)	Producción de tres neutrones más un residual
18	(n,fisión)	Fisión
102	(n, γ)	Captura radiativa

Tabla 3.2: Definición de algunos tipos de reacción (MT) en el formato ENDF

nales para todas las reacciones y en MF=33 sus datos de covarianzas (que representan las incertidumbres). Los valores de distribución en energía y ángulo se dan en MF=6 y también hay datos de covarianzas en MF=34 y MF=35. Por último, para los parámetros ν y χ se tienen sus valores en MF=1, MT=452 y MF=5, MT=18 respectivamente, habiendo datos de covarianzas en MF=31.

La disponibilidad de los datos de covarianza es aún muy limitada en las NDL, y es un campo en continuo desarrollo. Un estatus de las matrices de covarianzas contenidas en las distintas librerías evaluadas puede encontrarse en [64]. Los archivos con datos de covarianza proporcionan no sólo la varianza estimada de cada dato individual, sino también las correlaciones que pudieran existir entre los distintos tipos de datos. Las correlaciones pueden darse entre grupos de energía (por la propia física), entre distintos tipos de reacción del mismo material (a veces se combinan dos reacciones para obtener otra) y entre distintos tipos de materiales (en ocasiones se determina una sección eficaz a partir de un ratio de ese mismo dato en un material estándar). En la figura 3.7 se ilustran las tres posibilidades de correlación mostrando tres matrices de covarianzas: correlación entre grupos de energía para un mismo isótopo y reacción (fisión del Pu^{239}), entre reacciones de un mismo isótopo (fisión y captura del Pu^{239}) y entre diferentes isótopos para una misma reacción (fisión del Pu^{239} y del U^{238}).

En esta tesis se emplearán diferentes versiones de librerías de covarianzas del sistema SCALE, concretamente las versiones 6.2 y 6.1. Las librerías de covarianzas de SCALE, junto con la JENDL-4.0, constituyen una de las compilaciones más completa y actualizada disponibles hasta el momento. Estas librerías están basadas en la utilización de diferentes aproximaciones sobre las incertidumbres con varios grados de fidelidad con respecto a los datos nucleares. De esta forma se tienen covarianzas de alta fidelidad (*high-fidelity*) donde los datos de covarianzas provienen de las librerías evaluadas ENDF/B-VII.0 y anteriores y la JENDL-3.3 para más de 50 nucleidos, incluyendo los más importante en el análisis de LWR como son por ejemplo U^{238} , U^{235} , Pu^{239} o el Am^{241} . Los datos de baja fidelidad provienen tanto de medidas experimentales como de la aplicación de modelos teóricos, enmarcado todo ello en un proyecto llevado a cabo entre las instituciones BNL, LANL y ORNL [90]. La versión de SCALE6.1, y anteriores como la 6.0, proporciona datos de incertidumbre para un total de 401 nucleidos en la forma de matrices de covarianzas para secciones eficaces

3.2. Fuentes de incertidumbre en cálculos neutrónicos

Figura 3.7: Ejemplos de distintas matrices de covarianzas en 56 grupos de energía

y parámetros $\bar{\nu}$ (denominado nu-bar) y χ , así como datos de covarianzas entre reacciones de diferentes isótopos. La estructura energética es en 44 grupos. La versión 6.2, recientemente liberada, emplea estructuras en 56 y 252 grupos de energía y amplía hasta 187 el número de isótopos con datos de alta fidelidad tomados de la ENDF/B-VII.1, donde han sido modificados parámetros tan significativos como $\bar{\nu}$ para el U^{235} y el Pu^{239} .

Se comprueba por tanto que de todos los datos involucrados en la ecuación de transporte estacionaria hay información que permitiría un análisis de sensibilidad e incertidumbre. Hasta el momento, y por su complejidad, la propagación de incertidumbres en las distribuciones energéticas y angulares de las secciones eficaces ha recibido menos atención.

Si en lugar de considerar la ecuación de transporte estacionaria se considerara la ecuación con dependencia temporal (para análisis cinéticos) habría que añadir a los anteriormente mencionados los siguientes datos nucleares:

- Constantes de desintegración de los precursores
- Número de neutrones diferidos
- Espectro de los neutrones diferidos

Por último, aunque no es de aplicación en esta tesis, conviene anotar que si hubiera acoplamiento entre transporte e inventario intervendrían nuevos datos, que son los presentes en la ecuación de inventario isotópico:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j=1}^M \left(\lambda_{j \rightarrow i} + \int_E \sigma_{abs,j \rightarrow i}(E) \phi(E) dE \right) N_j - \left(\lambda_i + \int_E \sigma_{abs,i}(E) \phi(E) dE \right) N_i \quad (3.2)$$

Se observa que los datos nucleares involucrados son:

- Constantes de desintegración
- Secciones eficaces microscópicas
- Rendimientos de fisión (implícitos en las secciones eficaces de producción de un isótopo i a partir de un isótopo j , si j sufre fisión)

3.2.2. Incertidumbres tecnológicas

Bajo la categoría de incertidumbres tecnológicas se agrupan todas aquéllas que tienen su origen en el proceso industrial de construcción y manufactura de los distintos elementos que forman el reactor y se modelizan en los cálculos de simulación. En todo proceso industrial de fabricación en serie se establecen unos márgenes de tolerancia para diferentes magnitudes del producto que se fabrica, que definen el intervalo de valores en el que debe encontrarse dicha magnitud para que se acepte como válida. Ello determina la aceptación o el rechazo de los componentes fabricados. El propósito de los intervalos de tolerancia es el de admitir

un margen para las imperfecciones en la manufactura de componente, ya que se considera imposible la precisión absoluta desde el punto de vista técnico.

Para el caso del combustible nuclear las variables geométricas que se considera que pueden tener tolerancias son el radio de la pastilla de combustible y el espesor del huelgo y de la vaina fundamentalmente; las variables ligadas a la isotopía son la densidad de la pastilla y su enriquecimiento. Se considera que todas estas variables se ajustan a una PDF, y de acuerdo con [95] se puede asumir que las dimensiones de la pastilla, su densidad y composición isotópica inicial siguen una distribución normal.

3.2.3. Métodos y modelos

En toda simulación computacional se pueden distinguir tres fuentes de error en los resultados finales del cálculo. Éstas son:

- La incertidumbre en los parámetros de entrada, que en nuestro caso se han detallado en los dos apartados anteriores.
- El modelo, que está asociado a la bondad de la precisión con la que se han descrito las características de la realidad que se simula: geometría, dimensiones, composiciones...
- El método, que se entiende como la combinación del conjunto de ecuaciones que rigen el fenómeno (con las hipótesis y simplificaciones que se asuman) y las técnicas de resolución empleadas para obtener los resultados.

La definición de error, como se comentó anteriormente, implica la existencia de un valor verdadero, y se obtiene como la diferencia entre el resultado obtenido y ese valor verdadero. Por ello, los errores que se introducen debido a las dos últimas causas pueden estimarse por comparación con modelos cada vez más precisos y métodos de mayor orden. En el caso de la neutrónica el método de Monte Carlo en energía continua se puede considerar como casi libre de estas fuentes de error a excepción del estocástico, que puede reducirse a niveles despreciables aumentando el número de historias. Sin embargo, muchas veces no se dispone de un resultado que sirva de referencia por lo que se desconoce el error que se introduce por estas causas. En ese caso, el desconocimiento del error hace que éste se puede tratar como una incertidumbre, motivo por el cual se incluye la categoría métodos y modelos en este caso como una fuente de incertidumbre.

3.3. Metodologías para la propagación de incertidumbres en cálculos neutrónicos

Una vez caracterizadas las fuentes de incertidumbre, se hace necesario conocer los métodos para su propagación, con el fin de cuantificar las incertidumbres en los resultados neutrónicos de interés. Los estudios de cuantificación de incertidumbres, más conocidos por sus siglas en inglés UQ, tratan de determinar cómo de ciertos o fiables son los resultados si ciertos

aspectos del sistema no se conocen exactamente. En otras palabras, un análisis UQ evalúa cómo las incertidumbres en los parámetros de *input* de un modelo o problema afecta al *output*, y además trata de cuantificar las incertidumbres en el propio *output*.

En [37] se hace una excelente revisión de las metodologías para la propagación de incertidumbres de los datos nucleares. De entre ellas, destacan para su aplicación en cálculos de núcleo completo:

- Teoría de perturbaciones de primer orden (también conocida como propagación de momentos). A partir de los coeficientes de sensibilidad de la variable respuesta con respecto a determinados parámetros del sistema, y de los datos de incertidumbre en esos parámetros, se pueden estimar las incertidumbres en la respuesta.
- Metodología basada en muestreo (*sampling-based*), que considera los parámetros del sistema que tienen incertidumbre como variables aleatorias. Posteriormente, tras seleccionar las PDF de esas variables, éstas son muestreadas de acuerdo a sus datos referentes a la incertidumbre. Se aplican entonces al modelo del sistema obteniendo respuestas aleatorias. Las incertidumbres en estas respuestas del sistema se estiman con un análisis estadístico.

Ambas metodologías son ampliamente utilizadas para llevar a cabo estudios de UQ de incertidumbres de datos nucleares. Otras metodologías novedosas se están empezando a aplicar también, como las basadas en la *polynomial chaos expansion* donde las magnitudes aleatorias se representan por un desarrollo en serie de funciones de las variables aleatorias multiplicadas por coeficientes deterministas [34].

3.3.1. Teoría de perturbaciones de primer orden

Se trata de una metodología determinista que calcula las sensibilidades de los resultados o respuestas del sistema y posteriormente las utiliza para propagar las incertidumbres desde los parámetros de entrada en las ecuaciones mediante una expresión que coloquialmente se conoce como la regla del sándwich.

Los análisis de sensibilidad estudian la variación de las respuestas del sistema ante perturbaciones que se producen en los parámetros del sistema. Con los coeficientes de sensibilidad y las incertidumbres en los mismos parámetros, dados como matrices de covarianzas, las incertidumbres en la respuesta se pueden calcular. Las ecuaciones que rigen esta teoría se desarrollan a continuación.

Siguiendo la notación de [16], los resultados de los cálculos los llamaremos respuestas R , y sus valores dependerán de determinados parámetros del sistema α_i ; por lo que se verifica $R = f(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)$. Estos parámetros vienen representados por una función de distribución normal con valor medio α_i^0 y con una desviación estándar $\delta\alpha_i$, por lo que se puede representar el vector de parámetros como:

$$(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k) = (\alpha_1^0, \alpha_2^0, \dots, \alpha_k^0) + (\delta\alpha_1, \delta\alpha_2, \dots, \delta\alpha_k) = \alpha^0 + \delta\alpha \quad (3.3)$$

Si se desarrolla en serie de Taylor la respuesta en torno al valor medio de los parámetros, y se trunca el desarrollo en la primera derivada, es decir, suponemos que la respuesta sigue un comportamiento lineal con cada uno de los parámetros, se puede expresar:

$$R(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = R(\alpha_1^0 + \delta\alpha_1, \dots, \alpha_k^0 + \delta\alpha_k) = R(\alpha_1^0, \dots, \alpha_k^0) + \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial R}{\partial \alpha_i} \right)_{\alpha^0} \delta\alpha_i \quad (3.4)$$

$$R(\alpha_1, \dots, \alpha_k) = R^0 + \sum_{i=1}^k S_i \delta\alpha_i \quad (3.5)$$

A las derivadas de la respuesta con respecto a cada uno de los parámetros se las denomina sensibilidades S_i , y R^0 es el valor de la respuesta cuando todos los parámetros toman su valor nominal.

Por otro lado, empleando la ecuación 3.5 se puede obtener la varianza de la respuesta que viene dada por:

$$var(R) = \sum_{i=1}^k S_i^2 var(\alpha_i) + 2 \sum_{i \neq j=1}^k S_i S_j covar(\alpha_i, \alpha_j) = \mathbf{S} \mathbf{V}_\alpha \mathbf{S}^T \quad (3.6)$$

Donde $\mathbf{V}_\alpha$ es la matriz de covarianzas de los parámetros, y $\mathbf{S}$ es el vector columna de sensibilidades. La ecuación 3.6 se conoce como la “regla del sándwich”, que permite la propagación de los errores en los parámetros hacia la respuesta en forma de varianza, conocidos los coeficientes de sensibilidad de la respuesta con cada uno de ellos [12]. Existen diferentes metodologías para calcular los coeficientes de sensibilidad, siendo las más utilizadas las metodologías FSAP (*Forward Sensitivity Analysis Procedure*) y ASAP (*Adjoint Sensitivity Analysis Procedure*), ambas analizadas en [16]. El método ASAP es el más eficiente para determinar las sensibilidades en sistemas donde el número de parámetros excede al número de respuestas, como suele ocurrir en los cálculos neutrónicos. Cabría mencionar también la técnica del operador diferencial, implementada por ejemplo en MCNP5 [41], aunque la complejidad del método, especialmente al calcular las sensibilidades a las secciones eficaces de dispersión, ha hecho que en MCNP6 se haya optado por la metodología ASAP. También ésta es la metodología implementada para análisis de sensibilidad e incertidumbre en el módulo TSUNAMI dentro del sistema de códigos SCALE.

Igualmente, la metodología ASAP está implementada en el código COBAYA [53] y se utiliza para el cálculo de coeficientes de sensibilidad de la constante k-efectiva (respuesta) respecto a las secciones eficaces homogeneizadas (parámetros), como se verá en el capítulo 10.

Esta aproximación tiene ciertas limitaciones, debidas fundamentalmente a la aproximación lineal aplicada. Si las variaciones de los parámetros son demasiado grandes o la función respuesta no es lineal entonces la respuesta del sistema perturbado obtenida mediante sensibilidad difiere del valor real que se obtendría aplicando los parámetros perturbados. La figura 3.8 ilustra este hecho.

Figura 3.8: Diferencias entre la incertidumbre real y la calculada empleando una aproximación de primer orden

3.3.2. Metodología basada en muestreo

Se trata de una metodología estocástica, también llamada de Monte Carlo, donde los parámetros del sistema son tratados como variables aleatorias y se muestrean empleando los valores de la media y las matrices de covarianza de acuerdo a su PDF. Después, los valores aleatorios obtenidos se introducen en el modelo matemático o el código computacional que determinará las funciones respuesta para esa combinación de valores en los parámetros. De esta manera las incertidumbres se propagan a las respuestas debido a la variación de los parámetros del sistema.

Cada muestra de los parámetros adquiere nuevos valores para los cuales se determinan las respuestas. Cada vez que se lleva a cabo este paso se obtiene un nuevo resultado (historia). Cuando se alcanza un número suficientemente elevado de historias, se puede realizar un análisis estadístico con las historias obtenidas, y el efecto de las incertidumbres en las funciones respuesta puede ser, por tanto, analizado. La figura 3.9 representa el esquema de este proceso.

Para saber si es necesario aumentar el número de historias, se lleva a cabo un estudio de los diferentes momentos estadísticos de la función respuesta, analizando la convergencia de estos valores. La media y la desviación típica (momentos de primer y segundo orden, respectivamente) son los más habituales en estos análisis, aunque también es frecuente determinar la asimetría y curtosis (momentos de tercer y cuarto orden, respectivamente) para identificar la forma en que se agrupan los datos, es decir, las características de la distribución sin necesidad de su representación gráfica.

Esta técnica permite estudiar parcialmente el efecto individual de cada parámetro, su importancia y su contribución en la incertidumbre total en la respuesta así como la posible correlación entre parámetros, constituyendo una de las grandes ventajas frente al método

Figura 3.9: Esquema de la metodología basada en muestreo

determinista. Esto se consigue muestreando uno a uno los parámetros a estudiar y posteriormente realizando un estudio estadístico de las funciones respuesta deseadas. Esto es equivalente a la aproximación de primer orden donde los coeficientes de sensibilidad se calculan de modo similar, obviando ahora en cambio la limitación de la aproximación lineal.

La aplicación de esta metodología en esta tesis, concretamente para la propagación de incertidumbres a cálculos de núcleo completo, se ha llevado a cabo gracias a la secuencia SAMPLER de SCALE, incorporada en la versión 6.2 que incluye el paquete XSUSA [134, 135, 138]. Este sistema muestrea las secciones eficaces microscópicas de forma que se obtienen N conjuntos de librerías de secciones eficaces para ser empleadas en N cálculos de transporte y obtener así N conjuntos de secciones eficaces homogeneizadas.

A la hora del muestreo juega un papel determinante la matriz de covarianzas. Las incertidumbres de las secciones eficaces están correlacionadas y el grado de correlación entre ellas está recogido en la matriz de covarianzas. Las secciones eficaces deben ser perturbadas pero manteniendo siempre la relación de correlación entre ellas.

De acuerdo con [9] para generar un vector de secciones eficaces perturbadas $\bar{X}'$ sólo se requiere una descomposición de Cholesky de la matriz de covarianzas junto con un vector normal aleatorio. Osea, si $\bar{X}$ es un vector con los valores medios cuyas relaciones de covarianza están definidas por la matriz $\bar{\Sigma}$, entonces el vector $\bar{X}'$ con los valores perturbados y correlacionados se obtiene aplicando

$$\bar{X}' = \bar{X} + \bar{A}^T \bar{Z} \quad (3.7)$$

En 3.7 el operador $\bar{A}^T$ es la matriz triangular superior derecha obtenida por la descomposición de Cholesky de la matriz de covarianzas. Toda matriz de covarianzas es hermítica y definida positiva por lo que toda matriz de covarianzas tiene una descomposición de Cholesky de la forma

$$\bar{\Sigma} = \bar{A}^T \bar{A} \quad (3.8)$$

El vector $\bar{Z}$ en 3.7 es un vector cuyas componentes son valores aleatorios que siguen una normal (de ahí la expresión vector normal aleatorio). Cuando $\bar{A}^T$ multiplica a $\bar{Z}$ se obtienen combinaciones lineales de las incertidumbres en concordancia con sus relaciones de covarianza, por lo que $\bar{X}'$ se distribuye como una normal con covarianzas $\bar{\Sigma}$.

La desventaja de esta metodología es la elevada carga computacional que conlleva, especialmente en el caso de cálculos de núcleo completo donde intervienen gran variedad de elementos combustibles para los que hay que generar individualmente el conjunto de secciones eficaces homogeneizadas; si bien es cierto que el proceso es fácilmente paralelizable.

En la actualidad esta metodología está muy extendida y se han desarrollado gran variedad de herramientas y métodos para diferentes aplicaciones. Ejemplos de ello, además del mencionado XSUSA, son NUDUNA [14], que lee directamente la librería en el formato ENDF-6 y lleva a cabo un muestreo de los datos nucleares; o Total Monte Carlo [80], cuyo objetivo es propagar las consecuencias de las incertidumbres presentes en los modelos de la física nuclear fundamental al extremo final como es el diseño de reactores, sin perder nada de información entre medias. Por otro lado, en [47] se propone un método para llevar a cabo una propagación de incertidumbres en cálculos de quemado mientras que en [15] se propagan para evaluar su impacto en un ciclo de operación de un PWR.

También es posible para propagar las incertidumbres en simuladores de núcleo (basados en los dos pasos de la aproximación estándar: cálculos de transporte para determinar las secciones eficaces homogeneizadas seguidos de cálculos de difusión de núcleo completo), utilizar una combinación de las dos metodologías previamente mencionadas, la determinista y la de Monte Carlo. Una revisión de estos esquemas se presenta en [19], así como la aplicación de una metodología muestreo+determinista para propagar las incertidumbres a las secciones eficaces homogeneizadas y al núcleo respectivamente. Al contrario, en [136] se aplica una metodología determinista+muestreo.

Capítulo 4

Descripción de códigos utilizados

El objetivo de este capítulo es presentar una descripción de los códigos que se han utilizado durante el desarrollo de la tesis. Los códigos *lattice* son los que han sido empleados para la generación de librerías de secciones eficaces mientras que el código COBAYA4 ha sido utilizado para cálculos de difusión a escala de núcleo completo para llevar a cabo cálculos de comprobación o análisis de transitorios.

De entre los primeros, los códigos *lattice*, se van a mencionar el código APOLLO2.8 por su aplicación dentro del proyecto NURESAFE, y el sistema SCALE, con varias versiones, que es el que realmente se ha utilizado para la generación de librerías que incluyan incertidumbres. SCALE es un sistema o plataforma de códigos, desarrollado en el Laboratorio Nacional de Oak Ridge (ORNL), en Estados Unidos, ampliamente utilizado a nivel mundial para diversas aplicaciones del ámbito nuclear. Está compuesto por una serie de códigos particularizados para un tipo concreto de cálculos: evolución isotópica, cálculos de autoblindaje, cálculos de transporte deterministas, cálculos de Monte Carlo, cálculos de sensibilidad e incertidumbres, etc. A su vez existen secuencias encargadas de ejecutar diferentes códigos de manera consecutiva, como puede ser por ejemplo un cálculo de *self-shielding* seguido de un cálculo de transporte.

Por otra parte, el código de difusión COBAYA4 constituye la evolución del código COBAYA3, cuyos solvers ANDES y COBAYA3k (nodal y *pin-by-pin* respectivamente) fueron desarrollados como parte del subproyecto de física del núcleo del proyecto europeo NURESIM [17] dentro de la tarea 1.2.3. COBAYA4 mantiene ambas escalas espaciales si bien es cierto que la estructura del código fuente ha sido completamente modificada y reordenada en la que la nomenclatura de dichos *solvers* ha desaparecido. También permite la posibilidad de acoplamiento con el código termohidráulico COBRA-TF dentro de la plataforma informática SALOME-VI.

4.1. APOLLO2

El código APOLLO2, desarrollado por el CEA, forma parte del sistema SAPHYR (Advanced System for Reactor Physics) dedicado al cálculo y diseño de reactores. Este sistema está

compuesto por tres códigos principales:

- APOLLO2 para cálculos *lattices* 2D
- CRONOS2 para cálculos de núcleo completo 3D
- FLICA4 para cálculos 3D termo-hidráulicos

El sistema de códigos SAPHYR se ha usado para el cálculo de varios tipos de reactores, desde reactores PWR y BWR a reactores tipo VVER. Utiliza un lenguaje de programación propio, denominado GIBIANE, y está basado en una estructura modular. El uso de APOLLO2 está muy extendido para la generación de secciones eficaces homogeneizadas y cálculos de transporte. Entre sus aplicaciones, además de para física de reactores, destacan los estudios de criticidad y análisis del ciclo de combustible. Asimismo, el código es empleado en la industria nuclear, sobre todo en la francesa. APOLLO2 está integrado en el sistema ARCADIA de AREVA [31] para generar las secciones eficaces de elementos PWR y BWR, y se utiliza también en la compañía Electricité de France (EDF) como parte de la cadena de cálculo de reactores [112].

La versión actual del código (APOLLO2.8) utiliza la librería externa de datos nucleares APOLIB (en formato propio) basada principalmente en la librería evaluada JEFF-3.1.1 y procesada con NJOY. Los métodos de resolución de la ecuación de transporte que permite APOLLO2.8 son el de probabilidades de colisión y el método de las características, constando el esquema de cálculo idóneo de dos pasos: inicialmente un cálculo por probabilidades de colisión con una estructura de 281 grupos de energía seguido de un colapsamiento a una estructura con menor número de grupos (37, 51 o 70) y un cálculo por el método MOC. Como se vio en al hablar de los métodos de resolución, el método de probabilidades de colisión o P_{ij} se trata de un cálculo rápido pero menos preciso, mientras que el método MOC es notablemente más exacto pero también emplea más tiempo de ejecución. El resultado de emplear este esquema de dos pasos es la obtención de un cálculo en el que el compromiso entre precisión y consumo de tiempo es muy bueno, frente a un cálculo de referencia MOC y en 281 grupos de energía que requiere mayores tiempos de ejecución [77].

El código, escrito en FORTRAN 77, está compuesto por un número de módulos independientes donde cada uno de ellos lleva a cabo una tarea específica (construcción de la geometría, cálculo del *self-shielding*, realización de una iteración externa, obtención de las matrices de colisión, etc.). Todos los datos procesados por los módulos, sean *input* o *output*, se organizan en unas estructuras pensadas como objetos identificadas con nombres elegidos por el usuario. Por ejemplo, la geometría, librería isotópica, matrices, flujos, etc. se almacenan en estos objetos. De esta forma, el usuario puede valerse del lenguaje GIBIANE para definir sus propias cadenas de cálculos como una llamada secuencial a los módulos donde los outputs de los módulos previos se usan como el input del módulo siguiente. Módulos y objetos son los dos tipos de componentes que constituyen APOLLO2 y le dotan de la modularidad.

Esta modularidad y la posible combinación de módulos para efectuar los cálculo de acuerdos a las pretensiones del usuario hacen que no haya un diagrama de flujo general. Sin embargo, por su naturaleza de código de transporte requiere una secuencia de operaciones que no son

intercambiables. La figura 4.1 muestra el diagrama de flujo general para los cálculos *lattice* tomado de [60]. Se aprecia que tras el acceso a la librería de datos nucleares se tienen los valores de las secciones eficaces microscópicas en condiciones de dilución infinita, motivo por el cual hay que hacer el autoblandaje de las resonancias. Este cálculo, para el cual hace falta la definición previa de la geometría, constituye el primer nivel de cálculo del esquema mencionado anteriormente. El método de resolución del autoblandaje de resonancias empleado en APOLLO2.8 es un método novedoso denominado *Resonant Mixture* que puede consultarse en [28].

Seguidamente, con las secciones eficaces dependientes del problema tiene lugar el cálculo del flujo neutrónico, que es el paso donde mayor consumo de tiempo requiere el código. Este cálculo constituye el segundo nivel del esquema, y computa el flujo neutrónico mediante el método MOC. A su vez, este método permite el empleo de dos métodos numéricos diferentes, denominados *step* y *linear surface*. El primero de ellos requiere una definición geométrica más refinada, donde la configuración esté dividida en mayor número de regiones (anillos concéntricos en la pastilla y *windmills*) para poder aplicar con bondad el *tracking*. La aproximación *linear surface* permite definir geometrías más simples y un *tracking* con parámetros más amplios de forma que se acelera el cálculo. En esta aproximación los momentos angulares del flujo se interpolan linealmente sobre cada trayectoria [108].

Concluido el cálculo de transporte se procede con la homogeneización espacial y la condensación energética obteniéndose las secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas, que como ya se ha comentado constituyen los datos de entrada para los cálculos del reactor. El procedimiento de homogeneización se lleva a cabo manteniendo las tasas de reacción. En el caso de APOLLO2 las secciones eficaces se guardan en ficheros binarios con formato hdf que deben ser procesados por una herramienta desarrollada para tal fin denominada SAPHYB-BROWSER [58].

4.2. SCALE

SCALE (*Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation*) [86, 104] es una plataforma de códigos desarrollada en el Laboratorio Nacional de Oak Ridge (ORNL) en Estados Unidos. Incluye un conjunto de códigos y herramientas para la modelización y simulación de sistemas nucleares. A día de hoy constituye una de las herramientas de simulación más utilizadas para multitud de aplicaciones, entre las que destaca física de reactores, combustible gastado, transporte de radiación, análisis S/U, etc. Está compuesta por varios códigos diferentes estando cada uno de ellos particularizado para un tipo de cálculo. De esta forma se encuentran herramientas tales como ORIGEN-ARP para cálculos de evolución isotópica, BONAMI, CENTRM y PMC para cálculos de autoblandaje, NEWT para cálculos 2D de transporte, TSUNAMI para el análisis de sensibilidad o KENO-3D para cálculos de Monte-Carlo. Una de las grandes ventajas del sistema SCALE es la facilidad de acoplamiento entre códigos.

Los códigos de SCALE se clasifican en módulos funcionales, módulos de control o secuencias y utilidades. Los módulos funcionales incluyen los códigos de física básicos como XSDRNPM (ordenadas discretas en 1-D), KENO, NEWT, ORIGEN y muchos otros códigos aplicables

Figura 4.1: Diagrama de flujo para los cálculos *lattice*

Figura 4.2: Esquema de la secuencia TRITON de SCALE [86]

a criticidad, blindaje, quemado y transporte de radiación.

Los módulos de control actúan como controladores de secuencia, preparando el input para los módulos funcionales y concatenando cálculos entre ellos. Un ejemplo fácil de entender se ilustra en la figura 4.2 que se corresponde con la secuencia denominada TRITON (*Transport Rigor Implemented with Time-dependent Operation for Neutronic depletion*). NEWT, como se ha dicho ya, es el código de transporte determinista de ordenadas discretas en 2D y podría ejecutarse directamente *stand-alone* si las secciones eficaces estuviesen preparadas adecuadamente. Como ya es sabido, resulta indispensable hacer previamente el procesamiento de aquéllas para tener en cuenta el autoblandaje de las resonancias. Esta tarea es realizada por los módulos funcionales BONAMI (para las resonancias no resueltas) y NITAWL o CENTRM/PMC (para las resonancias en rango resuelto). TRITON es el controlador que va llamando para ejecutar secuencialmente cada uno de los módulos: los primeros para el procesamiento de secciones eficaces y el segundo el cálculo de transporte propiamente con NEWT.

La versión 6.2 de SCALE incorpora nuevas librerías de datos nucleares basadas en la librería ENDF/B-VII.1 a las ya existentes en la versión 6.1 basadas en la ENDF/B-VII.0. En la versión 6.1 destacaba la librería en 238 grupos de energía (xn238v7.0) y una matriz de covarianzas en 44. En la nueva versión hay dos librerías con nuevas estructuras: la librería xn56v7.1 en la que tanto la librería como la matriz de covarianzas están en 56 grupos de energía, y la librería xn252v7.1 donde también están tanto librería como matriz de covarianzas en 252 grupos. Respecto a las librerías en energía continua se incorpora a la librería ce_v7 de la ENDF/B-VII.0 la ce_v7.1_endf basada en la nueva ENDF. Por otra parte, el código encargado del procesamiento de las librerías ENDF para SCALE es el código AMPX [131].

A continuación se irán desarrollando brevemente en los siguientes apartados cada uno de los módulos/códigos/secuencias más utilizados en el trabajo de esta tesis. Comenzaremos

por el módulo XSProc que es el encargado de llevar a cabo el cálculo de autoblandaje o *self-shielding*, posteriormente y en este orden se tratarán el código NEWT, la secuencia SAMPLER, la secuencia TSUNAMI y por último el código KENO.

4.2.1. XSProc

El módulo de control XSProc se incluye como tal por primera vez en la versión 6.2 y agrupa todos los códigos encargados de llevar a cabo la preparación de las secciones eficaces para los cálculos en multigrupos. Esta preparación consiste fundamentalmente en la corrección de la temperatura y el autoblandaje de las resonancias. El proceso del autoblandaje es un proceso complejo en sí mismo y no se tratará en profundidad, sino que lo que se pretende es ilustrar el procedimiento.

SCALE incluye librerías en energía continua (puntuales) y en multigrupos, habiendo varias estructuras posibles para éstas últimas. El procesamiento con AMPX convierte los datos evaluados de la librería ENDF en secciones eficaces en energía continua que posteriormente son promediadas para obtener la librería en multigrupos independiente del problema a 300K. Este promediado se hace pesando las secciones eficaces con un espectro genérico de energía, que considera una maxwelliana en la zona térmica, $1/E$ en la zona de resonancias y el espectro de fisión en la zona rápida. Tras el procesamiento con AMPX la librería continua no requiere más modificaciones, a excepción de una posible interpolación en temperatura. Sin embargo, en los cálculos en multigrupos las tasas de reacción dependen significativamente de la distribución energética del flujo específica del problema. Esto implica que los datos en multigrupos de la librería independiente del problema (de ahí el nombre) deben ser modificados a unos valores coherentes con el espectro del flujo real del problema, en lugar de el espectro genérico que se utilizó. La distribución energética del flujo neutrónico es especialmente sensible a las concentraciones y a la disposición heterogénea de los absorbentes por resonancias, ya que pueden reducir enormemente el flujo en el valor del pico de la resonancia de un nucleido, reduciendo con ello las tasas de reacción. Ese es el motivo por el cual un cálculo con las secciones eficaces en dilución infinita resultaría una constante k -efectiva mucho menor de la real, donde no todos los nucleidos absorberían todos los neutrones en las resonancias al no estar rodeados de moderador sino de otros nucleidos que también son absorbentes.

En [133] se ofrece una descripción general de los métodos para llevar a cabo el autoblandaje de resonancias. En cálculos neutrónicos en SCALE el cálculo de autoblandaje consta de dos etapas. Primeramente, los valores genéricos de las secciones eficaces en dilución infinita se corrigen aplicando el método de Bondarenko, lo cual se hace con el módulo BONAMI. Para ello se utilizan unos factores f que vienen incluidos en la propia librería en multigrupos. Después, se lleva a cabo un cálculo de transporte, que puede ser unidimensional o incluso bidimensional con un solver MOC, con el código CENTRM y que utiliza las secciones eficaces en energía continua (librería puntual) en el rango de energía de 0 a 20 keV, que abarca todo el rango de resonancias resueltas en todos los actínidos. Los datos puntuales de secciones eficaces están tabulados en una estructura energética ultra-fina (aproximadamente 200000 puntos para el uranio-238) por lo que las resonancias resueltas están representadas de manera muy precisa. El flujo calculado, que en analogía con las secciones eficaces se

Figura 4.3: Esquema de cálculo del autoblindaje de resonancias en SCALE [86]

considera puntual, se utiliza para pesar en el código PMC la librería en multigrupos que había ejecutado BONAMI. Los valores de secciones eficaces autoblindados calculados por CENTRM/PMC reemplazan los valores de BONAMI en el rango resuelto mientras que los valores computados por BONAMI en la zona rápida y de resonancias no resueltas se mantienen. De esta forma ya se dispone de una librería de secciones eficaces en multigrupos dependiente del problema.

En las figuras 4.3 y 4.4 se recoge de manera esquemática la secuencia explicada para el *self-shielding* en SCALE. A la hora de definir en el input la celda unidad existen varias opciones que pueden introducir alguna variación en el cálculo.

4.2.2. NEWT

El código NEWT (*New ESC-based Weighting Transport code*) es el código de transporte bidimensional que resuelve las ecuaciones mediante el método de ordenadas discretas. Está basado en el planteamiento ESC (Extended Step Characteristic) para la discretización espacial de cualquier estructura mallada. Este esquema particular permite un mallado computacional basado en polígonos. Este mallado se puede usar para aproximar curvas o superficies irregulares con el fin de modelizar problemas que son formalmente difíciles o poco prácticos de modelizar directamente con los métodos de ordenadas discretas. Las principales características del método ESC son dos: primero, que en el interior de cada celda del mallado (celda computacional) todas las propiedades, por ejemplo, secciones eficaces son uniformes; y segundo, que las fronteras de una celda están definidas por líneas rectas, que constituyen los polígonos mencionados anteriormente.

En la figura 4.5 se puede observar la modelización para un cuarto de *pin-cell* viendo como el

Figura 4.4: Detalle del esquema de cálculo de autoblindaje de resonancias entre los códigos CENTRM y PMC [86]

Figura 4.5: Modelización de NEWT para un cuarto de *pin-cell* con un mallado de 4x4

contorno de las superficies es poligonal. Sobre esto no hay ningún tipo de restricción sobre la forma del polígono envolvente o el número de caras que pueda tener, aunque como es obvio el número siempre está limitado y nunca alcanzará a ser una curva. Sobre el primer aspecto, se puede comentar que es una pobre aproximación cuando el volumen de la celda es muy grande. Aunque las secciones eficaces son propiedades del material y permanecen constantes en el espacio, el término fuente, que depende del flujo neutrónico, variará con la posición. No obstante, ya que la solución sería exacta en una celda infinitesimal, es de esperar que la aproximación será razonable para celdas computacionales en las que el cambio del flujo (y por tanto del término fuente) es pequeño sobre el dominio de la celda.

El planteamiento ESC fue desarrollado con objeto de obtener una solución mediante el método de ordenadas discretas en geometrías complicadas en las que otros métodos proveen soluciones menos satisfactorias. Las soluciones deterministas a la ecuación de transporte neutrónico generalmente calculan una solución en términos del flujo de partículas, que es el producto de la densidad de partículas por la velocidad, y es una magnitud muy útil para determinar la tasa de reacción, que caracteriza a los sistemas nucleares. Los métodos 2-D de ordenadas discretas trabajan con cálculos que proporcionan cuatro flujos promedio en las caras y un flujo promedio de la celda para cada celda en un problema de mallado regular. Empleando el método ESC se determinan flujos promedio en cada cara de los polígonos del dominio del problema y se usan para determinar el flujo medio de la celda. Este proceso se repite para cada celda del problema, y al igual que en los métodos tradicionales se lleva a cabo una iteración hasta alcanzar una convergencia. Esta flexibilidad geométrica es una mejora sustancial frente a los códigos actuales que proporciona la capacidad de modelar problemas que son muy difíciles o imposibles de modelar directamente.

Más información sobre el método ESC y su implementación en el código NEWT puede encontrarse en el manual del código [33] o en la página web de SCALE.

4.2.3. SAMPLER

Se trata de una herramienta fundamental de SCALE que permite el análisis de incertidumbres por la metodología estocástica o de muestreo. SAMPLER es una secuencia que integra la herramienta XSUSA, desarrollada por el centro GRS, y lleva a cabo un muestreo de las PDF de las secciones eficaces, teniendo en cuenta los datos de covarianzas incluidos en la librería. Ello permite obtener un número determinado de muestras aleatorias de conjuntos de secciones eficaces utilizadas directamente en los cálculos de transporte. De esta forma, se realizan diferentes ejecuciones con NEWT, pero cada una de ellas con unos datos de partida diferentes. Posteriormente, los *outputs* que incluyen los resultados son tratados para obtener valores medios, desviaciones típicas y correlaciones para las respuestas deseadas.

SAMPLER permite no sólo el muestreo de las secciones eficaces, para lo cual se utiliza XSUSA. Si están disponibles las PDF de otros parámetros, por ejemplo datos para cálculos de quemado (rendimientos de fisión, constantes de desintegración, ...) u otros parámetros del sistema (dimensiones, temperaturas, densidades, enriquecimientos, ...); éstos se pueden muestrear e incluirlos en un vector de datos perturbados. Este vector se puede utilizar como *input* de cualquier secuencia o módulo de SCALE.

En principio SAMPLER puede llevar a cabo análisis de incertidumbre para todos los datos *input* mencionados previamente, siempre y cuando se conozcan datos de su PDF y covarianzas. La mayor restricción se produce en los datos nucleares en energía continua, esto es, secciones eficaces en energía continua para cálculos de Monte Carlo que no se pueden muestrear, por lo que las aplicaciones se restringen a cálculos en multi-grupos. Las perturbaciones a variables tecnológicas no se ven afectados por esta limitación.

Centrándonos en las perturbaciones de los datos nucleares para cálculos en multigrupos, recuérdese que las librerías en multigrupos procesadas con AMPX contiene los valores de secciones eficaces en dilución infinita así como los factores de Bondarenko para varias reacciones, necesarios para el cálculo de autoblandaje. Ambos datos se muestrean en SAMPLER. Las matrices o distribuciones bidimensionales de la dispersión no pueden serlo por la falta de datos de covarianzas, aunque sí son renormalizadas para ser consistentes con los valores perturbados 1D de la sección eficaz de dispersión.

El módulo MEDUSA de XSUSA es el encargado de perturbar las secciones eficaces en la librería en multigrupos, asumiendo que se distribuyen según una PDF normal con covarianzas las incluidas en la propia librería de SCALE, que vienen dadas en valor relativo. Lo hace definiendo un factor, factor de perturbación $Q_{x,g}$, por el que se verán multiplicados los valores de referencia para obtener los valores alterados:

$$\sigma'_{x,g} = Q_{x,g} \sigma_{x,g} \quad (4.1)$$

donde

$$Q_{x,g} = 1 + \frac{\Delta\sigma_{x,g}(\infty)}{\sigma_{x,g}(\infty)} \quad (4.2)$$

El subíndice x denota reacción, g grupo de energía y $\Delta\sigma_{x,g}(\infty)$ representa una perturbación aleatoria de una sección eficaz, dado su valor en dilución infinita $\sigma_{x,g}(\infty)$. Los factores de perturbación para todos los datos son pre-procesados y almacenados en un fichero de datos. De esta forma el muestreo de datos por parte de XSUSA se realiza sólo una vez. La librería perturbada cuenta actualmente con 1000 valores aleatorios para cada dato de la librería en multigrupos en dilución infinita. Estos factores multiplicativos se utilizan para obtener factores de Bondarenko y valores de secciones eficaces puntuales perturbados, ambos necesarios para llevar a cabo el autoblandaje con los módulos BONAMI y CENTRM/PMC respectivamente. Información más detallada sobre la metodología de muestreo e implantación de XSUSA en SCALE está disponible en [134, 135].

Una vez que SAMPLER genera el número deseado de inputs de NEWT, estos deben ser ejecutados, siendo deseable que se haga en paralelo. Con los outputs obtenidos el propio SAMPLER permite llevar a cabo el análisis estadístico de los mismos generando una serie de ficheros con diversa información (valores medios, desviaciones, histogramas, análisis de convergencia con el número de muestras, etc.) que pueden ser visualizados directamente con las herramientas JAVAPENO o FULCRUM del propio SCALE como muestra la figura 4.6.

Figura 4.6: Ejemplo de un histograma para k-efectiva tras varias ejecuciones con SAMPLER

4.2.4. TSUNAMI

TSUNAMI (*Tools for Sensitivity and UNCertainty Analysis Methodology Implementation*) es el módulo de control para el análisis de sensibilidad e incertidumbre de SCALE. Es una potente herramienta muy usada a nivel internacional para la propagación de incertidumbres de manera determinista. Se trata de una secuencia que realiza dos cálculos consecutivos de transporte, uno directo y otro adjunto, y posteriormente obtiene los coeficientes de sensibilidad empleando el módulo SAMS. En función de las dimensiones del problema y el código de transporte empleado conviene distinguir entre TSUNAMI-1D, TSUNAMI-2D y TSUNAMI-3D que utilizan los códigos XSDRNP, NEWT y KENO respectivamente para el cálculo de transporte. Las capacidades de KENO permiten que en TSUNAMI-3D el análisis de S/U pueda ser tanto en energía continua como en multigrupos mientras que en los otros dos casos sólo es posible en multigrupos.

Las distintas secuencias de TSUNAMI calculan las sensibilidades de una respuesta, como la k-efectiva, con respecto a cada dato de sección eficaz (nucleido y reacción) usado en el cálculo. Originalmente sólo se podían obtener sensibilidades y llevar a cabo análisis de incertidumbres para una única respuesta: la k-efectiva, haciendo uso de la teoría de perturbaciones de primer orden. La generalización de esta teoría que dio lugar a la *Generalized Perturbation Theory* (GPT) [66] permitió que se pudiesen definir otras respuestas como secciones eficaces homogeneizadas o tasas de reacción. Actualmente GPT no está incluida en TSUNAMI-3D al utilizar cálculos de Monte Carlo con KENO.

Como hemos dicho, TSUNAMI es un módulo de control cuya función es controlar una secuencia de cálculos que se llevan a cabo por otros códigos. En la figura 4.7 se muestra el diagrama general para el caso de TSUNAMI-3D. En primer término tiene lugar el procesamiento de los datos nucleares con XSPROC y continuación se llevan a cabo el cálculo de transporte directo y adjunto. Posteriormente se emplea el código BONAMIST para calcular los coeficientes de sensibilidad implícitos. La sensibilidad implícita es la debida a la sensibilidad de la k-efectiva a perturbaciones en la secciones eficaces causadas por cambios en el *self-shielding*. Matemáticamente se puede expresar como [13]:

$$S_{\Sigma_{x,g}, \omega_i} = \frac{\omega_i}{\Sigma_{x,g}} \frac{\partial \Sigma_{x,g}}{\partial \omega_i} \quad (4.3)$$

Figura 4.7: Diagrama de flujo de la secuencia TSUNAMI-3D [104]

donde ω_i es cualquier parámetro utilizado en el cálculo de autoblandaje (densidades atómicas, datos nucleares ...). La sensibilidad implícita tiene en cuenta el efecto que una perturbación en una densidad material N^i tiene sobre los parámetros utilizados para el cálculo de todas las secciones eficaces autoblandadas de todos los isótopos para todas las energías y su propagación a la k-efectiva. Por ejemplo, una perturbación en el hidrógeno cambia la sección eficaz en multigrupos autoblandada del uranio-238 (al cambiar el flujo de pesado), y por ello cambia la k-efectiva[46]. La sensibilidad total será la suma del coeficiente de sensibilidad explícito y el implícito. En BONAMIST sólo se computa la contribución implícita mientras que los coeficientes explícitos se calculan en SAMS (*Sensitivity Analysis Module for Scale*) a partir de las soluciones directa y adjunta del cálculo de transporte.

Si se definen respuestas adicionales en el input TSUNAMI ejecuta cálculos adjuntos adicionales con XSDRNPM y NEWT (dependiendo si es 1D o 2D) y cálculos con SAMS para cada respuesta. Los archivos de salida de SAMS tienen la extensión .sdf (*sensitivity data file*) y sirven de entrada para otras secuencias como TSUNAMI-IP. Los coeficientes de sensibilidad se pueden representar de acuerdo a la estructura en multigrupos adoptada y también se incluye el valor integral. Adicionalmente, para poder hacer la propagación de incertidumbres en TSUNAMI se aplica la regla del sandwich empleando la matriz de covarianzas. Un resultado muy útil que proporciona TSUNAMI es una lista de contribuyentes al valor de la incertidumbre en la respuesta, de manera que permite identificar cuales son los nucleidos y reacciones que originan mayor incertidumbre.

Por último, se debe mencionar también el módulo TSUNAMI-IP (*TSUNAMI-Indices and Parameters*) que a partir de los datos de sensibilidad generados con TSUNAMI-1D, -2D y 3D permite obtener un índice de correlación para evaluar la similitud de dos sistemas. Esto es, se pueden obtener correlaciones entre diferentes respuestas, por ejemplo secciones eficaces homogeneizadas. Sirve también para analizar la similitud entre experimentos reales y modelos de aplicación [54].

4.2.5. KENO

KENO es el código (módulo funcional) de transporte de Monte Carlo del sistema SCALE que permite realizar cálculos de criticidad tridimensionales. Actualmente existen dos versiones del código: KENO V.a y KENO-VI. KENO-VI incluye un todas las características de KENO V.a más un paquete adicional dedicado a la definición de la geometría. Dicho paquete permite modelizar cualquier volumen que se pueda construir usando ecuaciones de cuadratura, unido a la posibilidad de realizar rotaciones, definir intersecciones y *arrays* hexagonales y dodecaédricos haciendo de él un código muy flexible.

Ambas versiones del código pueden utilizarse para hacer cálculos en energía continua o en multigrupos, y se suelen utilizar dentro de la secuencia CSAS (*Criticality Safety Analysis Sequence*) que realiza primeramente el procesamiento con XSPROC en el caso de ser un cálculo en multigrupos. Se utilizan ante todo para la determinación de la k-efectiva y distribuciones de flujo en sistemas fisibles. KENO incluye técnicas de reducción de varianza como la ruleta rusa. En [103] se ofrece una amplia visión del código y sus características que no se exponen aquí por no ser el objeto de esta tesis.

En esta tesis se ha utilizado el código KENO sobre todo para la definición de una solución de referencia al considerarse como el método de cálculo más preciso. Una de las limitaciones de KENO y que se ha expuesto a los desarrolladores de ORNL es la imposibilidad de obtener valores de secciones eficaces homogeneizadas, que permitiría estimar el error introducido por el cálculo de autoblandaje. En versiones posteriores tratarán de incluir esta capacidad en el código.

4.3. COBAYA4

El grupo de investigación de Física de Reactores del antiguo Departamento de Ingeniería Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid, dirigido por los profesores J.M. Aragonés y C. Ahnert, ha venido desarrollando durante las últimas décadas una labor de investigación dirigida a desarrollar códigos de cálculo destinados al análisis y diseño de núcleos de agua ligera [1, 5]. Esta larga experiencia investigadora está reflejada en el Sistema Español de Análisis de Núcleos de Agua a Presión (SEANAP) [2, 3, 29, 18] implantado en varias centrales nucleares de España (Ascó I y II y Vandellós II). Este sistema consta de un conjunto de códigos que llevan a cabo el análisis de núcleos en sus distintas etapas y del que forman parte los códigos COBAYA y SIMTRAN. Esta primera versión del código COBAYA resolvía la ecuación de difusión corregida mediante factores de discontinuidad a nivel de la barra de combustible en 2 grupos de energía y 2D.

Como extensión de los modelos presentes en SEANAP, y fruto de la participación en los proyectos de los Programa Marco de la Unión Europea, nace el código COBAYA3, incluyendo el código nodal ANDES [92, 91], el código de difusión en malla fina COBAYA3k [53], y la posibilidad de acoplamiento con los códigos termohidráulicos COBRAIIIc/MIT-2, COBRA-TF, FLICA-4 y SIMULATH mediante la descomposición en subdominios y utilizando la técnica de disecciones alternadas [67].

El código COBAYA3 ha sido ampliamente utilizado en la realización de proyectos fin de carrera [118] en el Departamento de Ingeniería Nuclear, así como en la participación en proyectos europeos de investigación como NURISP. Igualmente se ha validado mediante la realización de varios *benchmarks* internacionales como el *OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO₂ core transient benchmark* [82] o el *benchmark* de rotura de línea de vapor (MSLB) [65].

El paquete de trabajo 1.1 del proyecto NURESAFE definía como objetivos el desarrollo y validación de nuevos esquemas de acoplamiento así como la integración de nuevos códigos en la plataforma SALOME mediante técnicas de *medcoupling* [106]. De esta manera la subtarea 1.1.1.4 concretaba que se debía actualizar la versión de COBAYA integrada en SALOME. Por otra parte, la tarea 1.1.3 dedicada a *High-Performance-Computing* (HPC) proponía la paralelización del código en SALOME para resolver cálculos 3D *pin-by-pin* mediante la descomposición en subdominios.

De esta forma surgió la necesidad de llevar a cabo una actualización y una profunda revisión del código fuente de COBAYA3. Tras una reordenación de la fuente y una serie de optimizaciones informáticas surgió la evolución del código, denominada COBAYA4. Esta versión

del código es la que incluye todos los cambios y capacidades requeridas en las especificaciones del proyecto NURESAFE. Las subrutinas están organizadas en carpetas en función de su misión, estando clasificadas en dos grandes carpetas: CORE y NK. En la primera se encuentran las subrutinas dedicadas al funcionamiento general del programa tales como la lectura del input, intercambio de variables en el acoplamiento con códigos termohidráulicos o la distribución en cálculos con disecciones alternadas. Todas ellas están agrupadas en carpetas con los nombres de PROGRAM, INPUT, COUPLING y DRIVERPBP. En la carpeta NK se encuentran las subrutinas dedicadas al cálculo y resolución de las ecuaciones neutrónicas, estando a su vez dividida en varias carpetas: NODAL (la fuente de ANDES de COBAYA3), PBP (la fuente de COBAYA3k de COBAYA3), ACCEL (para la aceleración nodal en casos de *pin-by-pin*), FEEDBK (subrutinas encargadas de la realimentación en las secciones eficaces) y SOLVERS (para la resolución matemática del sistema).

La resolución de cálculos nodales sigue la misma metodología que fue implantada en ANDES, denominada ACMFD (*Analytic Coarse-Mesh Finite-Difference Method*) introducido por Y.A. Chao [22, 23]. El código resuelve la ecuación de difusión neutrónica en geometría cartesiana (LWR) o geometría triangular-Z (VVER) en tres dimensiones y multigrupos de energía. También permite la resolución de transitorios gracias a la aplicación del método ACMFD (originalmente concebido para la ecuación de difusión estacionaria) a las ecuaciones de cinética neutrónica. Para la resolución del sistema lineal se emplea el algoritmo del método del gradiente biconjugado estabilizado (Bi-CGSTAB). Por último, hay que anotar que gracias al trabajo desarrollado en los últimos tiempos dentro del proyecto NURESAFE los cálculos se pueden realizar acoplados con la última versión del código termo-hidráulico COBRA-TF y dentro de la plataforma SALOME.

Respecto a los cálculos en malla fina la formulación de COBAYA4 ya se mencionó en la subsección 2.4.2 que se recurre a cálculos sin descomposición en subdominios, al contrario que se hacía en COBAYA3, gracias a la posibilidad actual de disponer de computadores con memoria suficiente para ejecutar estas simulaciones.

Finalmente, otra de las capacidades del código es la posibilidad de llevar a cabo cálculos de propagación de incertidumbres, a mediante las técnicas UQ que se describen en el siguiente apartado.

4.3.1. Técnicas para la propagación de incertidumbres implementadas en COBAYA

Uno de los desarrollos propios de la versión COBAYA3 fue la implementación de la resolución de la ecuación de difusión adjunta. Con el cálculo del flujo adjunto se pueden obtener, aplicando la metodología ASAP, los coeficientes de sensibilidad de la constante k -efectiva respecto a las secciones eficaces homogeneizadas. La expresión de estos coeficientes se analizará en el capítulo 10 al hablar sobre la construcción de una malla de puntos optimizada para librerías tabuladas de secciones eficaces.

La combinación de los coeficientes de sensibilidad computados y la matriz de covarianzas de las secciones eficaces homogeneizadas permite aplicar la ya mencionada regla del sándwich

Figura 4.8: Diagrama de flujo para la propagación de incertidumbres determinista con COBAYA

para la propagación de incertidumbres a la k -efectiva. Este proceso se resume en la figura 4.8 donde se muestra el diagrama de flujo del procedimiento para la propagación determinista de incertidumbres. En el capítulo 7 se expondrá a su vez una metodología para la obtención de la matriz de covarianzas de las secciones eficaces homogeneizadas.

La formulación para el cálculo de los coeficientes de sensibilidad de otras respuestas, como la potencia, aún no está disponible en COBAYA, no estando descartada su inclusión en desarrollos futuros del código.

Por otra parte, la propagación de incertidumbres mediante muestreo no implica ninguna implementación en la fuente del código, sino que es una sucesión de ejecuciones seguida de un análisis estadístico de los *outputs*. Cada cálculo se realiza con una librería de secciones eficaces homogeneizadas diferente, obtenidas muestreando los datos nucleares. Concretamente, en el capítulo 11 se aplicará la combinación de SAMPLER con COBAYA para 900 ejecuciones para propagar las incertidumbres en el núcleo correspondiente al ejercicio I-3 de UAM. El diagrama de flujo correspondiente al proceso se incluye en la figura 4.9.

Figura 4.9: Diagrama de flujo para la propagación de incertidumbres mediante muestreo con COBAYA

Parte III

APORTACIONES

Capítulo 5

Generación de librerías de secciones eficaces avanzadas para cálculos de difusión

Los siguientes capítulos están dedicados a la caracterización de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas para cálculos de difusión. El calificativo de avanzada hace referencia a dos ideas principales. La primera de ellas es la inclusión de las incertidumbres de los parámetros homogeneizados y la posibilidad de llevar a cabo cálculos de propagación de incertidumbres a nivel de núcleo completo. Los capítulos 6, 7, 8 y 9 están relacionados todos ellos con este tema. En el capítulo 6 se identifican las fuentes de incertidumbre concretas al aplicar el método de cálculo conocido como la aproximación estándar mientras que en los 7, 8 y 9 se hace una propagación de los diferentes tipos de incertidumbre a las librerías de secciones eficaces. En el capítulo 11 se lleva a cabo por otra parte un ejercicio de propagación de incertidumbres en un cálculo de núcleo.

Por otra parte, con una librería avanzada de secciones eficaces, y de aplicación en cálculos *best-estimate*, deben obtenerse resultados con los menores errores posibles; y en configuraciones sencillas deben permitir reproducir los valores obtenidos por teoría de transporte. Para ello es fundamental tener en cuenta la corrección de teoría de difusión por transporte utilizando los factores de discontinuidad. En configuraciones que no sean del tipo malla infinita el cálculo de los factores de discontinuidad depende de la formulación del operador de bajo orden, que en este caso es difusión. Este cálculo emplea datos calculados previamente por el código de transporte y para que el cálculo sea óptimo se debe reproducir en el código de difusión la misma configuración que en el de transporte. Es decir, hay una relación muy estrecha o acoplamiento entre ambos códigos, que será tratado en este capítulo. Previamente se hará una revisión sobre el procedimiento de generación de librerías de secciones eficaces destacando algunos detalles y fallos sutiles puestos de manifiesto por [114] como por ejemplo el cálculo del coeficiente de difusión o el cálculo de factores de discontinuidad en elementos adyacentes al reflector.

5.1. Generación de secciones eficaces nodales

La obtención de las secciones eficaces homogeneizadas se hace mediante un cálculo *lattice* 2D por tipo de elemento e imponiendo condiciones de contorno reflectiva, o lo que es lo mismo, condiciones de red regular. Sin embargo, algunos estudios [89] señalan que obtienen resultados incorrectos si aplican este método y algunos autores proponen técnicas de re-homogeneización para mejorar la precisión [45]. El profesor Kord S. Smith apunta en cambio en [114] que este modelo debe seguir vigente y proporciona resultados precisos, siempre y cuando se tengan en cuenta una serie de matices importantes tanto en el cálculo *lattice* como en el *solver* nodal; y que los códigos de Monte Carlo podrán reemplazar a los deterministas en los cálculos *lattices*. A continuación iremos desgranando cada uno de los aspectos más destacados.

5.1.1. Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión aparece en la ley de Fick, expresión 2.8, que relaciona el flujo neutrónico (escalar) con la corriente. Surge en la formulación de la ecuación de difusión al obtener el momento de orden 1 de la ecuación de transporte y al suponer que la variación temporal de la corriente es mucho menor que el gradiente de flujo. En ese caso, se obtiene que el coeficiente de difusión se formula como:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3} \left[\Sigma_t(\vec{r}, E) - \frac{\int_0^\infty \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E) J_u(\vec{r}, E') \cdot dE'}{J_u(\vec{r}, E)} \right]^{-1}; \quad u = x, y, z \quad (5.1)$$

Esta expresión se simplificaría, si se considerara dispersión isótropa en el sistema laboratorio, a:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3\Sigma_t(\vec{r}, E)} \quad (5.2)$$

Sin embargo, la aproximación de isotropía en el sistema laboratorio no es adecuada en el caso de que los átomos blanco sean ligeros, como ocurre en los reactores donde los moderadores son a base de hidrógeno. Aunque la dispersión pueda considerarse isótropa en el sistema centro de masas, es marcadamente hacia adelante cuando se cambia a las coordenadas del sistema laboratorio.

Se expresa entonces el término Σ_{s1} en función del valor medio del coseno del ángulo de dispersión:

$$\Sigma_{s1}(\vec{r}, E) = \mu(E) \Sigma_s(\vec{r}, E) \quad (5.3)$$

quedando finalmente:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{\Sigma_t(\vec{r}, E) - \bar{\mu}_0 \Sigma_s(\vec{r}, E)} \right] = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)} \quad (5.4)$$

Si la dispersión es isotrópica en el sistema centro de masas el valor medio del coseno del ángulo de dispersión en el sistema laboratorio viene dado por la expresión

$$\bar{\mu}_0 = \frac{2}{3A} \quad (5.5)$$

con A la masa atómica del núcleo blanco.

La sección eficaz de transporte representa la resistencia de un medio sometido a un gradiente de flujo al establecimiento de una corriente neutrónica. Si hay un gradiente de flujo, habrá una tendencia a una transferencia neta de neutrones en el sentido opuesto; pero éstos, al moverse, se encontrarán con núcleos con los que puedan interactuar y que interferirán en su movimiento.

Se pueden obtener expresiones complejas que relacionan el coeficiente de difusión con el término del *buckling* [60]. La resolución de la ecuación de transporte modificando el término de fugas para hallar el valor del *buckling* que permitiría que el problema estuviera en condiciones de criticidad es muy habitual en los cálculos *lattice*. Sin embargo, y según el criterio de Smith, los cálculos así realizados resultan inapropiados y suponen una de las mayores fuentes de error en el análisis de LWR. Esto se debe a que las condiciones necesarias para que el cálculo de *buckling* sea válido no se dan en los reactores comerciales y son:

- Homogeneidad. Los núcleos no son homogéneos
- Independencia energética del *buckling* en el interior del núcleo. Debido al patrón de recarga en disposición de tablero de ajedrez de elementos con mayor y menor reactividad para aplanar la distribución de potencia radial
- Las fugas que se producen en el reflector son normalmente en el grupo rápido, y en el térmico fuera del reflector lo que invalida de nuevo la hipótesis de la independencia del *buckling* con la energía.

Por todo ello, el profesor Smith recomienda encarecidamente no emplear cálculos de búsqueda de *buckling* en códigos *lattice*. Esto supone un cambio trascendental porque a día de hoy el esquema habitual es emplear este modelo a la hora de generar secciones eficaces. En el desarrollo de esta tesis se han seguido los consejos de Smith y se han generado las secciones eficaces con cálculos de k-efectiva.

5.1.2. Tratamiento del reflector

El análisis de reactores requiere métodos para generar parámetros equivalentes para nodos de reflector. Ello conllevó la extensión de las técnicas de homogeneización de elemento combustible para tratar la homogeneización del sistema *baffle*/reflector y los códigos *lattice* se modificaron para resolver la ecuación de transporte en configuraciones mayores a la de red regular: los *color-sets*, tanto 1D (elemento + reflector) como 2D.

Los ADF de un elemento se calculan de manera simple y directa, pero los factores de discontinuidad necesitan de la formulación del operador de bajo orden (nodal). Para resolver

Figura 5.1: Modelo del reflector con NEWT para el PWR en el *benchmark* de UAM

este problema se añadieron a los códigos *lattice* rutinas para el cálculo del flujo homogéneo y modelos secillos para que pudieran computar estos factores. Tal es el caso por ejemplo del código NEWT, que incluye un modelo simple para calcular el factor en la interfaz entre elemento y reflector. La necesidad de incluir estas modificaciones en los códigos *lattice* pone de manifiesto el acoplamiento extramadamente rígido entre métodos nodales y códigos *lattice*.

La modelización del reflector se hace en una configuración denominada *color-set* 1D donde se posiciona un elemento combustible, el *baffle* (deflector de acero) y un cierto espesor de agua. Tal es el caso por ejemplo del reflector considerado en las especificaciones del *benchmark* de UAM, que se presentará más adelante en el capítulo 6, y cuya modelización con NEWT se representa en la figura 5.1.

Esta modelización se ha hecho con el código NEWT, que como se ha dicho anteriormente, permite la obtención de factores de discontinuidad en la interfaz de separación mediante la aplicación de un modelo nodal muy sencillo. Sin embargo, estos factores no dejan de ser aproximados y no permiten reproducir con un código de difusión la misma *k*-efectiva del sistema computada por NEWT. Con este motivo se han realizado varias pruebas con COBAYA para esta configuración.

Una de las versatilidades del código COBAYA es la posibilidad de leer librerías de secciones eficaces en diferentes formatos. Uno de éstos es precisamente el *output* directo de NEWT, a partir del cual se extraen los valores de secciones eficaces y factores de discontinuidad. Además, COBAYA también puede calcular los factores de discontinuidad “perfectos” siempre y cuando se haya definido en el *input* de NEWT el módulo *fluxplanes*, que lo que hace es guardar los valores de corrientes y flujos en determinadas interfaces definidas por el usuario. Los factores de discontinuidad calculados a partir de estos valores serán los perfectos para esa configuración concreta y permiten reproducir exactamente la misma *k*-efectiva que da NEWT.

En la tabla 5.1 se muestran los resultados para una configuración de *colorset* 1D realizada con la versión de SCALE6.1 a 0 ppm de concentración de boro. Se dispone en primer lugar del valor de *k*-efectiva computado por transporte. A continuación se tienen los valores reproducidos por COBAYA con distintas opciones: *i*) sin utilizar factores de discontinuidad, *ii*) utilizando los factores que calcula NEWT, y *iii*) utilizando los factores “perfectos” cal-

Caso	Valor de k-efectiva
NEWT	1.004885
COBAYA sin IDF	1.040039
COBAYA con IDF de NEWT	0.994416
COBAYA con IDF "perfectos"	1.004891

Tabla 5.1: Valores de k-efectiva obtenidos con COBAYA para la configuración *colorset* 1D

culados a partir de los valores de flujos y corrientes. Se puede comprobar que utilizando los factores que calcula NEWT el resultado mejora respecto al hecho de no usarlos; sin embargo el valor de k-efectiva difiere del calculado por NEWT y reproducido por COBAYA al utilizar los factores "perfectos".

Los resultados anteriores se han realizado con la versión 6.1 de SCALE porque con la 6.2 se han detectado ciertas anomalías que se han reportado a los desarrolladores de ORNL.

En cálculos de núcleo completo tendríamos por tanto las secciones eficaces y factores de discontinuidad para cada tipo de elemento las calculadas en un cálculo de red regular, y para nodo de reflector las obtenidas en la configuración de *colorset*-1D. Como se analiza en [53], en la discretización del término de corriente de la ecuación de difusión el parámetro que interviene en las ecuaciones es r_{pq}^g , que representa la razón entre factores de discontinuidad en la interfase que pone en contacto las celdas p y q . Es decir:

$$r_{pq}^g = \frac{f_{qp}^g}{f_{pq}^g} \quad (5.6)$$

donde f_{pq}^g es el factor de la celda p en la interfase que lo pone en contacto con la celda q y en el grupo de energía g , que es distinto al recíproco de la celda q .

Visto entonces que es el ratio entre factores de discontinuidad lo que interviene en las ecuaciones que se resuelven durante el cálculo de núcleo, se deduce que el efecto será mayor donde más difieran entre sí los factores. Tal es el caso del reflector donde los factores de discontinuidad para el nodo de reflector son muy distintos de la unidad. Para el elemento adyacente al reflector se utilizan, al igual que en el resto de elementos, los ADF, obtenidos directamente en el cálculo en red regular. Sin embargo, de la modelización de la configuración *colorset* 1D se obtienen los factores de discontinuidad "perfectos" para el elemento.

Smith propone una corrección en el factor de discontinuidad (DF) del reflector de manera que, aún utilizando los ADF para el elemento, se preserve el ratio entre factores obtenido en el cálculo del *colorset*-1D. Esta corrección es:

$$DF_{ref,g}^{corregido} = \frac{DF_{ref,g}^{colorset1D}}{DF_{elem,g}^{colorset1D}} \cdot ADF_{elem,g}^{red regular} \quad (5.7)$$

Con el factor de discontinuidad así definido para el reflector y el ADF para el elemento, se preserva el ratio obtenido en la simulación del *colorset*-1D. En consecuencia los resultados

se aproximarán más a los del cálculo de transporte como se muestra en [114] con cálculos de CASMO.

Una utilización de esta corrección para su evaluación se ha empleado con COBAYA para la realización de un ejercicio a nivel de núcleo completo. Se trata del núcleo correspondiente al del ejercicio I-3 del *benchmark* de UAM (que se utilizará más adelante en el capítulo 11) pero donde los elementos de la periferia se sustituyen por uno, que sea siempre el mismo tipo (concretamente el correspondiente al ejercicio I-2, que será siempre el elemento de referencia), para que toda la periferia sea igual. Con este núcleo ficticio se pretende evaluar la mejoría introducida por esta corrección. La ventaja de que toda la periferia esté compuesta siempre por el mismo tipo es que sólo es necesario realizar un modelo de reflector con NEWT y un cálculo de los factores de discontinuidad. De lo contrario habría que realizar tantos modelos como tipos de elementos estuviesen adyacentes al reflector.

En la tabla 5.2 se recogen los resultados de la k-efectiva para diferentes casos. En primer lugar, se tienen los valores de k-efectiva para este núcleo ficticio, tanto a ARO como a ARI, obtenidos con el código KENO, que al ser de transporte se adoptará como referencia. Seguidamente vienen los cálculos de COBAYA, con varias posibilidades: *i)* sin utilizar factores de discontinuidad, *ii)* utilizando factores de discontinuidad tipo ADF para todos los elementos y en el reflector los computados por el modelo elemental que incluye NEWT, *iii)* igual que el caso *ii)* pero en el reflector utilizando los computados por COBAYA para la configuración de colorset-1D, y *iv)* igual que el caso *iii)* pero utilizando en el reflector la corrección propuesta por Smith. Se aprecia una constante mejoría en las soluciones comprobándose que la corrección propuesta es útil y eficaz, ya que la diferencia en la k-efectiva se reduce a 123 pcm, que para un cálculo de núcleo completo es un valor excelente. Por ello, se propone la corrección sugerida por Smith como mejora en la determinación de los factores de discontinuidad del reflector.

	ARO		ARI	
	k-efectiva	Dif. (pcm)	k-efectiva	Dif.(pcm)
KENO (238 g)	1.09539	Referencia	1.00706	Referencia
COBAYA sin DF	1.09310	229	1.00393	313
COBAYA con DF de NEWT	1.09374	165	1.00420	286
COBAYA con DF <i>colorset</i> -1D	1.09390	149	1.00469	237
COBAYA con corrección Smith	1.09416	123	1.00546	160

Tabla 5.2: Valores de la k-efectiva obtenidos con COBAYA para un núcleo ficticio y comparación con KENO

5.2. Generación de secciones eficaces *pin-by-pin*

La diferencia principal entre un cálculo *lattice* para obtener secciones eficaces nodales o de celda tiene lugar en el proceso de homogeneización espacial. Como el proceso de homogeneización tiene lugar después del cálculo de transporte, éste es el mismo en ambos casos. La homogeneización podría hacerse de dos formas:

- Por tipo de celda, esto es, donde todas las celdas del mismo tipo tengan las mismas secciones eficaces
- Cada celda individualmente

La diferencia radica, sobre todo, a la hora de calcular los factores de discontinuidad. En el primero de los casos se pueden determinar los SCDF, análogos a los ADF pero a nivel de celda, y proponer una parametrización de éstos en función de la vecindad, como se muestra en [57]. Sin embargo esto es muy complejo y muy limitado en términos de exactitud. La segunda opción en cambio es más precisa ya que las secciones eficaces de cada celda se obtienen con el pesado del flujo específico de esa celda, por lo que el cálculo posterior será más próximo a la realidad. Esta opción obliga a que, si se modeliza por ejemplo un cuarto de elemento de 15x15 se deban considerar 64 (8x8) regiones independientes de homogeneización, lo que por contra hará que el tamaño de la librería sea sustancialmente mayor. Además, para obtener los factores de discontinuidad es necesario guardar del cálculo de transporte los valores de flujo y corriente en cada una de las interfaces de separación entre celdas, y posprocesar los *outputs* para que, leyendo esa información, proceda a computar los factores de acuerdo a la formulación que se vaya a utilizar en el código de difusión. Esto muestra de nuevo la idea del acoplamiento rígido que tiene que haber entre código *lattice* y de difusión.

Se elige por tanto la segunda opción a la hora de llevar a cabo cálculos *lattice* para la generación de secciones eficaces a nivel de celda. En función del código que se esté utilizando esto tendrá unas implicaciones u otras. Para el caso concreto de NEWT, donde la homogeneización se hace por materiales, esto obliga a que se deban definir tantos materiales diferentes (de combustible, acero y refrigerante asociado) como número de celdas haya. Ello también implica que el número de cálculos de autoblandaje que hay que hacer se multiplique lo que aumenta considerablemente el tiempo de cálculo de unos 10-15 minutos en cálculos con homogeneización nodal a unos 40 minutos en los de celda. En la figura 5.2 se muestra un gráfico generado por el propio NEWT con la modelización del cuarto de elemento así definido y en la figura 5.3 con el elemento equivalente una vez llevada a cabo la homogeneización. Se puede apreciar que cada región se corresponde con una celda.

Para evaluar el acoplamiento entre SCALE y COBAYA en cálculos *pin-by-pin* se van a realizar cálculos de elemento combustible homogenizando por celda, como se acaba de describir, y computando los factores de discontinuidad en las interfaces entre celdas. Con ello se pretende valorar el efecto de utilizarlos o no en COBAYA y comprobar que en el caso de utilizarlos se debe reproducir el mismo valor que NEWT, lo que indicaría la correcta implementación del cálculo de los factores a partir de los *outputs* de NEWT. La información necesaria (flujos y corrientes en todas las interfaces entre celdas) que debe ser

imprimida en el *output* de NEWT se activa con el módulo FLUXPLANES y la definición de las diferentes coordenadas de cada cara. Adicionalmente, se va a realizar un cálculo con COBAYA empleando los factores SCDF, es decir, aquellos correspondientes a un cálculo de una celda en red regular; para cuantificar el error que supone su uso sino se pudieran emplear los IDF “perfectos”.

Figura 5.2: Modelización de un cuarto de elemento combustible con NEWT para un cálculo homogeneizando a nivel de celda

Figura 5.3: Modelización de un cuarto de elemento combustible con NEWT con las diferentes regiones de homogeneización en un cálculo *pin-by-pin*

En la tabla 5.3 se muestran los diferentes resultados. Se comprueba que en el caso de no utilizar IDF la diferencia entre el cálculo de COBAYA y el de NEWT son 31 pcm mientras

	k-efectiva	Diferencia (pcm)
NEWT	1.13453	Referencia
COBAYA sin IDF	1.13422	31
COBAYA con SCDF	1.13430	23
COBAYA con IDF	1.13453	0

Tabla 5.3: Valores de k-efectiva obtenidos con COBAYA para un elemento *pin-by-pin* y comparación con el valor de NEWT

que si se utilizan los correspondientes a celda en red regular (SCDF) la diferencia es de 23 pcm. Así mismo, al emplear los IDF “perfectos” computados por COBAYA se reproduce el mismo valor que en teoría de transporte. Con ello se comprueba que las rutinas de COBAYA que calculan estos factores están correctamente acondicionadas para leer la información de los *outputs* de NEWT y se comprueba, al igual que en el caso del reflector, que un correcto acoplamiento entre ambos códigos permite llevar a cabo cálculos equivalentes en configuraciones sencillas. En cálculos de núcleo completo sistemas verificados y consolidados como SCALE/COBAYA permitirán llevar a cabo cálculos que minimizan los errores debidos al empleo de simuladores de núcleo, y aptos para análisis *best-estimate*.

Capítulo 6

Fuentes de incertidumbre neutrónicas al emplear la aproximación estándar en cálculos neutrónicos 3D

En el capítulo 2 se ha justificado la necesidad de utilizar simuladores de núcleo para el cálculo neutrónico tridimensional de transitorios, ya que pueden ser acoplados con códigos termohidráulicos y termomecánicos para abordar la simulación de los fenómenos multifísica que tienen lugar en un reactor nuclear. La utilización de simuladores de núcleo exige seguir el esquema descrito en la sección 2.3 conocido como aproximación estándar e ilustrado en la figura 6.1.

Figura 6.1: Esquema de los diferentes cálculos de la aproximación estándar

En este esquema, el cálculo se aborda en tres niveles o fases sucesivas; en cada nivel se resuelve la ecuación de transporte o una aproximación, para obtener los parámetros de aplicación en el siguiente nivel:

1. Cálculo *Cell Physics*, donde se aborda el cálculo de celda en red regular infinita

aplicando códigos de transporte con el mayor detalle espacial y energético posible, con el fin de determinar las secciones eficaces en multigrupos

2. Cálculo *Lattice Physics*, donde se aborda el cálculo de elemento aplicando códigos de transporte en multigrupos para determinar las secciones eficaces homogeneizadas y colapsadas a pocos grupos de energía
3. Cálculo *Core Physics*, donde se aborda el cálculo de núcleo completo aplicando códigos de difusión con zonas homogeneizadas en pocos grupos de energía

Por otra parte, en el capítulo 3 se han presentado las fuentes de incertidumbre neutrónicas, comentándose de forma genérica que unas de ellas son las debidas a los modelos y métodos utilizados. Es necesario ahora concretar cuáles son esas fuentes de incertidumbre cuando se emplea la aproximación estándar en particular, ya que el interés final es cuantificar las incertidumbres en cálculos acoplados de transitorios que se basan en este esquema. En este capítulo se analizarán con detalle cuáles son las fuentes de incertidumbre primitivas y cuáles se van añadiendo con los distintos modelos y métodos empleados en cada etapa o nivel. El *benchmark* de la NEA/OCDE “*Uncertainty Analysis in Best Estimate Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs*” (*benchmark* UAM), servirá de marco para los análisis realizados.

6.1. Definición del *benchmark* de UAM

Consciente de la importancia del papel de las incertidumbres, el Comité de Ciencia Nuclear de la OECD/NEA constituyó en 2005 el grupo de expertos para el análisis de incertidumbres *Expert Group on Uncertainty Analysis in Modelling* (EGUAM), que lanzó el “*OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best Estimate Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs*” (en adelante *benchmark* UAM). Se trata de un ejercicio de intercomparación internacional cuyo objetivo es desarrollar y evaluar métodos de cuantificación de incertidumbres para simulación de reactores nucleares de agua ligera. El problema es muy complejo, al estar involucrados distintos fenómenos físicos acoplados. Por ello, la hoja de ruta del *benchmark* UAM, representada en la figura 6.2, está dividida en tres fases: Fase I (Neutrónica), Fase II (Análisis monodisciplina) y Fase III (Acoplamiento). A su vez, la Fase I está dividida en tres ejercicios, correspondientes a cada uno de los tres pasos o niveles de la aproximación estándar: el Ejercicio I-1 asociado al cálculo de *Cell Physics*, el Ejercicio I-2 asociado al cálculo de *Lattice Physics*, y el Ejercicio I-3 asociado a *Core Physics*, como se representa en el esquema de la figura 6.1. La idea es identificar las principales fuentes de incertidumbre en cada ejercicio y propagarlas al ejercicio siguiente, hasta cuantificar las incertidumbres y compararlas con los valores experimentales.

Figura 6.2: Esquema de la división de ejercicios en el *benchmark* de UAM

En el *benchmark* UAM se han definido diseños representativos de reactores de agua ligera tipo PWR, BWR y VVER-1000. Esta tesis se limita al análisis de núcleos PWR, por lo que se utilizan los datos y configuraciones del núcleo PWR, que corresponde al primer ciclo de la unidad 1 de *Three Mile Island* (en adelante TMI-1) cuyas especificaciones se revisan brevemente a continuación.

6.1.1. Especificaciones del *benchmark* de UAM para PWR

En la documentación oficial del *benchmark* se van estableciendo para cada uno de los ejercicios en los que se divide unas especificaciones que definen el problema de referencia y que sirve como base para la intercomparación deseada entre distintos participantes. Centrándonos en la fase I estas especificaciones para el caso PWR de TMI-1 incluyen la definición de la celda, elemento y núcleo, que se irán utilizando en esta tesis.

6.1.1.1. Configuración de celda (Ejercicio I-1)

En la figura 6.3 se muestran las características de la celda bidimensional representativa de TMI-1. Se trata de una celda de combustible de UO_2 con un 4.85 w/o de enriquecimiento y con Zircaloy-4 como material de vaina. La figura 6.1 proporciona las condiciones de operación a Hot Zero Power (HZP) y a Hot Full Power (HFP).

Parameter	Value
Unit cell pitch, [mm]	14.427
Fuel pellet diameter, [mm]	9.391
Fuel pellet material	UO ₂
Fuel density, [g/cm ³]	10.2083
Fuel enrichment, w/o	4.85
Cladding outside diameter, [mm]	10.928
Cladding thickness, [mm]	0.673
Cladding material	Zircaloy-4
Cladding density, [g/cm ³]	6.56
Gap material	He
Moderator material	H ₂ O

Figura 6.3: Especificaciones de la celda de TMI-1 en el *benchmark* de UAM [64]

Parámetro	HZP	HFP
Temp. combustible [K]	551	900
Temp. vaina [K]	551	600
Temp. moderador [K]	551	562
Densidad moderador [kg/m ³]	766	748.4

Tabla 6.1: Valores de la variables termohidráulicas a HZP y HFP

6.1.1.2. Configuración de elemento (Ejercicio I-2)

La configuración del elemento se muestra en la figura 6.4. Se trata de un elemento bi-dimensional con condición reflectiva, con una disposición de 15x15 barras, 4 barras de gadolinio cerca de las esquinas, 16 tubos guía y el tubo de instrumentación central. El enriquecimiento en U^{235} es 4.12 w/o, y la concentración de Gd_2O_3 del 2 % (en peso). En la Figura 6.5 se incluyen los principales parámetros del elemento.

Figura 6.4: Especificaciones del elemento combustible de TMI-1 en el *benchmark* de UAM [64]

Parameter	Value
Fuel assembly dimensions	15 × 15
Number of fuel rods per FA	208
Number of guide tubes per FA	16
Number of instrumentation tubes per FA	1
Number of Gd pins per FA	4
Fuel rod pitch, mm	14.427
Fuel rod outside diameter, mm	10.922
Fuel pellet diameter, mm	9.390
Cladding thickness, mm	0.673
Guide tube outside diameter, mm	13.462
Guide tube inside diameter, mm	12.649
Instrumentation tube outside diameter, mm	12.522
Instrumentation tube inside diameter, mm	11.201
Fuel assembly pitch, mm	218.110
Gap between fuel assemblies, mm	1.702

Figura 6.5: Principales características del elemento combustible de TMI-1 en el *benchmark* de UAM

6.1.1.3. Configuración de núcleo (Ejercicio I-3)

La configuración del núcleo de TMI-1 se muestra en la figura 6.6, donde se indican así mismo la ubicación de los bancos de control. Este núcleo está compuesto por 177 elementos combustibles, de 11 tipos diferentes (sin control). Cada tipo está caracterizado por un enriquecimiento, presencia de barras de gadolinio y presencia de venenos discretos ($Al_2O_3 - B_4C$ posicionados en los tubos guía). En la tabla 6.2 se recogen las características de todos los tipos de elementos.

La altura de los elementos es de 357.12 cm adoptándose una nodalización axial de 16 nodos iguales de 22.32 cm más dos nodos adicionales de reflector, para la zona inferior y superior. La longitud axial de las barras de control cuando están completamente insertada es de 342.70 cm. Así mismo se considera que la concentración de boro es de 2600 ppm, si bien en las especificaciones de los ejercicios I-1 y I-2 no se tenía en cuenta el boro y se suponía nula su concentración. Todos los cálculos que se hacen en esta tesis es considerando 2600 ppm como la concentración de boro, salvo que se especifique lo contrario.

6.2. Caracterización de las fuentes de incertidumbre en la aproximación estándar

Las fuentes de incertidumbre primitivas en cálculos neutrónicos son el conocimiento incierto de los datos nucleares de las librerías evaluadas y las incertidumbres tecnológicas (densidades materiales y geometría). Estas pueden ser propagadas a través de los diferentes

Figura 6.6: Configuración del núcleo de TMI-1 del *benchmark* de UAM [64]

Tipo de elemento	Enriquecimiento (w/o)	Venenos discretos (%)	Nº de barras de Gd	Enriq. de Gd
1	4.00	-	-	-
2	4.95	3.5	4	4.2075
3	5.00	-	4	4.25
4	4.40	-	-	-
5	5.00	3.5	4	4.25
6	4.85	-	4	4.1225
7	4.95	-	4	4.2075
8	5.00	-	8	4.25
9	4.95	-	8	4.25
10	4.95	3.5	-	-
11	5.00	-	-	-

Tabla 6.2: Especificaciones de los diferentes tipos de elementos combustibles

niveles o pasos del esquema estándar mencionado hasta los cálculos de núcleo completo, pero nuevas incertidumbres asociadas con el formalismo empleado (métodos y modelos) se irán añadiendo progresivamente. Siguiendo la clasificación mencionada en el capítulo 3, las fuentes primitivas serían aleatorias o de tipo A, mientras que las segundas podrían considerarse epistémicas o de tipo B, ya que proceden de una decisión consciente de incluir hipótesis y aproximaciones en los modelos y métodos utilizados.

6.2.1. Cálculos de celda (*Cell Physics*)

Los cálculos de celda o *cell physics* (correspondientes al Ejercicio I-1 del *benchmark* UAM) están centrados en la obtención de librerías de secciones eficaces microscópicas en multigrupos dependientes del problema que son usadas como *input* en los cálculos de *lattice physics*. El objetivo es estudiar el impacto que tiene el procesamiento de los datos nucleares y sus covarianzas (incluyendo la selección de la estructura en multigrupos), así como propagar las incertidumbres a las librerías dependientes del problema, tras el cálculo del autoblandaje o *self-shielding*.

Tras la evaluación de los datos nucleares representada en la gráfica 3.5 es necesario el procesamiento. Esta actividad tiene como objetivo el acondicionamiento de los datos evaluados para su aplicación a problemas reales [100]. Se trata de una fase muy importante donde se comprueba la consistencia de los datos, se promedian las secciones eficaces en la estructura en multigrupos deseada y se incluye el tratamiento para considerar el ensachamiento Doppler en las resonancias. El código por excelencia empleado para ello es NJOY [94]. La función de peso que se utiliza en el procesamiento depende de la aplicación posterior. Si se trata de un reactor térmico, como vimos en la sección 2.3, la función de peso se basa en las siguientes hipótesis: *i*) fuente de fisión moderada (se trata de un flujo genérico asintótico que, para un reactor térmico, tiene la forma de un maxweliano en el rango térmico, $1/E$ en el rango de resonancias y el espectro de fisión en el rango rápido); *ii*) absorbente en dilución infinita (se supone que la concentración del material absorbente no afecta al espectro neutrónico, no se consideran las depresiones locales del flujo en las resonancias); *iii*) red regular infinita.

Las librerías en multigrupos obtenidas tras el procesamiento son las librerías independientes del problema, representadas en las figuras 2.1 y 3.5. Como ya se mencionó, es necesario realizar el cálculo de autoblandaje de las resonancias a estas librerías para transformarlas en librerías dependientes del problema adecuadas para la aplicación concreta. El cálculo de procesamiento y de autoblandaje están íntimamente relacionados y por eso es corriente agruparlos como se hace en la figura 3.5.

En estos cálculos de celda o *cell physics* las incertidumbres de partida son las debidas a los datos nucleares, almacenadas como covarianzas en las librerías evaluadas, y las incertidumbres tecnológicas. Durante el cálculo de celda se añaden además las incertidumbres debidas a las aproximaciones que se hacen en el procesamiento y en el cálculo de autoblandaje, es decir, las ligadas a la aproximación de multigrupos.

6.2.2. Cálculos de elemento (*Lattice Physics*)

Los cálculos de elemento o *lattice physics* (correspondientes al Ejercicio I-2 del *benchmark* UAM), están centrados en obtener los parámetros promedio por elemento o nodo (cuarto de elemento) para cálculos de difusión; en concreto se trata de las secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía, factores de discontinuidad, factores de potencia por barrita y la constante k-infinita.

De entre las aproximaciones que se llevan a cabo en los cálculos *lattice* destacan principalmente:

- Aproximaciones numéricas y aproximaciones asociadas al método de resolución de la ecuación de transporte, que incluyen la discretización espacial y angular
- Condensación energética, típicamente a 2 grupos de energía aunque también es habitual en estructuras en 4 y 8 grupos para análisis de LWR
- Homogeneización del elemento en condiciones de red regular, esto es, sin tener en cuenta ningún tipo de vecindad del elemento real en el núcleo

Los datos de entrada de este ejercicio son los de datos salida del Ejercicio I-1, por lo que las fuentes de incertidumbre primarias serán de nuevo los datos nucleares y las incertidumbres tecnológicas, a las que se habrán añadido las asociadas a la aproximación en multigrupos. Además, en los cálculos *lattice* se añaden las incertidumbres asociadas a las tres aproximaciones arriba mencionadas.

La evaluación de las incertidumbres introducidas por estas aproximaciones es importante ya que en algunas situaciones son asumibles y en otras no. Por ejemplo, el efecto de la homogeneización en red regular puede ser evaluado diseñando una serie de problemas de prueba como mini-núcleos 2D (*colorsets*) junto con los cálculos 2D de elemento con condición reflectiva, que a día de hoy son los cálculos base para la generación de parámetros neutrónicos, a excepción del caso del reflector, en cuyo caso sí se emplea la configuración de *colorset* 1D. Por este motivo, en el *benchmark* de UAM se definen las configuraciones para *colorsets* 1D y 2D. Este es uno de los análisis que se realiza en esta tesis, comparando las incertidumbres para las diferentes configuraciones.

6.2.3. Cálculos de núcleo (*Core Physics*)

Los cálculos neutrónicos de núcleo completo *stand-alone* o *core physics*, correspondientes al Ejercicio I-3 del *benchmark* de UAM, se llevan a cabo normalmente con códigos de difusión. Los principales parámetros de salida son la constante de multiplicación k-efectiva, la distribución de potencia (radial y axial, axial offset, factores de pico), tasas de reacción y valor de bancos de control.

Los datos de entrada de este ejercicio son los de datos salida del Ejercicio I-2, es decir, las constantes en pocos grupos homogeneizadas. Por ello, a las fuentes de incertidumbre debidas a los datos nucleares y las incertidumbres tecnológicas, a las que se añadieron las

incertidumbres debidas a la aproximación en multigrupos y las introducidas por los cálculos *lattice*, hay que añadir ahora las introducidas por las hipótesis y simplificaciones realizadas para abordar los cálculos de difusión de núcleo completo.

Las principales aproximaciones son:

- La asociada al empleo de la ecuación de difusión en pocos grupos de energía para resolver el transporte neutrónico, aproximación aceptada en la industria nuclear. En el capítulo 2 se explicó el motivo por el cual históricamente se ha venido utilizando los métodos de difusión nodales en 2 grupos de energía en los cálculos de núcleo completo y que es fundamentalmente por una limitación computacional. Más tarde han ido surgiendo alternativas como métodos de transporte de alto orden como SP_3 , mallas espaciales finas y estructuras energéticas en mayor número de grupos, aunque no han alcanzado una madurez suficiente para que la industria los utilice de forma rutinaria en el diseño y análisis de seguridad. Por tanto, existe un error debido al uso de la aproximación de difusión, y consecuentemente una incertidumbre en los parámetros del núcleo debida al uso de difusión y que ha sido estimada por ejemplo en *benchmarks* previos de la NEA/OCDE.
- La asociada al esquema de discretización espacial escogido. Los esquemas más comunes ya vimos que eran los métodos nodales pero también los hay de diferencias finitas y elementos finitos, típicos de mallas más finas y por tanto con menor incertidumbre.
- Las asociadas a las simplificaciones numéricas durante el cálculo. El algoritmo de interpolación empleado para reproducir los valores de las secciones eficaces a partir de los datos almacenados en librerías tabuladas, como es estándar, puede ser una fuente destacada de incertidumbres.

Las incertidumbres de salida de estos cálculos de núcleo cuantificarían las incertidumbres finales propagadas en toda la fase neutrónica.

Al centrarse esta tesis en las incertidumbres en las librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos, las únicas fuentes de error relacionadas con este apartado que se evaluarán con detalle son las asociadas a los puntos de malla seleccionados para almacenar los datos en las librerías tabuladas. En este sentido, se ha desarrollado en la tesis un procedimiento para tratar de minimizar el error de interpolación al emplear librerías tabuladas. Dicho procedimiento será explicado en el capítulo 10.

6.2.4. Resumen de las fuentes de incertidumbres neutrónicas

Como recapitulación puede concluirse que las principales fuentes de error e incertidumbre relacionadas con la neutrónica cuando se utiliza el esquema de cálculo estándar son las siguientes:

1. Incertidumbres debidas a los datos nucleares presentes en las librerías evaluadas
2. Incertidumbres tecnológicas (densidades isotópicas y geometría)

3. Errores asociados al formalismo para obtener las librerías de secciones eficaces microscópicas en multigrupos dependientes del problema (cálculos de *cell physics*, incluyendo los errores debidos al procesamiento y el autoblandaje, es decir, ligados a la aproximación de multigrupos)
4. Errores asociados al formalismo para obtener las librerías de secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas en pocos grupos (cálculos de *lattice physics*, incluyendo las aproximaciones numéricas, el tipo de cálculo, las opciones de homogeneización y la estructura de la condensación energética)
5. Errores asociados al formalismo para obtener los resultados de núcleo (cálculos de *core physics*); los errores que provienen de la estructura de las librerías utilizadas están relacionados con los puntos de malla elegidos y procedimientos de interpolación o parametrización

En los capítulos posteriores se irán analizando y propagando cada una de las diferentes fuentes para caracterizar las incertidumbres en las librerías de secciones eficaces homogeneizadas, objetivo de esta tesis. De esta manera, el capítulo 7 se dedicará a la propagación de incertidumbres en los datos nucleares. En el capítulo 8 se hará un estudio de la propagación de incertidumbres tecnológicas y se evaluará la posible existencia de correlaciones con los datos nucleares. En el capítulo 9 se cuantificarán los errores introducidos debidos a los modelos y métodos en los cálculos de *cell/lattice physics*. Por último, en el capítulo 10 se tratarán los errores de interpolación al emplear librerías de secciones eficaces tabuladas y se desarrollará una metodología para reducirlos.

Capítulo 7

Propagación de incertidumbres de los datos nucleares a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas

7.1. Introducción

El presente capítulo está centrado en la propagación de las incertidumbres de los datos nucleares a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas, utilizadas como *input* por los códigos de difusión.

La forma de aportar datos de incertidumbre con una librería de secciones eficaces es suministrando junto con la propia librería una matriz de covarianzas. La matriz de covarianzas es un elemento fundamental en los cálculos UQ ya que no sólo contiene las incertidumbres en forma de varianza de todos los parámetros, sino que incluye también las covarianzas, que indican el grado de relación que hay entre los parámetros. Como ya se comentó al hablar de la técnica UQ de muestreo, a la hora de muestrear es indispensable hacerlo con la información de las covarianzas para que estas relaciones se mantengan también después de la perturbación; es decir, no se puede perturbar cada parámetro de manera independiente si están correlacionados.

El punto de partida del conocimiento de las incertidumbres en los datos nucleares son las matrices de covarianzas de las librerías evaluadas. Posteriormente en el procesamiento se elige su estructura en multigrupos. En el caso SCALE, como se comentó, están disponibles matrices de covarianzas en 44 grupos de energía en la versión SCALE6.1, y en 252 y 56 grupos de energía en la versión SCALE6.2.

Sin embargo, las matrices de covarianzas de las secciones eficaces homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía han recibido muy poca atención y hay muy pocas publicaciones al respecto. Pese a ello, su importancia es igualmente destacable ya que son el punto fundamental para la propagación de incertidumbres en cálculos de núcleo. Si se conocieran, sería directo propagar esa información a los resultados de núcleo completo: por una parte, si se utilizara un método basado en teoría de perturbaciones, los coeficientes de

7.2. Metodologías para la generación de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía

sensibilidad podrían ser combinados con la matriz de covarianzas global en la fórmula del sandwich para obtener la incertidumbre en los parámetros de núcleo; por otra parte, si se utilizara un método estocástico, la matriz de covarianzas podría muestrearse para generar un conjunto aleatorio de constantes en pocos grupos para realizar un conjunto de simulaciones de núcleo e inferir por análisis estadístico las incertidumbres en los parámetros de núcleo.

El objetivo de este capítulo es obtener esas matrices de covarianzas de las constantes en pocos grupos. En primer lugar, se obtendrá una librería avanzada de secciones eficaces para un elemento de referencia. Esta librería se califica como avanzada precisamente por incluir la relativa a las incertidumbres de los parámetros homogeneizados. Para ese elemento de referencia se realiza un análisis de las incertidumbres, correlaciones y de sensibilidad. Seguidamente se lleva a cabo un exhaustivo estudio sobre la sensibilidad, tanto de las incertidumbres como de las correlaciones, con las distintas condiciones que influyen en la funcionalización de las secciones eficaces homogeneizadas: el tipo de elemento, su vecindad y las condiciones de operación así como el nivel de homogeneización. Finalmente en la sección 7.5 se incluye una librería para un caso genérico de varios elementos, que permita llevar a cabo cálculos de núcleo.

7.2. Metodologías para la generación de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía

Existen dos alternativas posibles para propagar las incertidumbres en los datos nucleares a las secciones eficaces en pocos grupos: la metodología basada en muestreo estadístico y la basada en el empleo de coeficientes de sensibilidad. Con el sistema SCALE6.2 es posible aplicar ambas, haciendo uso respectivamente de la secuencia SAMPLER, o bien de las secuencias TSUNAMI-2D y TSUNAMI-IP.

La secuencia SAMPLER basada en muestreo estadístico permite evaluar la incertidumbre en cualquier respuesta computada por cualquier módulo de SCALE debido al conocimiento incierto de los datos de entrada, en este caso, los datos nucleares. El flujo de cálculo, presentado en la figura 7.1, se resumiría:

- En primer lugar, SAMPLER produce muestras aleatorias de los datos nucleares siguiendo la matriz de covarianzas, disponiéndose así de un conjunto de N datos perturbados. Se ha adoptado un número de muestras $N = 900$, siendo el caso 0 el nominal, sin perturbar. Como se ha comentado en el capítulo 4, los datos nucleares no son muestreados “*on the fly*”, sino que se utilizan unos factores de perturbación precomputados generados con el código XSUSA. Durante la ejecución de SAMPLER, esos factores son leídos para cada muestra, generándose un conjunto completo de secciones eficaces en multigrupos independientes del problema (en dilución infinita), así como parámetros consistentes perturbados requeridos para llevar a cabo el autoblindaje.

Figura 7.1: Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas siguiendo una metodología basada en muestreo

- En segundo lugar, para cada muestra, se lleva a cabo un cálculo de la secuencia de interés, en este caso del código NEWT, que realiza el procesamiento y transporte y suministra las constantes homogeneizadas en pocos grupos.
- Por último, las covarianzas (incertidumbres y correlaciones) en las constantes en pocos grupos son obtenidas tras el análisis estadístico de las distribuciones de salida. Para ello se lleva a cabo un tratamiento de post-proceso de los *outputs* de NEWT para extraer los valores de las secciones eficaces y almacenarlos en librerías en formato NEMTAB, para lo que se han desarrollado herramientas auxiliares en FORTRAN y *scripts* de *bash*. Estas librerías podrían también introducirse como datos de entrada a un código de núcleo como COBAYA para el estudio de la propagación de incertidumbres, como se analizará en el capítulo 11.

La secuencia TSUNAMI-2D seguida de TSUNAMI-IP permite también determinar la matriz de covarianzas de secciones eficaces homogeneizadas siguiendo una metodología determinista. Un esquema de esta metodología se presenta en la figura 7.2.

- En primer lugar, el uso de TSUNAMI-2D permite determinar los coeficientes de sensibilidad de las constantes en pocos grupos aplicando teoría generalizada de perturbaciones (GPT). Para ello, se llevan a cabo cálculos de procesamiento (en una versión de sensibilidades) y transporte utilizando el código NEWT, resolviendo en primer lugar la ecuación directa y adjunta y posteriormente la ecuación adjunta generalizada para cada función respuesta definida por el usuario, en este caso, las constantes homogeneizadas en pocos grupos. Los coeficientes de sensibilidad tienen dos componentes: una componente explícita, que se calcula a partir del producto de los flujos directos y adjuntos, y una componente implícita que tiene en cuenta los cambios en la librería en multigrupos debido a las perturbaciones en el autoblindaje.
- La combinación de las sensibilidades con la matriz de covarianzas aplicando la regla

7.2. Metodologías para la generación de librerías avanzadas de secciones eficaces homogeneizadas y condensadas en pocos grupos de energía

Figura 7.2: Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas siguiendo una metodología determinista basada en teoría de perturbaciones

del sandwich se lleva a cabo en el módulo SAMS, y suministra las incertidumbres de las secciones eficaces, que constituyen la diagonal principal de la matriz de covarianzas.

- Por último, TSUNAMI-IP utiliza las sensibilidades de todas las constantes homogeneizadas para medir el grado de similaridad entre cada dos variables y generar así las correlaciones.

La principal ventaja de esta metodología es que suministra los coeficientes de sensibilidad con respecto a los datos nucleares, que no sólo permiten propagar las incertidumbres, sino que también permiten identificar los procesos más importantes y su importancia relativa, contribuyendo a la comprensión de las características físicas del sistema. La principal desventaja de esta metodología es que actualmente no puede aplicarse al coeficiente de difusión y a los factores de discontinuidad, al no estar programada la solución del problema adjunto generalizado correspondiente. Por ello, se elige preferentemente el empleo de SAMPLER, aunque se utilizará también TSUNAMI para contrastar resultados y obtener la información adicional que aporta.

Como se ha comentado, ambas metodologías están basadas en el empleo del código NEWT. Los cálculos de procesamiento/transporte se llevan a cabo con las siguientes opciones, identificadas como óptimas:

- Librería de secciones eficaces independiente del problema
 - ◊ La librería utilizada es la librería en multigrupos independiente del problema *xn56v7.1*, en 56 grupos de energía, basada en la ENDF/B-VII.1 y distribuida con SCALE6.2, que incluye una matriz de covarianzas en el mismo número de grupos. Esta librería en multigrupos ha sido optimizada para reactores de agua ligera, y se prefiere a la librería en 252 grupos, también disponible en SCALE6.2,

basándose en consideraciones de tiempo de cálculo y precisión para aplicaciones a reactores LWR.

- Cálculos de autoblandaje para obtención de librería dependiente del problema
 - ◊ Para el cálculo de autoblandaje se emplea el tratamiento *latticell* de CENTRM, tanto para las celdas de UO_2 como para las enriquecidas con Gadolinio. Este modelo es el más riguroso disponible en SCALE, al basarse en cálculos 1-D en energía continua.
 - ◊ Si se utiliza SAMPLER, los datos perturbados requeridos para el autoblandaje (factores de autoblandaje y secciones eficaces de energía continua), son también muestreados usando los mismos factores de perturbación computados para las secciones eficaces en dilución infinita. De esa forma, los efectos implícitos se tratan de forma consistente.
- Cálculos de transporte
 - ◊ En el solver de ordenadas discretas, el orden de S_N se fija a 16.
 - ◊ En todos los materiales de combustible y estructurales se impone un orden de P_N igual a P_1 para la dispersión mientras que en el moderador se establece P_3 .
 - ◊ Se utiliza un mallado local recomendado de 4x4 para cada celda y una malla de 8x8 para la unidad global (*global unit*).
 - ◊ Siguiendo las recomendaciones de [114] se lleva a cabo un cálculo de tipo búsqueda de k-efectiva, no de *buckling*. El criterio de convergencia impuesto es de 10^{-5} .
 - ◊ La opción de la aceleración de malla gruesa (CMFD) se emplea para acelerar el cálculo. Particularmente, se utiliza la opción específica para un dominio rectangular (*cmfd=rect*) así como la opción de aceleración en dos grupos (*cmfd2g=yes*).
 - ◊ La condensación energética se hace a dos grupos de energía, con el corte en 0.625 eV.

7.3. Librería avanzada para un elemento de referencia

Aplicando la metodología de SAMPLER descrita en el apartado anterior, se ha obtenido para un elemento de referencia (el correspondiente al Ejercicio I-2 del *benchmark* de UAM descrito en 6.1.1) la matriz de covarianzas, junto con los valores nominales de las secciones eficaces homogeneizadas y factores de discontinuidad. La unión de ambos elementos constituye una librería avanzada de secciones eficaces, que aporta todos los datos necesarios para poder llevar a cabo cálculos UQ debidos a los datos nucleares.

La figura 7.3 muestra de manera esquemática todos los constituyentes de una librería avanzada para el caso general de un único elemento combustible. En el diagrama de la derecha

se suministran los valores nominales de cada sección eficaz, mientras que las covarianzas se aportan como incertidumbres relativas (en el diagrama superior) junto con la matriz de correlaciones. En dicha matriz se incluyen los coeficientes de correlación para todos los cruces entre diferentes secciones eficaces.

Figura 7.3: Esquema de una librería avanzada de secciones eficaces. [Unidades: Coef. Difusión cm , Secciones eficaces cm^{-1} , ADF adimensional]

7.3.1. Análisis de las incertidumbres

Es interesante analizar los histogramas de los parámetros de salida aleatorios obtenidos tras las 900 ejecuciones de NEWT, para valorar cómo son las distribuciones y comprobar si se ajustan a una distribución normal.

La figura 7.4 muestra los histogramas de las diferentes constantes en pocos grupos requeridas para cálculos de difusión: las secciones eficaces de absorción efectiva (definida como la diferencia entre la sección eficaz total y la dispersión), de producción (el producto $\nu\Sigma_f$), dispersión, coeficiente de difusión y factores de discontinuidad de grupos rápido y térmico. En todos los casos se comprueba que los parámetros se distribuyen de acuerdo a una normal y los histogramas se asemejan bastante a la PDF normal, también para los factores

de discontinuidad y coeficientes de difusión. Adicionalmente se ha verificado en todos los casos que se satisface el test de bondad de ajuste χ^2 o prueba de Pearson [115] con un nivel de significación de 0.05. Esta comprobación tiene un gran interés, ya que el hecho de que se ajusten a una normal indica que la desviación típica es un parámetro adecuado para caracterizar la incertidumbre, y también permite que los usuarios puedan utilizar esta librería de secciones eficaces homogeneizadas para su muestreo aleatorio, asumiendo que la PDF es normal, ahorrándose todo el proceso de generación de la librería, para propagar las incertidumbres en cálculos de núcleo siguiendo un método estocástico.

Un análisis de las incertidumbres en las distintas respuestas (constante k-infinito del elemento, secciones eficaces y factores de discontinuidad) se muestra en la tabla 7.1, donde se comparan los valores obtenidos con ambas metodologías, la estocástica y la determinista. Dado que en TSUNAMI-2D no está incorporada la solución de la ecuación de difusión adjunta generalizada para el coeficiente de difusión y los factores de discontinuidad de estos parámetros no se aportan resultados con la metodología determinista. Se incluyen por otra parte los valores de las secciones eficaces, tanto el valor promedio que suministra SAMPLER (media aritmética de todos los valores obtenidos con NEWT tras el muestreo aleatorio de los datos nucleares), como el valor nominal (el computado con los datos nucleares de la librería sin perturbar tanto por SAMPLER como por TSUNAMI-2D).

Se comprueba que los valores promedio son muy similares a los nominales gracias al alto número de historias considerado. La diferencia en k-infinito es solamente de 2 pcm, mientras que en las secciones eficaces no supera el 0.4 %. Se comprueba así mismo que los valores de incertidumbre predichos por ambas metodologías son muy similares: en el caso de k-infinito, se predicen incertidumbres de 537 pcm y 549 pcm con SAMPLER y TSUNAMI respectivamente (diferencias de 12 pcm); en el caso de las secciones eficaces, las incertidumbres difieren menos del 4 %. Ello quiere decir que la aproximación lineal que implica el uso de la metodología determinista es válida en este tipo de cálculos y no introduce un error apreciable, es decir, puede concluirse que no hay efectos no lineales importantes.

Se observa que las incertidumbres en las secciones eficaces rápidas son mayores que en las correspondientes al rango térmico. Las incertidumbres mayores, del 2.65 % y 1.4 % corresponden al coeficiente de difusión del grupo rápido y a la sección eficaz de dispersión del grupo rápido al térmico.

En la figura 7.5 se representa la convergencia del valor medio, desviación típica y parámetro *skewness* (momentos estadísticos de primer, segundo y tercer orden) de la k-infinito en función del número de historias. Se comprueba que un gran número de historias es necesario para obtener un perfecto acuerdo en la convergencia del valor promedio al valor nominal

Resulta también de interés analizar cuáles son los principales contribuyentes a la incertidumbre de cada uno de los parámetros. Esta información es suministrada por TSUNAMI-2D. En la tabla 7.2 se muestra el ranking de los principales contribuyentes (nucleido y reacción) para la constante k-infinito y para las secciones eficaces. Se dan las contribuciones relativas más importantes, ordenadas de mayor a menor contribución sólo para la primera columna, correspondiente a la sección eficaz de absorción del grupo rápido. La incertidumbre total de cada respuesta puede computarse a partir de los valores individuales, sumando el cuadrado de los valores positivos, restando el cuadrado de los valores negativos y tomando la

Figura 7.4: Histogramas de la distribución de las secciones eficaces, coeficientes de difusión y factores de discontinuidad

7.3. Librería avanzada para un elemento de referencia

Parámetro	$\bar{R} (cm^{-1})$	$\Delta R/R (\%)$ (SAMPLER)	$R_{nom} (cm^{-1})$	$\Delta R/R (\%)$ (TSUNAMI)
k_{inf}	1.16434	0.5369	1.16436	0.5490
$\Sigma_{abs,1}$	1.096E-02	0.9618	1.100E-02	0.9514
$\Sigma_{abs,2}$	1.343E-01	0.1710	1.341E-01	0.1775
$\nu \Sigma_{fis,1}$	9.055E-03	0.6263	9.060E-03	0.6450
$\nu \Sigma_{fis,2}$	1.856E-01	0.4962	1.855E-01	0.4994
$\Sigma_{disp1 \rightarrow 2}$	1.723E-02	1.4179	1.723E-02	1.4004
$\Sigma_{disp2 \rightarrow 1}$	1.912E-03	0.4796	1.918E-03	0.4715
D_1	1.4946	2.6502	1.4927	-
D_2	3.578E-01	0.3012	3.578E-01	-
f_1	9.937E-01	0.0263	9.937E-01	-
f_2	9.627E-01	0.0246	9.9627E-01	-

Tabla 7.1: Valores promedio, nominal y de incertidumbre en las secciones eficaces

Figura 7.5: Convergencia del valor de medio, desviación típica y *skewness* de la k-infinito con el número de historias (en el caso del valor medio se representa con una línea azul el valor correspondiente al caso nominal)

raíz cuadrada, obteniéndose los valores incluidos en la tabla 7.1. Los valores negativos son debidos a correlaciones negativas o diferentes signos de los coeficientes de sensibilidad para secciones eficaces correlacionadas.

Se observa que los principales contribuyentes a la incertidumbre en k-infinito son las secciones eficaces del U^{235} y U^{238} . Solamente la incertidumbre de la nu-bar del U^{235} produce una incertidumbre de 336 pcm en la reactividad, seguida en importancia por la captura del U^{238} y el espectro de fisión del U^{235} . Estos valores son muy dependientes de la matriz de covarianzas empleada, como se verá en la sección 7.4.1. Estos mismos datos nucleares aparecen como importantes contribuyentes de las secciones eficaces homogeneizadas, pero además se hacen relevantes las secciones eficaces de dispersión elástica del H^1 y del O^{16} y la correlación entre la fisión y la captura del U^{235} .

Nucleido-Reacción	%ΔR/R						
	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu\Sigma_{fis,1}$	$\nu\Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1\rightarrow2}$	$\Sigma_{s2\rightarrow1}$
$U^{235} \bar{\nu}$	0.3361			0.2108	0.3853		
$U^{238} (n, \gamma)$	0.2400	0.3627			0.0341	1.5490	
$U^{235} \chi$	0.2074	0.5032		0.4483		0.8670	
$U^{235} (n, \gamma)$	0.1598	0.1937	0.1168		0.0565		0.1041
$U^{238} (n, n')$	0.1530	0.6672	0.0788	0.0932		1.0306	
$U^{235} (n, f)$	0.1160		0.1506	0.1799	0.2876		0.1273
$H^1 elast$		0.1340	0.0192		0.0192	0.3124	
$O^{16} elast$		0.0890					0.4221
$U^{235} (n, f) (n, \gamma)$			-0.1188		0.1139		-0.1058

Tabla 7.2: Ránking de los principales contribuyentes a la incertidumbre de la k-infinito y de las secciones eficaces

7.3.2. Análisis de sensibilidad

Los coeficientes de sensibilidad son suministrados por TSUNAMI. En la tabla 7.3 se muestran los principales coeficientes de sensibilidad integrados en todo el rango de energía, es decir, los de mayor valor absoluto, ordenados de mayor a menor para la variable de la primera columna. Estos coeficientes se dan en forma relativa, y se definen como el cambio en % de la variable por cada 1 % de cambio en el dato nuclear. Por ejemplo para la k-infinito:

$$S_{k,\sigma} = \frac{\partial k/k}{\partial \sigma/\sigma} \quad (7.1)$$

Se comprueba que los principales contribuyentes a la incertidumbre en un parámetro no tienen por qué coincidir con los que tienen un mayor impacto en el cambio de dicho parámetro. Por otra parte se observa que las sensibilidades de la k-infinito no tienen por qué coincidir

7.3. Librería avanzada para un elemento de referencia

Coef. Sens.	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu\Sigma_{fis,1}$	$\nu\Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1\rightarrow2}$	$\Sigma_{s2\rightarrow1}$
$U^{235} \bar{\nu}$	9.32E-01			7.54E-01	9.99E-01		
$U^{235} (n, f)$	3.79E-01	2.01E-01	4.16E-01	6.98E-01	7.97E-01	-9.00E-02	3.54E-01
$U^{238} (n, \gamma)$	-1.83E-01	2.80E-01	4.28E-02			-1.13E-01	3.31E-02
$B^{10} capt$	-1.71E-01	4.96E-02	1.74E-01		-2.93E-02		1.50E-01
$U^{235} (n, \gamma)$	-1.27E-01	8.83E-02	4.21E-02		-3.52E-02	-4.20E-02	
$H^1 elast$	1.26E-01	1.10E-01	1.47E-01	1.21E-01	1.47E-01	1.18	-8.64E-02
$U^{238} elast$						7.32E-02	7.29E-02
$U^{238} \bar{\nu}$				2.45E-01			
$U^{238} (n, f)$				2.43E-01			

Tabla 7.3: Ránking de los principales coeficientes de sensibilidad para la k-infinito y las secciones eficaces

con las de las secciones eficaces homogeneizadas; por ejemplo, mientras las dispersiones elásticas del H^1 y U^{238} apenas impactan la reactividad, tienen un efecto notorio en todas las secciones eficaces homogeneizadas.

Se observa que la sección eficaz de absorción del grupo rápido es muy dependiente de la captura del U^{238} y la fisión del U^{235} , que son las principales reacciones que determinan las absorciones rápidas, siendo las sensibilidades positivas, es decir, un aumento de cualquiera de esas secciones eficaces conlleva un aumento de la sección eficaz homogeneizada. Lo mismo puede decirse para la absorción del grupo térmico, que además es muy dependiente de la captura del B^{10} . Resulta menos intuitiva la dependencia con la dispersión elástica del H^1 , que determinará la efectividad de la moderación. Tal y como se observa en la figura 7.6, donde se han representado las principales sensibilidades de la sección homogeneizada de absorción del grupo rápido, la sensibilidad respecto al H^1 integrada en un grupo de energía es positiva, pero un análisis de la dependencia energética muestra que el efecto de un aumento de la dispersión del H^1 por encima de 4 keV produce un aumento de la sección eficaz de absorción (coeficiente de sensibilidad positivo), mientras que un aumento por debajo de 4 keV produciría una disminución (coeficiente de sensibilidad negativa).

Las secciones eficaces de producción (nu-fisión) dependen fuertemente de la nu-bar y la fisión del U^{235} como es lógico. La dispersión del grupo rápido al térmico depende fundamentalmente de la sección eficaz de dispersión elástica del H-1, con una sensibilidad positiva, y de la captura del U^{238} , con una sensibilidad negativa, ya que las capturas resonantes del U^{238} son el principal obstáculo al proceso de moderación del grupo rápido al térmico que representa esta sección eficaz. La sección eficaz de *up-scattering* tiene como principales coeficientes de sensibilidad la fisión en el U^{235} y la captura en el B^{10} ya que representan los procesos más dominantes en el rango térmico. Sin embargo el papel del *up-scattering* es muy limitado y su importancia muy baja.

Figura 7.6: Representación de los coeficientes de sensibilidad más importantes para el parámetro $\Sigma_{abs,1}$ con la energía

7.3.3. Análisis de las correlaciones

Las correlaciones entre los valores proporcionados con las dos metodologías de SAMPLER y TSUNAMI-IP se han comparado, mostrándose en la figura 7.7 ambas matrices de correlación. Los valores suministrados son muy similares, como se concluye al analizar la figura 7.8 donde se representan los valores de correlaciones en un sistema cartesiano donde en cada eje se asignan los valores obtenidos por cada código, apreciándose que los puntos están muy próximos a la diagonal. Es decir, al igual que sucedía con las incertidumbres, la aproximación lineal que implica la metodología determinista no supone incurrir en error. En versiones de SCALE anteriores a la 6.2 los valores predichos por TSUNAMI-IP diferían notablemente de los predichos por SAMPLER, como se pone de manifiesto en [71], por lo que se desaconsejaba su utilización para el cálculo de correlaciones entre respuestas. Con esta comprobación se observa que esta anomalía ha sido corregida.

En relación con los coeficientes de correlación de k -infinito, se deduce que:

- k -infinito tiene una correlación positiva con las secciones eficaces homogeneizadas de producción, tanto del grupo rápido como del térmico, lo que indica que un aumento de estas secciones eficaces ν -fisión conducirá a un aumento de la reactividad. Esto está en consonancia con los coeficientes de sensibilidad de la tabla 7.3, donde se observa que k -infinito aumenta al aumentar la ν -bar y la fisión del U^{235} , principales contribuyentes de las secciones homogeneizadas de producción. Sería de esperar un valor mayor de la correlación con la ν -fisión del grupo térmico que con la del grupo rápido, y efectivamente es así en el caso de elementos combustibles sin boro;

sin embargo, la presencia de boro modifica el balance de las absorciones del grupo térmico.

- Se observa una correlación negativa de k-infinito con la absorción del grupo rápido, lo que es lógico, ya que el principal mecanismo de absorción en el grupo rápido son las capturas en las resonancias del U^{238} (como se observa en el correspondiente coeficiente de sensibilidad de esta sección eficaz en la tabla 7.3), y un aumento de estas capturas disminuirán la reactividad (como se observa en el correspondiente coeficiente de sensibilidad de la k-infinito respecto a las capturas del U^{238}).
- Se observa una ligera correlación negativa de k-infinito con la absorción del grupo térmico, lo que indica que al aumentar la absorción del grupo térmico, se reduce la reactividad. Las principales componentes de la absorción térmica son la fisión del U^{235} (cuyo aumento contribuiría a aumentar la k-infinito) y las capturas del B^{10} y del U^{235} y U^{238} (cuyo aumento contribuiría a disminuir la k-infinito), sugiriendo que en este caso pesan más las segundas que la primera, de forma que un aumento de la sección eficaz homogeneizada de absorción térmica reduce la reactividad.
- k-infinito tiene una correlación negativa respecto a la sección eficaz homogeneizada de dispersión del grupo rápido a térmico. Esto implica que un aumento de esta sección eficaz, reducirá la reactividad. El *downscattering* depende fundamentalmente de la dispersión del H^1 (su aumento produciría un aumento muy notable de la sección eficaz y en menor medida de la k-infinito) y de la captura del U^{238} (su aumento produciría una pequeña reducción de la sección eficaz y una reducción mayor de k-infinito). El balance global provoca que una reducción de la sección eficaz de dispersión conduzca a un aumento de la reactividad, siendo por tanto la correlación negativa.

Figura 7.7: Comparación de las matrices de correlación para el caso de referencia obtenidas con SAMPLER y con TSUNAMI-IP

Figura 7.8: Comparación de las correlaciones obtenidas para el caso de referencia entre SAMPLER y TSUNAMI-IP

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Un elemento combustible PWR queda caracterizado por su geometría, isotopía, número de barras de combustible, tubos guía o de control, venenos consumibles y variables de realimentación (temperatura del combustible, temperatura y densidad del moderador y concentración de boro). Una librería de secciones eficaces para cálculos de difusión tiene que contener las secciones eficaces calculadas para cada tipo de elemento combustible y tabuladas para las distintas condiciones operacionales. Si se trata de una librería avanzada contendrá además sus matrices de covarianzas. En esta sección se analizan cómo varían las incertidumbres y correlaciones con la matriz de covarianzas utilizada así como con los distintos aspectos que modifican las secciones eficaces homogeneizadas para cálculos de difusión:

- Tipo de elemento
- Vecindad
- Condiciones de operación
- Nivel de homogeneización

Figura 7.9: Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con la matriz de covarianzas de los datos nucleares

7.4.1. Influencia de la matriz de covarianzas de los datos nucleares

El primer estudio que se va a efectuar sobre las incertidumbres y correlaciones es la determinación del impacto de la matriz de covarianzas de los datos nucleares utilizada. Para ello se utilizarán las matrices 44COV-SCALE6.1 y 56COV-SCALE6.2 en 44 y 56 grupos respectivamente. Tal y como se ha comentado en la sección 3.2.1, la matriz 56COV-SCALE6.2 incluye hasta un total de 187 nucleidos con datos de covarianzas de la ENDF/B-VII.1, manteniendo covarianzas de SCALE6.1 para los aproximadamente 215 nucleidos restantes. Se han visto modificados los datos de covarianzas de la nubar del Pu^{239} y U^{235} , captura del H^1 y de varias secciones eficaces de productos de fisión, así como de los espectros de fisión.

En la figura 7.9 se comparan los valores de incertidumbre en las secciones eficaces homogeneizadas utilizando ambas librerías. Como se puede apreciar, existe una diferencia notable entre ambos casos, siendo siempre mayor la incertidumbre en el caso de considerar la matriz de covarianzas 56COV-SCALE6.2, excepto en la sección eficaz de absorción del grupo térmico. En la figura 7.10 se representan las matrices de correlación entre las secciones eficaces homogeneizadas, observándose igualmente diferencias dependiendo de las covarianzas utilizadas.

Un análisis detallado comparando los rankings de incertidumbre en cada uno de los paráme-

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Figura 7.10: Comparación de las matrices de correlación al variar la matriz de covarianzas de los datos nucleares: estructura en 56 grupos en la parte superior y con 44 en la parte inferior

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Nucleido-Reacción	% $\Delta\Sigma/\Sigma$ SCALE6.1						
	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu\Sigma_{fis,1}$	$\nu\Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1\rightarrow2}$	$\Sigma_{s2\rightarrow1}$
$U^{235} \bar{\nu}$	0.2691			0.1561	0.3107		
$U^{238} (n, \gamma)$	0.2442	0.3648	0.0968		0.0368		
$U^{235} (n, \gamma)$	0.1994	0.2514	0.1455		0.0590		
$U^{235} (n, f)$	0.1084		0.1880	0.1748	0.2845		
$U^{238} (n, n')$	0.0981	0.6235	1.86E-5	0.096		0.8337	
$U^{235} \chi$	0.08613	0.2798		0.2515		0.3549	
$H^1 elast$	0.2280	0.3489	0.0231	0.1924	0.013	0.3633	0.093
$O^{16} elast$		0.0622					0.084
$U^{235} (n, f) (n, \gamma)$			-0.1481		0.1159		
$U^{238} \bar{\nu}$				0.2861			
$U^{238} elastic, (n, n')$						-0.5850	

Tabla 7.4: Ranking de los principales contribuyentes a la incertidumbre de la k-infinito y de las secciones eficaces con la matriz de covarianzas 44COV-SCALE6.1

tros en ambos casos (tablas 7.4 y 7.2) muestra que al utilizar la matriz 56COV-SCALE6.2 respecto a la 44COV-SCALE6.1, se incrementa notablemente la contribucin del espectro de fisn del U^{235} a las incertidumbres de las secciones eficaces rpidas, siendo uno de los principales contribuyentes, y se reduce la de la seccin eficaz de dispersn elstica del H^1 , que tiene una menor importancia relativa; ello explica el aumento de las incertidumbres en las constantes del grupo rpido. Por otra parte, aumenta la contribucin de la nu-bar del U^{235} , principal contribuyente a la incertidumbre de la produccin del grupo trmico, que tambin ver incrementada su incertidumbre. Respecto a la absorpcin del grupo trmico, las dos contribuciones principales, debidas a la fisn y captura del U^{235} , se reducen por lo que la incertidumbre disminuye respecto al uso de la 44COV-SCALE6.1.

Las diferencias encontradas en el uso de dos matrices de covarianzas distintas, que comparten datos para un buen nmero de nucleidos, sugiere que el uso de otras matrices de covarianzas conducira resultados an ms dispares. Se puede concluir que cualquier evaluacin de las covarianzas en las secciones eficaces homogeneizadas ser muy dependiente de las matrices de covarianzas utilizadas, reflejando inevitablemente los datos de partida. La cuantificacin de incertidumbres en los datos nucleares es an un campo en desarrollo y las estimaciones realizadas tienen que ser reevaluadas a medida que se avance en el conocimiento de las covarianzas de datos nucleares.

7.4.2. Influencia del tipo de elemento

Para evaluar la dependencia de la matriz de covarianzas de las secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos con el tipo de elemento combustible, conviene seleccionar elementos

con características muy dispares. No resultan idóneos los elementos correspondientes al Ejercicio I-3 del *benchmark* de UAM, similares entre sí, al ser todos ellos elementos frescos de UO_2 con ligeras variaciones de enriquecimiento y absorbentes consumibles.

Se han seleccionado los elementos del *benchmark* [105]. Se trata de tres tipos de elementos muy diferentes entre sí, correspondiendo el primero al caso de referencia, el segundo a un elemento de la central nuclear de Takahama-3, que presenta mayor contenido en Gd que el caso de referencia (su contenido en Gd es tan bajo que apenas se considera que cambie significativamente respecto a uno sin Gd); y el último a un elemento con combustible tipo MOX, correspondiente al reactor suizo de Benzau. Las especificaciones se resumen en la tabla 7.5, pudiéndose encontrar información más detallada en [105]. Adicionalmente, se conoce la isotopía de esos elementos para los quemados medios de 20MWd/tHM y 40MWd/tHM, representativos de mitad y final de ciclo respectivamente, lo que permite estudiar también el efecto del quemado.

Elemento PWR	UO_2	$UO_2 + Gd$	MOX
Central Nuclear	TMI-1	Takahama-3	Beznau
Disposición	15x15	17x17	14x14
Núm. barras comb.	212	264	179
Núm. barras con Gd	4	16	0
Conc. Gd_2O_3	2	6	-
Diámetro ext. pastilla (cm)	0.9391	0.805	0.929
Conc. promedio U^{235}	4.85	4.03	0.22
Conc. promedio Pu	-	-	3.65
Temp. comb. (K)	900	900	788
Temp. mod. (K)	565	575	575
Conc. boro (ppm)	900	630	600

Tabla 7.5: Especificaciones de diferentes tipos de elementos combustibles

En las tablas 7.6, 7.7 y 7.8 se presentan los valores de incertidumbre de k-infinito y de las constantes en pocos grupos para los tres tipos de elemento variando el paso de quemado: situación inicial sin quemar, quemado de mitad del ciclo y quemado a final de ciclo. En la figura 7.11 se comparan las incertidumbres en las secciones eficaces para los tres tipos de elementos en el caso sin quemar.

Se aprecia que, por lo general, para un mismo paso de quemado el elemento con Gd suele presentar la mayores incertidumbres, excepto en la k-infinito que corresponde al elemento con MOX. En este último tipo se aprecia además que la incertidumbre de la k-infinito aumenta con el quemado mientras que en los otros dos tipos sucede al contrario. Respecto a las secciones eficaces se aprecia la tendencia generalizada que la sección eficaz de dispersión del grupo rápido al térmico es el parámetro con mayor incertidumbre, y que, por lo general, la incertidumbre de las secciones eficaces aumenta con el paso de quemado. Este análisis

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Tipo de elemento	$\% \Delta R / R$								
PWR	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu \Sigma_{fis,1}$	$\nu \Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	$\Sigma_{s2 \rightarrow 1}$	D_1	D_2
UO_2	0.5865	0.9001	0.2137	0.5546	0.5239	1.2591	0.4846	2.292	0.2978
$UO_2 + Gd$	0.6343	0.9339	0.2075	0.6326	0.5467	1.2826	0.4444	2.336	0.2902
MOX	0.5237	0.8261	0.3690	0.5947	0.6741	1.1386	0.4810	2.253	0.260

Tabla 7.6: Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos sin quemar

Tipo de elemento	$\% \Delta R / R$								
PWR	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu \Sigma_{fis,1}$	$\nu \Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	$\Sigma_{s2 \rightarrow 1}$	D_1	D_2
UO_2	0.4936	0.8725	0.4788	0.6297	0.6002	1.1044	0.5518	2.132	0.2924
$UO_2 + Gd$	0.5136	0.9149	0.5913	0.7300	0.6877	1.1186	0.5589	2.173	0.2857
MOX	0.5478	0.8939	0.4140	0.7191	0.6790	1.2077	0.4880	2.272	0.2618

Tabla 7.7: Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos a un quemado de 20 MWd/tHM

Tipo de elemento	$\% \Delta R / R$								
PWR	k_{inf}	$\Sigma_{abs,1}$	$\Sigma_{abs,2}$	$\nu \Sigma_{fis,1}$	$\nu \Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	$\Sigma_{s2 \rightarrow 1}$	D_1	D_2
UO_2	0.4803	0.9003	0.8119	0.9582	1.0234	1.0795	0.7088	2.077	0.2998
$UO_2 + Gd$	0.4944	0.9582	1.0108	1.1489	1.2337	1.1155	0.7768	2.137	0.2935
MOX	0.5847	0.9659	0.7088	1.0788	0.9268	1.3027	0.6049	2.313	0.2834

Tabla 7.8: Valores de incertidumbre para tres tipos de elementos a un quemado de 40 MWd/tHM

Figura 7.11: Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con el tipo de elemento combustible

demuestra que la configuración del elemento y, sobre todo, el tipo de combustible es un aspecto muy influyente en las incertidumbres de los parámetros homogeneizados.

Con respecto a las correlaciones, en la figura 7.12 se representan las matrices de correlaciones para los tres tipos de elementos en las dos situaciones extremas: fresco y con el máximo quemado. En todos los casos se aprecia que las correlaciones más destacables tienen lugar nuevamente entre la sección eficaz de absorción y el coeficiente de difusión y entre ésta última y las secciones eficaces de dispersión.

Se observa que para todos los tipos de elemento aparecen cambios destacables entre la matriz correspondiente al estado fresco y al estado quemado, aumentando considerablemente las correlaciones positivas. Se aprecia igualmente que para un mismo estado las matrices de los tres tipos de elemento presentan cambios que *a priori* parecen menores. Sin embargo, no es fácil estimar la repercusión que estos cambios implican en los cálculos de difusión. Para cuantificar mejor su efecto se van a realizar cálculos de elemento en red regular con el código COBAYA. El objetivo de estos cálculos es determinar la incertidumbre de la k -efectiva para los elementos utilizando la matriz de covarianzas exacta que corresponda en cada caso y comparando el resultado con el que se obtiene utilizando la matriz del elemento tipo UO_2 . Esto permite ilustrar si llegado el caso se pudiese utilizar la matriz de este elemento como una matriz estándar para los cálculos UQ.

En la tabla 7.9 se muestran los resultados de k -efectiva y su incertidumbre. Al no variar la librería de secciones eficaces no se producen variaciones en el valor de k -efectiva, sino sólo en la incertidumbre en función de que matriz de covarianzas que se utilice a la hora de aplicar la regla del sándwich.

Tipo de elem.	Nivel de quemado	Matriz de cov. utilizada	k_{eff}	$\Delta k/k$ (%)
$UO_2 + Gd$	Fresco	$UO_2 + Gd$ Fresco	1.15565	0.634
		UO_2 Fresco	1.15565	0.586
$UO_2 + Gd$	Quemado	$UO_2 + Gd$ Quemado	0.92815	0.494
		UO_2 Quemado	0.96528	0.470
MOX	Fresco	MOX Fresco	1.16375	0.523
		UO_2 Fresco	1.16375	0.619
MOX	Quemado	MOX Quemado	0.93962	0.585
		UO_2 Quemado	0.93962	0.530

Tabla 7.9: Cálculo de la incertidumbre de la k -efectiva para dos tipos de elementos utilizando diferentes matrices de covarianzas

Se comprueba que para ambos elementos el efecto de la matriz es muy destacable llevando a valores muy diferentes cuando se usa la matriz que no le corresponde. Por ello, se descarta la idea de utilizar una única matriz, sino que cada tipo de elemento debe incluir su correspondiente matriz de covarianzas en la librería. Finalmente, se comprueba con estos cálculos que la incertidumbre de la k -efectiva disminuye con el nivel de quemado para el

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Figura 7.12: Comparación de las matrices de correlación para diferentes tipos de elementos

elemento con Gd, en línea con lo presentado en [105]. Sin embargo para el elemento con combustible tipo MOX el comportamiento es el contrario.

7.4.3. Influencia de la vecindad

En la aproximación estándar, las secciones eficaces en pocos grupos se evalúan mediante cálculos de elemento en red regular, es decir, con condiciones de contorno de corriente neta nula, asumiéndose que tienen validez cuando ese elemento en el interior del núcleo no tiene esas condiciones de contorno. Efectivamente, cuando los elementos combustibles vecinos son muy diferentes entre sí, la condición de corriente neta nula impuesta puede ser muy diferente de la condición de contorno real del elemento en el núcleo.

Se pueden calcular entonces parámetros homogeneizados en configuraciones llamadas *color-set* o bien aplicar correcciones a los parámetros homogeneizados en red regular para tener en cuenta este efecto. Los *color-set* pueden ser unidimensionales (*colorset-1D*), como el representado en la figura 7.13, que corresponde al modelo estándar utilizado en análisis de LWR para modelizar la presencia del reflector; las condiciones de contorno son reflectivas en todas las interfaces excepto a la derecha, donde se aplica condición de contorno de vacío. O pueden ser bidimensionales (*colorset-2D*), como el representado en la figura 7.14, empleándose para modelizar elementos en el interior del núcleo; las condiciones de contorno son reflectivas en todas las interfaces.

Figura 7.13: Representación esquemática del modelo de *colorset-1D*

A continuación se va a analizar el efecto de la vecindad en el cálculo de las secciones eficaces y sus covarianzas para el elemento combustible de referencia. Para ello se van a comparar las incertidumbres y correlaciones de las secciones eficaces en tres casos diferentes: red regular, *colorset-1D* y *colorset-2D*, siguiendo las especificaciones del *benchmark* de UAM. El *colorset-2D* consiste en una configuración donde un elemento tiene el control insertado y está rodeado por elementos que no lo tienen, siguiendo una disposición de tablero de ajedrez.

En la tabla 7.10 se muestran los valores promedio de las secciones eficaces y sus incertidumbres para el elemento de referencia cuando está en red regular, al lado de un reflector, o en una configuración de *colorset-2D*. Entre los distintos casos, lo único que varía es el flujo

unrodded	unrodded	unrodded
unrodded	rodded	unrodded
unrodded	unrodded	unrodded

Figura 7.14: Representación esquemática del modelo de *colorset-2D*

Parámetro	Caso Referencia		<i>Colorset-1D</i>		<i>Colorset-2D</i>	
	Valor prom.	$\Delta R/R$ (%)	Valor prom.	$\Delta R/R$ (%)	Valor prom.	$\Delta R/R$ (%)
$\Sigma_{abs,1}$	1.096E-02	0.9618	1.044E-01	0.9631	1.093E-02	0.9955
$\Sigma_{abs,2}$	1.343E-01	0.1710	1.334E-01	0.1725	1.342E-01	0.1689
$\nu \Sigma_{fis,1}$	9.055E-03	0.6263	8.784E-03	0.6812	9.036E-03	0.6232
$\nu \Sigma_{fis,2}$	1.856E-01	0.4962	1.849E-01	0.4864	1.856E-02	0.4850
$\Sigma_{disp1 \rightarrow 2}$	1.723E-02	1.4179	1.603E-02	1.4462	1.716E-01	1.4676
$\Sigma_{disp2 \rightarrow 1}$	1.912E-03	0.4796	1.915E-03	0.4779	1.920E-03	0.4703
D_1	1.494	2.650	1.524	2.652	1.496	2.70
D_2	3.578E-01	0.3012	3.575E-01	0.2925	3.577E-01	0.2934

Tabla 7.10: Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes configuraciones

Figura 7.15: Variación de las incertidumbres de las secciones eficaces con la configuración

neutrónico de pesado, solución del cálculo de transporte, que se utiliza para homogeneizar y colapsar las secciones eficaces del elemento analizado.

Las variaciones más significativas de las incertidumbres se producen en el caso del *colorset*-1D sobre todo en las constantes del grupo rápido, mientras que las incertidumbres del elemento en red regular y en *colorset*-2D son muy similares. En la figura 7.15 se comparan las incertidumbres para las tres configuraciones.

En la figura 7.16 se muestran las matrices de correlación para las tres configuraciones consideradas. Se puede comprobar que, si bien entre el elemento en red regular y en *colorset*-2D no se producen cambios importantes, en el caso del *colorset*-1D las variaciones son más destacables, sobre todo en las secciones eficaces de dispersión. Ello quiere decir que las covarianzas son notablemente diferentes en esta configuración, lo que implica que al adoptar habitualmente las secciones eficaces y sus incertidumbres y correlaciones correspondientes al caso de red regular se incurre en cierto error, especialmente en los elementos periféricos en cálculos UQ.

La existencia de estas diferencias en la dispersión se justifica analizando la dependencia del coeficiente de sensibilidad por ejemplo, de la k -infinito con respecto a la dispersión en el hidrógeno, con la energía. En la figura 7.17 se muestra este coeficiente para las tres configuraciones en 252 grupos de energía. Se observa como para el caso del *colorset*-1D existe un cambio en el espectro, al haber una región en la zona de altas energías donde el valor del coeficiente de sensibilidad invierte su tendencia respecto a los otros dos casos. Ello se debe a la vecindad con el reflector y la mayor presencia de agua hace que haya una

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Figura 7.16: Comparación de las matrices de correlación para diferentes configuraciones

Figura 7.17: Variación del coeficiente de sensibilidad de la k -infinito con respecto a la dispersión del hidrógeno para diferentes configuraciones

mayor tasa de dispersiones. Este cambio para el *colorset-1D* en la zona de altas energías modifica también el valor integral del coeficiente de sensibilidad, y se aprecia que para esta configuración tiene un valor más alto comparado con las otras dos.

Resulta también interesante comparar las correlaciones de la k -infinito con alguna de las secciones eficaces, ya que es de suponer que este parámetro variará mucho de una configuración a otra. En la figura 7.18 se representan estas correlaciones con todas las secciones eficaces consideradas y con el coeficiente de difusión. Se puede comprobar que en la mayoría de los casos se produce una enorme variación para la configuración de *colorset-1D*, tanto en el valor de la correlación como en el signo de la misma. Es especialmente relevante el caso de las correlaciones con las secciones eficaces de dispersión y el coeficiente de difusión, donde la presencia del agua del reflector al lado del elemento combutsible provoca el cambio de la correlación con los parámetros a los que más afecta la mayor proporción de agua en la vecindad. Estos cambios reflejan que la aproximación empleada habitualmente de utilizar, tanto secciones eficaces como correlaciones, computadas en un cálculo de red regular no es satisfactoria si se quieren propagar incertidumbres, especialmente en los elementos periféricos ubicados adyacentes al reflector.

Figura 7.18: Variación de las correlaciones de la k-infinito con las secciones eficaces al modificar la configuración

7.4.4. Influencia de las condiciones de operación

La dependencia de las secciones eficaces con las variables de realimentación termo-hidráulicas es muy acusada de manera que lo habitual en una librería es proporcionar los valores de las secciones eficaces para diferentes combinaciones de variables termo-hidráulicas. Sin embargo, no se sabe *a priori* como es la dependencia, si la hay, de las incertidumbres y correlaciones con dichas variables. Típicamente se consideran como variables la densidad y temperatura del moderador, temperatura del combustible y la concentración de boro disuelto en el refrigerante. En esta sección se estudiarán las variaciones producidas en las incertidumbres de las secciones eficaces homogeneizadas por la variación de cada una de las variables. Para ello, deben modificarse el valor de todas ellas, que hasta el momento ha sido siempre el correspondiente a condiciones de HZP (incluidas en la tabla 6.1) y 2600 ppm de boro. Para ello se irán modificando individualmente cada una de las variables, para evitar la aparición de efectos cruzados, de acuerdo a los siguientes criterios:

- Elevación de la temperatura del combustible a 1600K, que sería un valor extremo que se pudiera alcanzar en puntos calientes en la operación de un reactor.
- Dilución total del boro en el refrigerante hasta llegar a 0 ppm
- Modificación de las condiciones del moderador hasta condiciones de saturación, que

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

para los valores nominales de operación del reactor de TMI-1 se corresponden con 617K de temperatura y una densidad de 598.6 kg/m^3 .

De manera que se irán realizando separadamente cada uno de los mencionados cambios para estudiar el efecto individual que cada uno de ellos implica. Nuevamente se aplica la secuencia SAMPLER en cada uno de los casos con 900 muestras y un análisis estadístico posterior.

La tabla 7.11 incluye los valores promedio de k-infinito, secciones eficaces homogeneizadas y factores de discontinuidad para cada uno de los supuestos así como sus valores de incertidumbre. En la figura 7.19 se comparan los valores de incertidumbre con respecto al caso de referencia. Se aprecia que apenas hay variaciones significativas, siendo la única destacable la que se produce en la sección eficaz de *up-scattering* al cambiar la temperatura del combustible.

Parámetro	Variando T ^a comb.		Variando conc. boro		Variando conds. moder.	
	Valor prom.	$\Delta R/R(\%)$	Valor prom.	$\Delta R/R(\%)$	Valor prom.	$\Delta R/R(\%)$
k_{inf}	1.13958	0.5492	1.41710	0.5195	1.17992	0.5722
$\Sigma_{abs,1}$	1.144E-02	0.9893	1.040E-02	0.9513	1.045E-02	1.001
$\Sigma_{abs,2}$	1.333E-01	0.1721	1.103E-01	0.2112	1.206E-01	0.1806
$\nu\Sigma_{fis,1}$	9.040E-03	0.6309	9.113E-03	0.6219	8.777E-03	0.6252
$\nu\Sigma_{fis,2}$	1.840E-01	0.4962	1.917E-01	0.4946	1.763E-01	0.4971
$\Sigma_{disp1\rightarrow2}$	1.698E-02	1.426	1.777E-02	1.418	1.285E-02	1.492
$\Sigma_{disp2\rightarrow1}$	2.729E-03	0.7746	1.614E-03	0.4888	2.163E-03	0.4696
D_1	1.496	2.658	1.493	2.651	1.642	2.740
D_2	3.586E-01	0.2986	3.560E-01	3.001	4.412E-01	0.3261
f_1	9.994E-01	0.0269	9.894E-01	0.0360	9.955E-01	0.0206
f_2	9.615E-01	0.0251	9.442E-01	0.0281	9.587E-01	0.0250

Tabla 7.11: Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes condiciones de operación

Respecto a las matrices de correlación se muestra en la figura 7.20 la comparación entre los casos junto con el de referencia. Se comprueba que las mayores variaciones se producen en las correlaciones de la k-infinito con las diferentes secciones eficaces, especialmente para el supuesto en el que la concentración de boro disuelta es nula, donde la correlación de la k-infinito con la sección eficaz de absorción del grupo térmico aumenta mientras que con la del grupo rápido disminuye respecto al caso de referencia. También cambia considerablemente, la correlación con el coeficiente de difusión del grupo rápido, que pasa de valer 0.41 en el caso de referencia a 0.28 cuando no hay boro disuelto.

Figura 7.19: Comparación de los valores de incertidumbre de las secciones eficaces homogeneizadas con las condiciones de operación

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Figura 7.20: Comparación de las matrices de correlación para diferentes condiciones de operación

7.4.5. Influencia del nivel de homogeneización

El análisis que se ha realizado hasta el momento ha sido siempre comparando, tanto incertidumbres como matrices de correlación, correspondientes a cálculos *lattice* homogeneizando a nivel nodal. Sin embargo, si se desea llevar a cabo cálculos *pin-by-pin* es necesario homogeneizar a nivel de celda. Como se explicó en el capítulo 5 la homogeneización a nivel de celda implica considerar cada *pin-cell* como una región independiente de homogeneización, de forma que para el caso de referencia que estamos considerando, al ser de configuración 17x17 (es decir, nodos de 8x8) las dimensiones de las matrices se multiplicarán por un factor 64 ya que se deben considerar correlaciones no sólo entre reacción y grupo de energía sino también entre regiones de homogeneización.

A la hora de comparar incertidumbres se debe especificar por tanto a que región de homogeneización se corresponde. En la tabla 7.12 se comparan los valores nominales e incertidumbres de las secciones eficaces homogeneizadas para una celda de tubo guía (concretamente el tubo de instrumentación central del elemento) y para la celda de combustible adyacen-

Parámetro	Tubo guía		Celda de UO_2	
	Valor prom.	$\Delta R/R$ (%)	Valor prom.	$\Delta R/R$ (%)
$\Sigma_{abs,1}$	1.356E-03	1.140	1.182E-02	0.950
$\Sigma_{abs,2}$	4.896E-02	0.207	1.417E-01	0.186
$\nu\Sigma_{fis,1}$	0	0	9.883E-03	0.627
$\nu\Sigma_{fis,2}$	0	0	2.100E-01	0.498
$\Sigma_{disp1\rightarrow2}$	2.761E-02	1.435	1.655E-02	1.395
$\Sigma_{disp2\rightarrow1}$	1.920E-03	0.324	1.801E-03	0.498
D_1	1.783	1.984	1.478	2.670
D_2	3.097E-01	0.243	3.630E-01	0.309

Tabla 7.12: Comparación de los valores de secciones eficaces y sus incertidumbres para diferentes regiones de homogeneización en cálculos *pin-by-pin*

te. En la figura 7.21 se comparan dichos valores con los del caso de referencia donde la homogeneización es nodal. Se aprecia que las diferencias más significativas se encuentran con la celda de tubo guía, que presenta una incertidumbre notablemente menor para el coeficiente de difusión del grupo rápido y ligeramente superior en la absorción, también del grupo rápido.

La matriz de correlaciones se representa en la figura 7.22, que como hemos mencionado anteriormente presenta una dimensión de 640x640 al considerar 5 reacciones (absorción, producción, dispersión, coeficiente de difusión y factores de discontinuidad), 2 grupos de energía (rápido y térmico) y 64 regiones de homogeneización.

Una de las desventajas de los cálculos *pin-by-pin* ha sido históricamente la mayor carga computacional que suponen debido al mayor consumo de tiempo de cálculo y memoria utilizada. Sin embargo dicha limitación se va mitigando cada vez más con máquinas más potentes. Como ejemplo, la construcción de la matriz de correlaciones para un elemento a nivel nodal con 900 historias emplea 60 minutos de cálculo mientras que a nivel *pin-by-pin* el tiempo se incrementa a casi 180 minutos, lo que implica un factor de 3 veces más¹.

Las diferencias en términos de tiempo y de espacio de memoria empiezan a ser significativas cuando se llevan a cabo cálculos de núcleo completo, donde se tienen en cuenta todos los elementos del núcleo. Ello se aborda en la siguiente sección.

¹En una máquina tipo SIE core Ladon Abu-Dhabi de 120 núcleos adquirido por la UPM gracias al proyecto de propagación de incertidumbres con el Consejo de Seguridad Nuclear (CSN)

7.4. Dependencia de las covarianzas en las librerías avanzadas

Figura 7.21: Variación de las incertidumbres en las secciones eficaces con el nivel de homogeneización

Figura 7.22: Matriz de correlaciones para un elemento homogeneizando a nivel *pin-by-pin*

7.5. Librería avanzada para un núcleo completo

En las secciones anteriores se ha caracterizado cómo es una librería avanzada de secciones eficaces para el caso particular de un elemento combustible. Sin embargo, si se quieren llevar a cabo cálculos UQ a nivel de núcleo completo es necesario considerar todos los elementos combustibles que conformen ese núcleo. Remitiéndonos una vez más al *benchmark* de UAM recordemos que el núcleo de TMI-1 está compuesto por 11 tipos diferentes de elementos más 7 tipos de control junto con el reflector, lo que hacen 19 tipos diferentes de elementos.

En la figura 7.23 se comparan las incertidumbres en las secciones eficaces para tres elementos de los que conforman el núcleo de TMI-1. Concretamente se han escogido 3 de los 11 listados en la tabla 6.2. Para tratar de que sean representativos se han elegido los 3 con características más diferentes entre sí en cuanto a enriquecimiento, presencia de venenos consumibles y/o gadolinio; que son el elemento tipo 2, el tipo 6 (que es el de referencia) y el tipo 11. Como se puede apreciar las incertidumbres son muy similares para los tres tipos de elementos debido a que no hay diferencias muy significativas entre los elementos de TMI-1, motivo por el cual en la sección 7.4.2 se escogieron otros elementos combustibles.

Figura 7.23: Variación de las incertidumbres en las secciones eficaces con el tipo de elemento combustible para el núcleo de TMI-1

Para poder propagar las incertidumbres de las secciones eficaces a los resultados en un cálculo de núcleo es necesario considerar una matriz de covarianzas global que tenga en cuenta las correlaciones entre diferentes elementos/celdas del núcleo. Este hecho ya fue observado por los miembros del GRS y reportado en una de las reuniones de UAM [71]. En

Figura 7.24: Matriz de correlaciones completa a nivel nodal

[20] se comprueba que el hecho de usar o no la matriz de correlaciones completa multiplica por 2 el valor de incertidumbre en la k -efectiva.

Para el caso concreto de TMI-1 la matriz de correlaciones global se representa en la figura 7.24 cuando se homogeneiza a nivel nodal, lo que implica unas dimensiones de 190×190 . En el caso de homogeneizar *pin-by-pin* las dimensiones serían de 12160×12160 (19 elementos, 64 celdas por elemento, 10 reacciones). Como se puede suponer el manejo de ambas matrices es muy diferente debido sobre todo a la memoria que se ocupa en cada caso, siendo 540 Kb y 2 Gb respectivamente. Ello repercute también en tiempo de cálculo.

7.6. Conclusiones

Resulta conveniente sintetizar todas las conclusiones obtenidas tras el extenso análisis efectuado en este capítulo. Recordemos que el objetivo era la propagación de incertidumbres, únicamente las debidas a los datos nucleares, a las librerías de secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas. Se han identificado dos metodologías posibles para la propagación de incertidumbres a las secciones eficaces homogeneizadas: por muestreo, utilizando SAMPLER, o determinista con TSUNAMI. Preferentemente se utiliza SAMPLER por permitir la obtención de incertidumbres en todas las respuestas. Un primer análisis de los resultados para el elemento de referencia ha permitido concluir:

- Las secciones eficaces se ajustan todas ellas de acuerdo a una distribución normal como muestran los histogramas, lo que quiere decir que la desviación típica es el parámetro adecuado para caracterizar la incertidumbre.

- Los valores de incertidumbre de las secciones eficaces obtenidos tanto por SAMPLER como por TSUNAMI son muy similares entre sí, lo que demuestra que la aproximación lineal aplicada por teoría de perturbaciones es válida para las secciones eficaces. También se obtiene que las incertidumbres de las secciones eficaces son mayores en el grupo rápido que en el térmico.
- Las correlaciones obtenidas con TSUNAMI-IP son también muy similares a las obtenidas con SAMPLER. Las correlaciones más destacadas son entre la k -infinito y las secciones eficaces de producción neutrónica (correlación positiva) y absorción rápida (negativa). También se producen altas correlaciones entre el coeficiente de difusión, el factor de discontinuidad y la sección eficaz de dispersión.

Posteriormente se ha estudiado la influencia sobre las incertidumbres y correlaciones de diferentes variables obteniéndose que:

- El efecto de la matriz de covarianzas de los datos nucleares no es despreciable, encontrándose diferencias tanto en incertidumbres como en correlaciones entre la correspondiente a la librería ENDF-B/VII.0 y a la ENDF-B/VII.1
- El tipo de elemento combustible, caracterizado por su combustible inicial y el nivel de quemado, que variará su composición isotópica, influyen notablemente en las incertidumbres. Elementos con la presencia de venenos consumibles de Gd suelen presentar mayores incertidumbres en las secciones eficaces mientras que los elementos con combustible tipo MOX mayor en la k -infinito. Se comprueba asimismo que la incertidumbre de la k -infinito se reduce con el quemado excepto en los elementos tipo MOX. Las correlaciones presentan cambios *a priori* pequeños pero cálculos elementales UQ muestran que no se debe aplicar una matriz de covarianzas estándar en todos los casos ya que los resultados obtenidos son muy diferentes.
- No se producen diferencias significativas en las incertidumbres cuando se varía la vecindad, lo que indica que la aproximación empleada habitualmente al considerar red regular es válida. Sin embargo en las correlaciones se aprecian diferencias muy abultadas, tanto de magnitud como de signo, entre la configuración *colorset* 1D y las demás. Ello quiere decir que para el caso de elementos periféricos, al lado del reflector, se incurre en cierto error al considerar el modelo de red regular.
- Las condiciones locales de operación no alteran significativamente las incertidumbres de las secciones eficaces. Sin embargo, las correlaciones sí se ven afectadas, especialmente al variar la concentración de boro.
- Para cálculos *pin-by-pin* la homogeneización a nivel de celda multiplica la dimensión de la matriz al considerar correlaciones entre reacción, grupo de energía y región de homogeneización. La estructura individual de las matrices correspondientes a celdas de combustible son bastante similares entre sí, resultando las incertidumbres de las secciones eficaces muy semejantes a las del caso de homogeneización nodal.
- En cálculos de propagación de incertidumbres a nivel de núcleo completo se exige la utilización de una matriz de covarianzas completas que incluya correlaciones entre

diferentes regiones de homogeneización del núcleo, por ello la utilización de cálculos *pin-by-pin* para ello no es viable a día de hoy.

Capítulo 8

Propagación de incertidumbres tecnológicas a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas

Una vez analizada la propagación de incertidumbres debidas a los datos nucleares, en este capítulo se va a hacer lo propio con las incertidumbres tecnológicas. Se trata de evaluar el impacto en las librerías de secciones eficaces homogeneizadas de las incertidumbres en aquellas variables afectadas de tolerancias de fabricación. Las variables ligadas a la geometría que pueden tener tolerancias son el radio de la pastilla de combustible, el espesor del huelgo y el espesor de la vaina; las variables ligadas a la isotopía inicial son la densidad de la pastilla y su enriquecimiento. Así mismo se estudia la correlación entre las incertidumbres tecnológicas y las debidas a los datos nucleares, para analizar si son independientes y pueden evaluarse separadamente.

8.1. Incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial

Las configuraciones analizadas son las correspondientes a TMI-1 del *benchmark* de UAM, ya que se dispone de los datos necesarios en las especificaciones. Se suministran las siguientes incertidumbres tecnológicas en términos de 3sigma, siguiendo los estudios de [27]; por otra parte se especifica que las PDFs para las distintas variables pueden asumirse como distribuciones normales, siguiendo las conclusiones de Macian et al. [95]:

1. Densidad del combustible $\pm 0,17 \text{ g/cm}^3$
2. Diámetro de la pastilla de combustible $\pm 0,013 \text{ mm}$
3. Espesor del huelgo $\pm 0,024 \text{ mm}$
4. Espesor de la vaina $\pm 0,025 \text{ mm}$

5. Concentración de $U^{235} \pm 0,00224 w/o$

Es importante notar en relación con la isotopía, que no se evalúan sus incertidumbres a lo largo del quemado, ni por tanto el impacto de dichas incertidumbres en las librerías de secciones eficaces, ya que, como se ha comentado con anterioridad, la propagación de incertidumbres en cálculos acoplados de transporte y quemado está fuera del alcance de esta tesis.

Estas variables se tratan de manera independiente entre sí. La justificación de esta elección se encuentra en el proceso de fabricación y control de las pastillas de combustible, que se resume a continuación.

8.1.1. Proceso de fabricación de las pastillas de combustible

En primer lugar conviene anotar que el objetivo de este apartado no es llevar a cabo una revisión profunda y detallada sobre el proceso de fabricación de las pastillas de combustible, sino un resumen somero para ilustrar el control que se realiza sobre algunas de las variables anteriores. Más información puede encontrarse en las páginas webs de ENUSA y FORO NUCLEAR.

La primera parte del proceso de fabricación consiste en un proceso cerámico. Primeramente el polvo de óxido de uranio (UO_2), recibido en bidones, es mezclado con un material limpio reciclado (U_3O_8), que es un formador de poros. Seguidamente, se hace un primer prensado para formar una pastilla con una densidad superior a la deseada. Esta pastilla se tamiza para generar un polvo granulado que tiene buenas características de fluidez. El polvo granulado se mezcla con un polvo lubricante en un homogeneizador con objeto de favorecer la formación de la pastilla en el prensado.

A continuación las pastillas prensadas pasan a un proceso de sinterizado a alta temperatura para obtener las pastillas con la apropiada densidad e integridad. Tras el sinterizado se efectúa el control de calidad sobre la densidad de las pastillas. El siguiente paso es el rectificado para ajustar el diámetro de la pastilla a las especificaciones técnicas. Por último, las pastillas son examinadas superficialmente con métodos láser y sistemas robotizados de inspección.

La segunda parte del proceso consta de un proceso mecánico para la fabricación de los elementos combustibles, donde las pastillas se introducen en las vainas de zircaloy y se sellan con sendos tapones en los extremos. Posteriormente las barras se van insertando en las rejillas. Este conjunto se cierra con los cabezales superior e inferior y pasan a una fase de inspección.

Como se ve, el control que se hace de la densidad de la pastilla es anterior al de la dimensión de la misma. Por ello, no es necesario considerar ninguna relación entre ellas ni modificar el valor de la densidad en los casos en los que el radio de la pastilla sea mayor al nominal, sino que se pueden considerar y muestrear de manera independiente.

Figura 8.1: Esquema de cálculo para la generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos y su matriz de covarianzas muestreando variables geométricas e isotopía NEMTAB

8.2. Propagación de incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial

La metodología empleada para la propagación se basa en un método de muestreo aleatorio o Monte Carlo, donde tras muestrear las distintas PDFs de las variables inciertas, se llevan a cabo una serie de cálculos de transporte con el código *lattice* NEWT, cada uno basado en una muestra de los valores obtenidos, para disponer de un conjunto de secciones eficaces, cuyo análisis estadístico permite determinar el impacto de las tolerancias. Un diagrama del proceso se presenta en la figura 8.1. Para el muestreo de estas variables se han utilizado como herramientas auxiliares *scripts* en *bash* para la generación de los *inputs* de NEWT, su ejecución y tratamiento de los *outputs*.

8.2.1. Cálculos de *pin-cell*

En la figura 6.3 del capítulo 6 se muestran las características de una *pin-cell* correspondiente al Ejercicio I-1 de PWR del *benchmark* de UAM. En la Tabla 8.1 se presentan los valores nominales y desviaciones típicas de las variables inciertas que se muestrean. La Tabla 8.2 muestra los principales resultados obtenidos en relación con k -infinito y las secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas en dos grupos.

Básicamente, las incertidumbres en las variables geométricas modificarán el ratio entre el volumen del moderador y el volumen del combustible, lo que afecta al espectro neutrónico y por consiguiente a las tasas de reacción. Por otra parte, la incertidumbre en el enriqueci-

8.2. Propagación de incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial

	Unidades	Valor nominal	Desviación típica
Diámetro de la pastilla combustible	cm	0.9391	4.33E-04
Espesor del huelgo	cm	0.00955	8E-04
Espesor de la vaina	cm	0.0673	8.33E-04
Densidad del combustible	g/cm^3	10.2083	5.67E-02
Enriquecimiento de U-235	w/o	4.85	7.467E-04

Tabla 8.1: Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas

	Media	Incertidumbre($\Delta R/R\%$)	p-valor (prueba de normalidad)
k_∞	1.20598	3.992E-02	0.9741
$\Sigma_{abs,1}$	1.160E-02	4.003E-01	0.4851
$\Sigma_{abs,2}$	1.383E-01	1.827E-01	0.4421
$\nu\Sigma_{fis,1}$	9.683E-03	5.031E-01	0.4851
$\nu\Sigma_{fis,2}$	2.046E-01	4.393E-01	0.728
$\Sigma_{disp1\rightarrow2}$	1.597E-02	4.211E-01	0.6183
$\Sigma_{disp2\rightarrow1}$	2.014E-03	3.917E-01	0.1724
D_1	1.466	2.904E-01	0.2251
D_2	3.688E-01	2.626E-01	0.07834

Tabla 8.2: Valores nominales e incertidumbres de las secciones eficaces

miento y densidad del combustible modificará el factor de reproducción (neutrones nacidos por fisión por cada neutrón absorbido en el combustible) y el ratio entre el número de átomos de moderador y combustible, modificándose las tasas de reacción.

Se observa que la incertidumbre menor corresponde al parámetro k-infinito, parámetro integral que depende del balance neutrónico global, lo que sugiere que tiene lugar una compensación de efectos que conduce a una menor incertidumbre. Por otra parte, la mayor incertidumbre relativa corresponde a la producción neutrónica en el grupo rápido, que al tener esta sección eficaz un valor muy bajo hace que el valor relativo sea alto. La sección eficaz con menor incertidumbre es la de absorción en el grupo térmico. La tabla 8.2 también incluye el p-valor que se obtiene al hacer la prueba estadística de Pearson (χ^2) para el análisis de normalidad. Como el p-valor es siempre mayor que el valor habitual empleado de α no se rechaza la hipótesis nula y todos los parámetros se ajustan a una distribución normal.

La comparación entre las incertidumbres tecnológicas y las debidas a los datos nucleares se comparan en la figura 8.2. Se aprecia como en todos los casos la incertidumbre debida a los datos nucleares es mayor que la tecnológica, si bien en las secciones eficaces con menor incertidumbre ambas son muy similares. En cambio, en la constante k-infinito es un orden de magnitud mayor la incertidumbre debida a los datos nucleares por la compensación

Figura 8.2: Comparación entre incertidumbres tecnológicas y debidas a los datos nucleares en el caso de la celda

de efectos mencionada anteriormente. Se comprueba por tanto que, en el estado actual de conocimiento de los datos nucleares, las incertidumbres en los datos nucleares constituyen una fuerte de incertidumbre más importante que las variables tecnológicas.

8.2.2. Cálculos de elemento

Con el fin de analizar un caso más conservador, se han realizado cálculos de elemento combustible, donde se suponen que todas las celdas del elemento están afectadas por las incertidumbres tecnológicas, y por tanto están definidas por variables inciertas. En la figura 6.4 del capítulo 6 están representadas las especificaciones del elemento combustible para el que se realiza este ejercicio, correspondiente al Ejercicio I-2 del *benchmark* de UAM. En la tabla 8.3 se incluyen los valores nominales y desviaciones típicas de las variables que se muestrean. Se sigue el mismo procedimiento que en el caso anterior, pero todas las celdas se ven afectadas por el muestreo.

Los principales resultados se recogen en la tabla 8.4. Se observa que las incertidumbres en las secciones eficaces son similares al caso de celda, y mayores que la incertidumbre en el parámetro k-infinito.

Se observa que la incertidumbre menor corresponde al parámetro k-infinito nuevamente, siendo las mayores en las secciones eficaces de producción y de dispersión. La diferencia

8.2. Propagación de incertidumbres en variables geométricas e isotopía inicial

	Unidades	Valor nominal	Desviación típica
Radio de la pastilla combustible	cm	0.9391	4.33E-04
Espesor del huelgo	cm	0.00955	8E-04
Espesor de la vaina	cm	0.0673	8.33E-04
Densidad del combustible	g/cm^3	10.2083	5.67E-02
Densidad del combustible en barras con Gd	g/cm^3	10.144	5.67E-02
Enriquecimiento de U-235	w/o	4.85	7.467E-04

Tabla 8.3: Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas

	Media	Incertidumbre($\Delta R/R\%$)	p-valor (prueba de normalidad)
k_{∞}	1.16434	6.563E-02	0.4960
$\Sigma_{abs,1}$	1.096E-02	3.809E-01	0.6946
$\Sigma_{abs,2}$	1.343E-01	1.050E-01	0.3609
$\nu\Sigma_{fis,1}$	9.054E-03	4.989E-01	0.7463
$\nu\Sigma_{fis,2}$	1.857E-01	4.328E-01	0.5402
$\Sigma_{disp1\rightarrow2}$	1.724E-02	3.604E-01	0.5625
$\Sigma_{disp2\rightarrow1}$	1.920E-03	3.600E-01	0.8378
D_1	1.492	2.710E-01	0.4742
D_2	3.578E-01	2.259E-01	0.0693

Tabla 8.4: Valores nominales e incertidumbres (desviaciones típicas) de las variables tecnológicas inciertas consideradas

Figura 8.3: Comparación entre incertidumbres tecnológicas y debidas a los datos nucleares para el caso de elemento combustible

entre las incertidumbres en las secciones eficaces y la k-infinito vuelve a hacer pensar que se produce una compensación de efectos que provoca la baja incertidumbre en la k-infinito.

Siguiendo la mismos pasos que en el caso de celda se obtienen los resultados mostrados en la figura 8.3, donde se comparan nuevamente incertidumbres relativas en ambos casos.

Se aprecia nuevamente que las incertidumbres debidas a los datos nucleares tienen mayor repercusión, volviendo a suceder que en algunos casos como la k-efectiva y la sección eficaz de dispersión la incertidumbre sea un orden de magnitud mayor en un caso que en otro. En cambio en el resto de parámetros son comparables los valores de incertidumbre obtenidos por ambas fuentes, debida a la suposición de que todas las celdas se ven afectadas por la misma perturbación.

8.3. Análisis de la correlación entre distintas fuentes de incertidumbre

Adicionalmente se ha estudiado el grado de correlación entre las incertidumbres debidas a los datos nucleares y las incertidumbres tecnológicas. Para ello se ha construido una matriz de correlaciones a partir de los diferentes muestreos realizados en cada caso. Es decir, para cada sección eficaz se tienen dos vectores diferentes con los 900 valores resultantes de las diferentes ejecuciones de NEWT. El primero de ellos tiene los valores cuando se muestrean

Figura 8.4: Matriz de correlaciones entre parámetros (k-infinito y secciones eficaces homogeneizadas) obtenidos muestreando los datos nucleares (DN) y variables tecnológicas (IT)

los datos nucleares y el segundo cuando se muestrean las variables tecnológicas. Se pueden considerar como variables diferentes y determinar por tanto el coeficiente de correlación entre ambas. Este proceso puede hacerse con todos los pares de parámetros considerados y se obtiene la matriz de correlaciones mostrada en la figura 8.4.

Se puede comprobar que el nivel de correlación entre ambas fuentes de incertidumbre es mínimo en todos los casos, lo cual justifica que se puedan muestrear de manera independiente ambas variables (datos nucleares y variables tecnológicas).

Capítulo 9

Propagación de incertidumbres debidas a métodos y modelos a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas

En este capítulo se abordan las incertidumbres en las librerías de secciones eficaces homogeneizadas debidas a los métodos y modelos empleados en el procedimiento de su generación, al aplicar el esquema estándar. Como se mencionó en el capítulo 6 este esquema implica tres niveles sucesivos de cálculo: *cell physics*, *lattice physics* y *core physics* en los cuales se van añadiendo progresivamente nuevas incertidumbres asociadas con las aproximaciones realizadas.

Los cálculos de celda o *cell physics* conducen a generar librerías en multigrupos dependientes del problema, es decir, están asociados a la utilización de la aproximación en multigrupos, y se considera que engloban tanto las aproximaciones realizadas en el procesamiento como en el autoblindaje. La evaluación de los errores asociados a este proceso se lleva a cabo en la sección 9.1.

Los cálculos *lattice* conducen a obtener las secciones eficaces homogeneizadas y colapsadas por elemento o por *pin-cell*, e incluyen una serie de aproximaciones que se analizan en la sección 9.2.

Para generar las librerías con esas secciones eficaces para cálculos de núcleo completo es necesario determinar los puntos de la malla de las variables de realimentación en los que se aportarán los valores calculados. Los errores que introducirá la elección de los puntos de la malla se propagará a los resultados finales en los cálculos de núcleo, pero por estar ligados a la generación de las librerías de secciones eficaces han recibido atención especial en esta tesis. El impacto de estos errores se aborda separadamente, por su extensión, en el capítulo 10.

9.1. Errores asociados a los cálculos de celda

Para evaluar los errores introducidos por la aproximación en multigrupos se ha llevado a cabo una comparación directa de los valores de k -infinito y las secciones eficaces homogeneizadas obtenidas por un cálculo en energía continua y las obtenidas por un cálculo en multigrupos.

Para ello, se ha empleado el sistema SCALE6.2 comparando los resultados del código KENO en energía continua con los del código KENO en multigrupos. KENO, como se ha comentado, es un código de Monte Carlo, y puede funcionar tanto utilizando librerías en energía continua como utilizando librerías en multigrupos. De esta forma, una comparación de los resultados permite evaluar los errores introducidos por la aproximación de multigrupos, resultando una herramienta perfecta para esta evaluación.

Las temperaturas en el caso de los cálculos en multigrupos corresponden a las condiciones de HZP (551K). Las librerías en energía continua se disponen a 565K y a 550K las librerías de dispersión térmica, por lo que se supone que las diferencias debidas a la interpolación en temperatura son despreciables.

Para esta evaluación se han elegido nuevamente las especificaciones del *benchmark* de UAM, concretamente los elementos del ejercicio I-3 para el caso de TMI-1 (tabla 6.2).

En la tabla 9.1 se comparan los resultados de k -infinito entre el cálculo de KENO en energía continua (CE), y empleando la estructura en 56 grupos de energía. En ambos casos la librería de datos nucleares es la ENDF/B-VII.1.

Se aprecia que las diferencias son en todos los casos muy reducidas, estando por debajo de 35 pcm en todos los casos. Ello indica que el modelo de autoblandaje empleado es muy adecuado, tanto en los casos sin control como en los casos donde el control está insertado, para lo cual hay que emplear un modelo particular conocido como *multiregion*. Estos valores son notablemente inferiores a las diferencias debidas a los datos nucleares en términos de pcm en k -infinito. Por ejemplo, para el elemento de referencia analizado en el capítulo 7 donde el valor nominal de k -infinito es de 1.16436 y una incertidumbre relativa de 0,5369 % (tabla 7.1) supone una diferencia de 625 pcm.

En la figura 9.1 se muestra en formato de diagrama de barras los valores de k -infinito obtenidos con KENO en 56 grupos, donde también se ha representado para cada elemento el valor correspondiente en energía continua así como un intervalo de error de amplitud correspondiente a la incertidumbre relativa obtenida con SAMPLER, el cual es un valor cercano al $\pm 0,5\%$. Se observa que en todos los casos el valor de energía continua está contenido en dicho intervalo. Por otra parte, en la figura 9.2 se representa el cociente o ratio entre el valor obtenido en el correspondiente cálculo en multigrupos y el cálculo en energía continua. En este gráfico se aprecian mejor las diferencias que en el anterior comprobándose que en todos los casos los valores se aproximan a la unidad, que sería el caso hipotético donde un cálculo en multigrupos obtuviera la misma k -infinito que el caso en energía continua.

A continuación se van a comparar también los valores en algunas secciones eficaces homogeneizadas. KENO, al tratarse de un código de criticidad fundamentalmente y no ser un código *lattice*, no calcula las secciones eficaces homogeneizadas. Sin embargo, empleando

Tipo de Elemento	KENO-CE	KENO-56g	Diferencia KENO-56g vs. CE
1	1.13494	1.13510	17
2	1.04274	1.04243	-32
3	1.17409	1.17443	34
4	1.16429	1.16455	25
5	1.04559	1.04564	5
6	1.16525	1.16529	4
7	1.17124	1.17156	32
8	1.14060	1.14067	8
9	1.13740	1.13739	-1
10	1.06997	1.06982	-15
11	1.20227	1.20213	-14
1-control	0.89242	0.89244	2
3-control	0.93341	0.93360	19
4-control	0.92124	0.92141	17
6-control	0.92428	0.92423	-5
7-control	0.93061	0.93046	-16

Tabla 9.1: Comparación de valores de k-infinito entre el cálculo en energía continua y en multigrupos con KENO

Figura 9.1: Comparación de valores de k-infinito entre cálculos en multigrupos con KENO

Figura 9.2: Comparación del ratio entre el valor de k-infinito obtenido en un cálculo en multigrupos y en energía continua con KENO

la secuencia TSUNAMI-3D en energía continua sí que se pueden obtener los valores de algunas respuestas definidas. Para los cálculos en multigrupos se puede emplear la tarjeta KMART para obtener las tasas de reacción por material, y con un post-procesado dividiendo por el flujo se pueden obtener los valores de las secciones eficaces. Concretamente, se van a comparar la sección eficaz total y la de fisión, condensadas en dos grupos de energía, ya que con TSUNAMI-3D no se pueden definir respuestas compuestas a partir de sumas o diferencias entre reacciones, como es el caso de la absorción (definida como una absorción efectiva que es la diferencia entre la sección eficaz total y la de reacción ($n, 2n$)).

En la tablas 9.2 y 9.3 se muestran los valores de las secciones eficaces y las diferencias porcentuales entre el cálculo en multigrupos y el cálculo en energía continua, adoptado éste como referencia. Se observa que las diferencias no exceden en ningún caso el valor de 0,5 %. Destaca también el hecho de que para una misma sección eficaz, por ejemplo la total del grupo rápido, las diferencias, en cada caso entre sí, son siempre muy parecidas tanto en valor absoluto como en signo, lo que indica un comportamiento sistemático que se repite en todos los casos.

En la figura 9.3 se representa el ratio entre el valor obtenido (por sección eficaz y tipo de elemento) en el cálculo en multigrupos y en energía continua. Se comprueba que la sección eficaz total y la de fisión, ambas del grupo térmico, son los parámetros que más se aproximan a la unidad. Por su parte la sección eficaz total del grupo rápido siempre se sitúa en torno al valor de 0.995 mientras que la fisión del grupo rápido lo hace en torno al de 1.004.

Tipo de Elemento	KENO-CE				KENO-56g			
	$\Sigma_{tot,1}$	$\Sigma_{tot,2}$	$\Sigma_{fis,1}$	$\Sigma_{fis,2}$	$\Sigma_{tot,1}$	$\Sigma_{tot,2}$	$\Sigma_{fis,1}$	$\Sigma_{fis,2}$
1	5.58E-01	1.40	3.16E-03	6.66E-02	5.56E-01	1.40	3.17E-03	6.67E-02
2	5.48E-01	1.37	3.59E-03	7.86E-02	5.46E-01	1.37	3.60E-03	7.88E-02
3	5.58E-01	1.42	3.65E-03	7.82E-02	5.55E-01	1.42	3.67E-03	7.83E-02
4	5.58E-01	1.41	3.36E-03	7.18E-02	5.56E-01	1.41	3.38E-03	7.19E-02
5	5.48E-01	1.37	3.61E-03	7.93E-02	5.46E-01	1.37	3.62E-03	7.94E-02
6	5.58E-01	1.42	3.58E-03	7.64E-02	5.55E-01	1.42	3.59E-03	7.65E-02
7	5.58E-01	1.42	3.63E-03	7.76E-02	5.55E-01	1.42	3.64E-03	7.77E-02
8	5.58E-01	1.42	3.65E-03	7.72E-02	5.55E-01	1.42	3.66E-03	7.73E-02
9	5.58E-01	1.42	3.62E-03	7.66E-02	5.55E-01	1.42	3.63E-03	7.67E-02
10	5.48E-01	1.37	3.60E-03	7.98E-02	5.46E-01	1.37	3.61E-03	7.99E-02
11	5.58E-01	1.42	3.66E-03	7.92E-02	5.55E-01	1.42	3.68E-03	7.93E-02
1-control	5.51E-01	1.37	3.05E-03	6.84E-02	5.49E-01	1.37	3.07E-03	6.85E-02
3-control	5.50E-01	1.39	3.53E-03	8.03E-02	5.48E-01	1.39	3.55E-03	8.05E-02
4-control	5.50E-01	1.38	3.25E-03	7.38E-02	5.49E-01	1.38	3.27E-03	7.39E-02
6-control	5.50E-01	1.39	3.46E-03	7.84E-02	5.48E-01	1.39	3.47E-03	7.86E-02
7-control	5.50E-01	1.39	3.51E-03	7.97E-02	5.48E-01	1.39	3.52E-03	7.98E-02

Tabla 9.2: Comparación de los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre el cálculo en energía continua y en multigrupos con KENO

Tipo de Elemento	$\Sigma_{tot,1}$	$\Sigma_{tot,2}$	$\Sigma_{fis,1}$	$\Sigma_{fis,2}$
1	-0.48	0.00	0.37	0.15
2	-0.46	-0.27	0.32	0.20
3	-0.48	0.02	0.33	0.15
4	-0.48	0.00	0.39	0.12
5	-0.44	-0.28	0.38	0.20
6	-0.48	0.02	0.36	0.13
7	-0.48	0.01	0.37	0.16
8	-0.48	0.03	0.35	0.10
9	-0.47	0.02	0.37	0.11
10	-0.44	0.05	0.34	0.20
11	-0.48	0.01	0.36	0.15
1-control	-0.44	0.02	0.50	0.18
3-control	-0.44	0.04	0.48	0.22
4-control	-0.43	0.02	0.53	0.19
6-control	-0.43	0.05	0.48	0.16
7-control	-0.44	0.04	0.50	0.20

Tabla 9.3: Diferencias en los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre cálculos en multigrupos y en energía continua con KENO [Valores expresados en %]

9.1. Errores asociados a los cálculos de celda

Figura 9.3: Comparación del ratio en los valores de las secciones eficaces obtenidos entre el cálculo en multigrupos y en energía continua con KENO

9.2. Errores asociados a los cálculos *lattice*

En la sección anterior para evaluar el error introducido por la aproximación en multigrupos se han comparado resultados de un mismo código, KENO, obtenidos con cálculos en energía continua y en multigrupos. A continuación se pretende evaluar el error asociado al cálculo *lattice* para lo cual se compararán resultados de cálculos en multigrupos con la misma estructura pero con dos códigos diferentes: KENO y NEWT.

Los errores asociados al cálculo *lattice* dependerán en gran medida del método de resolución en que esté basado el código y de las opciones de cálculo que éste presente. Para el caso concreto de NEWT, estas opciones van desde el tipo de cálculo (búsqueda de *buckling* o cálculo de k-efectiva), el orden S_N de ordenadas discretas, el orden P_N para el desarrollo en serie de la sección eficaz de dispersión hasta el mallado local utilizado en la definición de cada celda o el número de lados que se impone al definir los diferentes polígonos que representan la pastilla, vaina, etc.

Respecto al tipo de cálculo ya se especificó en el capítulo 5 que en esta tesis se iban a trabajar con cálculos de k-efectiva y no de *buckling*. A continuación se estudiará el efecto de diferentes opciones del cálculo para tratar de establecer unas opciones idóneas, en cuanto a precisión y tiempo de cálculo, comparando los resultados obtenidos para un elemento con una referencia. La referencia será nuevamente un cálculo de Monte Carlo con KENO en energía continua.

Dentro de los parámetros y opciones que intervienen en un cálculo de NEWT se va a estudiar la influencia de los siguientes:

- Orden de ordenadas discretas, S_N . Puede valer 2,4,6,8,10,12,14 ó 16.
- Grado u orden P_N para el desarrollo según polinomios de Legendre del término de dispersiones en los diferentes materiales
- Mallado local de cada una de las *unit* o celdas que se definen. Un mayor refinamiento de este mallado hace que la ecuación se resuelva con mayor detalle y converjan mejor los parámetros de interés al tener mejor caracterizado el dominio pero con un coste en cuanto a tiempo de computación mayor. Los parámetros globales como la k-efectiva admiten mallas relativamente gruesas. Sin embargo si se sabe que el flujo va a presentar una variación pronunciada en el espacio es necesario una malla más refinada. Este mallado debe interseccionar al menos una vez con cada uno de los elementos (cilindros, agujeros, etc.) que se definan en el seno de esa celda.

Definimos a continuación un caso estándar donde cada uno de los parámetros anteriores tienen un valor fijado. Estos valores se establecen en función de las recomendaciones del manual de NEWT, los valores que incluyen por defecto y la experiencia acumulada en el empleo de NEWT.

Para el orden de S_N el valor que por defecto se asigna es 6. Sin embargo, este valor puede resultar algo bajo repercutiendo en inexactitud en los resultados por lo que el valor habitual se incrementa a 10. Respecto al orden P_N la recomendación que dan los desarrolladores

	k-ef	Diferencia k-ef (pcm)	Tiempo ejecución (min)
KENO-CE	1.16525	Referencia	339 (5.6h)
Caso estándar $S_N = 10P_N = 1/3$ 4x4	1.16409	116	2
$S_N = 10P_N = 3$ 4x4	1.16409	116	2.1
$S_N = 16P_N = 1/3$ 4x4	1.16436	89	37.4
$S_N = 10P_N = 1/3$ 16x16	1.16412	113	38.83

Tabla 9.4: Comparación de resultados al variar opciones de cálculo en NEWT

es establecer orden 3 en materiales que sean agua y 1 en el resto. Como es sabido, la dispersión tiene lugar mayormente en el agua, que es quien cumple la misión de moderador en los LWR por el alto poder de moderación que tiene gracias al hidrógeno. Por último, el mallado de referencia que se establece es un 4x4.

A continuación se va a estudiar el efecto de incrementar el orden S_N a 16, el P_N a 3 en todos los materiales y el mallado cambiarlo a un 16x16. En la tabla 9.4 se recogen los diferentes resultados obtenidos para el elemento de referencia (tipo 6) de la lista de elementos del ejercicio I-3 de UAM (tabla 6.2). Se comparan diferencias en el valor de k-efectiva respecto al cálculo de KENO y tiempos de ejecución.

Se aprecia que el efecto del orden de P_N es totalmente inapreciable respecto al establecido en el caso estándar, ya que las dispersiones en el resto de materiales es despreciable. Por el contrario el efecto del orden de S_N es significativo, tanto en mejoría de la precisión del resultado (27 pcm de diferencia respecto al caso estándar) como en aumento de tiempo de computación. Igualmente el tiempo de ejecución con el mallado de 16x16 es muy elevado respecto al caso estándar pero sin que ello implique una mejora en la precisión.

Por todo ello, en función del nivel de convergencia deseado y de los recursos informáticos disponibles se puede plantear la posibilidad de incrementar el orden de ordenadas discretas a 16. Así se ha hecho en los cálculos que se llevan a cabo en esta tesis.

Una vez definidas las opciones del cálculo *lattice* idóneas, procederemos a continuación a evaluar el error asociado al cálculo. En la tabla 9.5 se muestran los valores de k-infinito para todos los elementos obtenidos con KENO y con NEWT, así como la diferencia en pcms entre ambos. Se observa que las diferencias son mayores de 100 pcms en los casos donde hay control insertado y menores de 100 en casi todos de los restantes. En todos los casos se obtienen diferencias negativas, lo que indica que la k-infinito predicha por NEWT es siempre menor que la de KENO. Una comparación de estos valores con los de la tabla 9.1 indica que son mayores los errores cometidos en el propio cálculo *lattice* que los debidos a la aproximación en multigrupos (100-150 pcm frente a 35 pcm).

En la figura 9.4 se representa el ratio entre el valor de k-infinito obtenido por NEWT y por KENO, ambas en 56 grupos de energía. Se aprecia como en este caso la diferencia respecto a la unidad son mayores que en la figura 9.1, lo que muestra de nuevo que las opciones de cálculo en NEWT provocan mayor error que el autoblandaje.

Tipo de Elemento	KENO-56g	NEWT-56g	Diferencia NEWT-KENO
1	1.13510	1.13454	-57
2	1.04243	1.04151	-92
3	1.17443	1.17353	-90
4	1.16455	1.16394	-61
5	1.04564	1.04470	-94
6	1.16529	1.16436	-93
7	1.17156	1.17051	-104
8	1.14067	1.13929	-138
9	1.13739	1.13617	-123
10	1.06982	1.06915	-66
11	1.20213	1.20168	-45
1-control	0.89244	0.89085	-159
3-control	0.93360	0.93212	-148
4-control	0.92141	0.91990	-150
6-control	0.92423	0.92281	-142
7-control	0.93046	0.92905	-141

Tabla 9.5: Comparación de valores de k-infinito entre cálculos en multigrupos con KENO y NEWT

Figura 9.4: Ratio entre el valor de la k-infinito calculada por NEWT y la calculada por KENO

Respecto a las secciones eficaces se muestra en la tabla 9.6 las diferencias porcentuales entre los valores obtenidos por el código NEWT y por KENO, siendo éste último el valor adoptado como referencia para expresar la diferencia. Se aprecia que para la sección eficaz total del grupo rápido las diferencias son menores, y que por lo general para los elementos con control insertado las diferencias se incrementan respecto a los demás elementos. Este incremento es especialmente relevante para la sección eficaz de fisión del grupo rápido donde sobrepasan el 2%.

Una comparación entre las tablas 9.3 y 9.6 muestra que en las secciones eficaces del grupo rápido hay menor diferencia porcentual respecto a la referencia cuando se evalúa el error por el código *lattice* que por la aproximación en multigrupos (excluyendo los casos del control), lo cual es justamente lo contrario a lo que sucede con la k-infinito. En cambio en las secciones eficaces del grupo térmico mantienen el mismo comportamiento que la k-infinito.

Tipo de Elemento	$\Sigma_{tot,1}$	$\Sigma_{tot,2}$	$\Sigma_{fis,1}$	$\Sigma_{fis,2}$
1	0.05	0.27	-0.22	-0.42
2	0.08	0.70	-0.18	-0.68
3	0.07	0.28	-0.15	-0.48
4	0.07	0.27	-0.16	-0.41
5	0.08	0.71	-0.20	-0.68
6	0.07	0.27	-0.17	-0.45
7	0.08	0.28	-0.18	-0.47
8	0.07	0.28	-0.18	-0.47
9	0.07	0.28	-0.17	-0.47
10	0.05	0.38	-0.25	-0.64
11	0.07	0.28	-0.18	-0.44
1-control	0.20	-1.01	2.83	0.05
3-control	0.23	-1.01	2.90	0.01
4-control	0.21	-1.00	2.84	0.03
6-control	0.23	-1.00	2.91	0.03
7-control	0.23	-1.00	2.92	0.03

Tabla 9.6: Diferencias en los valores de las secciones eficaces homogeneizadas entre cálculos de NEWT y de KENO, ambos en 56 grupos de energía [Valores expresados en %]

Capítulo 10

Desarrollo de una metodología para la optimización de mallas de puntos en librerías tabuladas

10.1. Introducción

Las librerías de secciones eficaces homogeneizadas pueden clasificarse principalmente en dos tipos: tablas multidimensionales y librerías parametrizadas. Ambas tienen ventajas e inconvenientes como se explica en [36], en [137] y en [10], y su construcción puede tener un gran impacto en las simulaciones neutrónicas de núcleo completo, como muestra [42] para el análisis de un transitorio de rotura de línea de vapor (MSLB) en un PWR.

Las librerías parametrizadas incluyen modelos más o menos complejos de las dependencias de las secciones eficaces con las variables de estado. La construcción de modelos precisos puede requerir polinomios con gran cantidad de términos y en ocasiones puede resultar poco preciso en ciertos rangos, como se analiza en [118, 43], lo cual constituye la mayor desventaja de este tipo de librerías. Sin embargo, presentan algunas importantes ventajas como la notable reducción de tamaño respecto a las librerías tabuladas y su flexibilidad adicional para incluir correcciones para efectos espectrales.

En [11] se hace una revisión sobre los diferentes modelos y aproximaciones que se han venido utilizando para representar las secciones eficaces como funciones continuas. Por ejemplo, [127] y [44] utilizan un desarrollo en serie de Taylor de segundo orden en las secciones eficaces para reactores del tipo RBMK y BWR respectivamente. La desventaja de este modelo es que su validez se restringe a puntos cercanos a las condiciones nominales, por lo que su empleo en escenarios accidentales no es posible. Otra aproximación empleada en el pasado consistía en aproximar las dependencias de las secciones eficaces empleando el producto tensorial de funciones base unidimensionales. Originalmente esta aproximación sólo permitía considerar a lo sumo tres variables de estado independientes; sin embargo modelos posteriores han permitido su extensión a mayor número de parámetros [36]. Por último, en [11] se lleva a cabo una funcionalización de las secciones eficaces mediante una

interpolación multidimensional de Lagrange a partir de una malla de puntos dispersa y empleando un método de ponderación de residuos.

Las librerías tabuladas multidimensionales constituyen la forma más directa de compilación de secciones eficaces. Se define una malla de puntos que cubre el rango de operación de las variables de estado y se computan las secciones eficaces en esos puntos de malla, conocidos habitualmente como *data-points*. Más adelante, durante el cálculo de núcleo se emplea un algoritmo de interpolación para calcular los valores de las secciones eficaces en cualquier estado a partir de los valores en los *data-points*. Habitualmente se emplea la interpolación lineal debido a que es el algoritmo más sencillo e inmediato de implementar. Sin embargo, si la dependencia de las secciones eficaces con las variables de estado no es lineal, lo cual es bastante habitual, se puede incurrir en error en los resultados. En [130] se desarrolla una metodología original que recurre a una interpolación de alto orden como la spline para cálculos tridimensionales con acoplamiento neutrónico-termo-hidráulico en transitorios de reactores PWR, donde el valor de las variables de estado puede llegar a alejarse bastante de las condiciones nominales.

En cualquier caso, la principal ventaja de las librerías tabuladas es que las dependencias de las secciones eficaces no tienen que ser aproximadas por funciones analíticas, eliminándose el esfuerzo de calcular polinomios precisos. Por el contrario, uno de los mayores inconvenientes es que las tablas sólo pueden considerar relativamente pocas variables de estado para asegurar la practicidad de la librería; y que requerirían un número considerable de puntos de malla para minimizar las incertidumbres debidas a la interpolación lo cual a su vez implicaría un elevado requisito de almacenamiento y de gran número de cálculos *lattice*. En otras palabras, cuanto más próximos están los puntos de malla en una librería tabulada mejor es la precisión en la interpolación pero en cambio va en contra de la practicidad de la librería. Consecuentemente, hay una necesidad de construir una distribución óptima de *data-points*, que dependerá del nivel requerido de precisión.

En la actualidad, ambas aproximaciones se emplean en los códigos de núcleo. Por ejemplo, CORETRAN emplea habitualmente librerías parametrizadas mientras que otros como SIMULATE, CRONOS o DYN3D están preparados para usar librerías tabuladas en sus cálculos. Esto indica que ambas metodologías son adecuadas para el almacenamiento de datos en librerías.

Un método para construir mallas optimizadas para la generación de librerías parametrizadas fue presentado por [137]. En lugar de emplear una malla cartesiana regular para el cálculo de secciones eficaces, un algoritmo basado en secuencias pseudo-aleatorias de Sobol se ha utilizado para ajustar las dependencias de las secciones eficaces a expresiones polinómicas mediante una regresión escalonada. Una aportación importante en este trabajo es la inclusión de la idea de llevar a cabo una optimización en términos del error cometido en la evaluación de cada sección eficaz y fijado arbitrariamente a 0.05 %.

La metodología desarrollada en esta tesis permite la optimización de librerías tabuladas. La optimización se considera en el hecho de construir una distribución de *data-points* regular pero no uniforme, con el mínimo número de puntos para cada variable de estado y satisfaciendo un nivel de precisión impuesto por el usuario en términos de la *k*-efectiva calculada. Esta metodología se expone en la siguiente sección.

10.2. Desarrollo de la metodología

10.2.1. Planteamiento del problema

Al utilizar librerías tabuladas, una fuente de error en las secciones eficaces empleadas proviene del procedimiento de interpolación de los valores a partir de los puntos de malla. Los errores de interpolación pueden reducirse refinando la malla pero con el coste que supone el incremento de tiempo necesario para llevar a cabo los cálculos *lattice* y los requisitos de almacenamiento exigidos. También es posible incrementar la complejidad del polinomio de interpolación pero también acaba repercutiendo en los requisitos de almacenamiento y en tiempos de reconstrucción.

En realidad, las secciones eficaces no son igual de sensibles a los cambios en las diferentes variables de estado en todo su dominio; y los parámetros de interés, como la k -efectiva, no son igual de sensibles a los cambios de las diferentes secciones eficaces. Consecuentemente, la malla debe ser refinada sólo cuando sea necesario, teniendo en consideración el comportamiento físico.

Consideréanse D variables de estado que definen una malla cartesiana D -dimensional sobre el dominio de dichas variables de estado. Centrándose en una variable, por ejemplo ρ (que podría ser identificada con la densidad del moderador), definida sobre el intervalo $I := [a, b]$ y eligiendo una malla de puntos $\{\rho_i\}_{i=1}^{N+1}$, $\rho_i \in [a, b]$ no necesariamente uniforme, donde los valores de las secciones eficaces macroscópicas Σ se obtienen vía $N + 1$ cálculos *branch* $\{\Sigma_i\}_{i=1}^{N+1}$, $\Sigma_i := \Sigma(\rho_i)$; uno puede aproximar el valor de la sección eficaz en cualquier punto del intervalo I por un polinomio $P(\rho)$ de orden menor o igual que N :

$$\tilde{\Sigma}(\rho) = P(\rho) = \sum_{i=1}^{N+1} a_i \rho^{i-1} \quad (10.1)$$

donde $\tilde{\Sigma}$ denota el valor interpolado y los coeficientes a_i dependen del tipo de interpolación realizada (polinomios de Lagrange, cúbica, spline...) y se determinan imponiendo $P(\rho_i) = \Sigma_i$ $1 \leq i \leq N + 1$.

El error de interpolación ε para un valor ρ viene dado por:

$$\varepsilon(\rho) = \Delta\Sigma = \left| \Sigma(\rho) - \tilde{\Sigma}(\rho) \right| \quad (10.2)$$

Este error es una función que depende del tipo de interpolación y es sensible a las coordenadas de los puntos entre los que se interpola.

La figura 10.1 ilustra el error de interpolación obtenido por dos mallas diferentes al emplear interpolación lineal. Se representa en trazo continuo la sección eficaz de fisión térmica para un elemento combustible típico en un PWR en función de la densidad del moderador. Se tienen igualmente dos mallas de puntos en la densidad con diferente paso de malla (distancia entre dos *data-points* consecutivos): una malla gruesa con un paso de

Figura 10.1: Error de interpolación para diferentes pasos de malla

450 kg/m^3 (representada por puntos triangulares) y una malla más refinada con un paso de malla de 250 kg/m^3 (representada por cuadrados).

El valor de densidad para el que se está interpolando está ubicado en la mitad del intervalo donde se supone el error será máximo. El error de interpolación para dicho valor de densidad (representado con un aspa en el eje de abscisas) será $\Delta\Sigma_1$ para la malla gruesa y $\Delta\Sigma_2$ para la fina. Obviamente, cuanto más refinada es la malla el error de interpolación disminuye.

El objetivo del proceso de optimización es construir una malla cartesiana no uniforme sobre el dominio de las variables de estado de forma que los errores al interpolar las secciones eficaces tengan un impacto sobre los parámetros de interés (como la k -efectiva) menor que un valor objetivo impuesto por el usuario. Esto es, no se trata de encontrar el conjunto de *data-points* que minimiza el error de interpolación sobre todo el dominio de las variables de estado sino hallar los puntos que llevan a unos errores en las secciones eficaces con un impacto limitado en la constante k -efectiva. Para ello se propone este método para construir una distribución de puntos de malla optimizada para cada variable de estado.

Se ha elegido interpolación lineal en la realización de este estudio ya que es el modelo más simple de implementar y los códigos de difusión emplean habitualmente este tipo de interpolación durante los cálculos de núcleo completo. No obstante, este proceso de optimización se podría aplicar a cualquier tipo de interpolación polinómica.

10.2.2. Fundamentos del procedimiento de optimización

El procedimiento para obtener una distribución óptima de puntos de malla para una variable de estado, cubriendo por completo su dominio de variación se describe a continuación.

- Primeramente, es imprescindible especificar por el usuario un nivel de precisión en algún parámetro. La constante k -efectiva es la elección más normal e inmediata. El error en la k -efectiva es debido a las contribuciones de los errores de todas las secciones eficaces. Se denomina Δk al error permitido debido a una sección eficaz

dada, y que es la diferencia entre la k-efectiva calculada con la sección eficaz exacta y la misma constante calculada empleando el valor interpolado de la sección eficaz. Un error razonable permitido debido a cada sección eficaz puede estar en torno a las 10 pcm, de forma que la combinación de errores en todas las secciones eficaces induzca un error final mayor en cálculos 3D neutrónicos-termohidráulicos.

$$|\Delta k| \leq 10^{-4} = 10 \text{ pcm} \quad (10.3)$$

- En segundo lugar, se determinan los coeficientes de sensibilidad de la k-efectiva respecto a cada sección eficaz S_{Σ}^k mediante la teoría de perturbaciones de primer orden. El significado físico del coeficiente de sensibilidad se interpreta como el cambio relativo de la constante k-efectiva con respecto a un cambio relativo en la sección eficaz. Matemáticamente se expresa como:

$$S_{\Sigma}^k = \frac{\delta k}{\delta \Sigma}$$

Se puede expresar también en función de la sensibilidad relativa Sr_{Σ}^k :

$$Sr_{\Sigma}^k = \frac{\frac{\delta k}{k}}{\frac{\delta \Sigma}{\Sigma}} = \frac{\delta k \cdot \Sigma}{\delta \Sigma \cdot k} = S_{\Sigma}^k \cdot \frac{\Sigma}{k} \quad (10.4)$$

- Para clarificar, se asume una dependencia de la k-efectiva con una sola sección eficaz. Entonces, el máximo error permitido en la sección eficaz se puede evaluar ya que

$$|\Delta k| = |S_{\Sigma}^k \cdot \Delta \Sigma| \quad (10.5)$$

Por lo que el máximo error permitido o error objetivo ε_{obj} en la sección eficaz será:

$$\varepsilon_{obj} = |\Delta \Sigma| \leq \frac{10^{-4}}{|S_{\Sigma}^k|} \quad (10.6)$$

o en términos de sensibilidad relativa, el error relativo de la sección eficaz está limitado por:

$$\frac{|\Delta \Sigma|}{\Sigma} \leq \frac{10^{-4}}{|S_{\Sigma}^k| \cdot \Sigma} = \frac{10^{-4}}{|Sr_{\Sigma}^k| \cdot k} \quad (10.7)$$

Este error objetivo para la sección eficaz depende de los coeficientes de sensibilidad, que dependen a su vez de la variable de estado, $\varepsilon_{obj}(\rho)$, pero son independientes del paso de malla ya que se calculan directamente sin interpolar.

Siguiendo con el ejemplo anterior y analizando la típica sección eficaz térmica de fisión en un PWR, la figura 10.2 muestra el error objetivo para la sección eficaz como función de la densidad con diferentes pasos de malla (nótese de nuevo que el error objetivo es independiente del paso de la malla).

Figura 10.2: Ejemplo de la función del error objetivo para la sección eficaz de fisión térmica

- En cuarto lugar, el error en la sección eficaz debido al algoritmo de interpolación puede ser evaluado en diferentes puntos de interpolación $\{\rho_i, i = 1, \dots, I\}$ considerando K mallas con diferentes anchura o paso de malla $\Delta\rho_K$. La idea es obtener el error expresado como una función de dos variables: la propia variable de estado y el paso de malla $\varepsilon(\rho, \Delta\rho)$.

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(\rho_1, \Delta\rho_1) &= \Sigma(\rho_1) - \tilde{\Sigma}(\rho_1) |_{\Delta\rho_1} \\
 &\vdots \\
 \varepsilon(\rho_i, \Delta\rho_k) &= \Sigma(\rho_i) - \tilde{\Sigma}(\rho_i) |_{\Delta\rho_k} \\
 &\vdots \\
 \varepsilon(\rho_I, \Delta\rho_K) &= \Sigma(\rho_I) - \tilde{\Sigma}(\rho_I) |_{\Delta\rho_K}
 \end{aligned} \tag{10.8}$$

Con este propósito, se definen varias mallas con diferentes anchos de malla computándose en los *data-points* los valores de las secciones eficaces mediante cálculos de transporte. Considerando que el máximo error tiene lugar aproximadamente en el punto medio del intervalo para interpolación lineal, se computan igualmente los valores reales de las secciones eficaces en los puntos medios entre *data-points* consecutivos de cada malla $\Sigma(\rho_i)$. De esta forma se puede obtener el error de interpolación en dichos I puntos medios, para cada paso de malla, como muestra la ecuación 10.8.

De esta forma, se encuentra una relación entre el error de interpolación y la posición de los puntos de malla (a partir de los pasos de malla). La figura 10.3 representa esta función para la sección eficaz que estamos tomando de ejemplo en función de la densidad del moderador y para pasos de malla que van desde los 10 hasta los 230 kg/m^3 . Se comprueba que los errores de interpolación son elevados para valores bajos de densidad y con pasos de malla muy anchos.

- Por último, el error de interpolación debe ser reducido y la precisión de la sección eficaz mejorada si el nivel de precisión objetivo no se verifica. En este caso, la intersección

Figura 10.3: Ejemplo del error de interpolación para la sección eficaz de fisión térmica empleando mallas con diferentes anchos

Figura 10.4: Ejemplo de la curva intersección entre las funciones del error objetivo y el de interpolación

entre las superficies definidas por el error de interpolación y el error objetivo definirá el paso de malla óptimo para cada región de la variable de estado, como se ve en la figura 10.4, donde se verifica:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\rho_1) &\leq \varepsilon_{obj}(\rho_1) \\ &\vdots \\ \varepsilon(\rho_I) &\leq \varepsilon_{obj}(\rho_I) \end{aligned} \quad (10.9)$$

10.2.3. Construcción de una malla optimizada unidimensional

En esta sección, se presenta la aproximación para obtener la estructura óptima de puntos que lleva a un nivel de precisión dado en cálculos de k-efectiva considerando sólo una variable de estado en la dependencia de las secciones eficaces.

Para un mejor entendimiento, en el proceso explicado anteriormente se asumió que la k-efectiva sólo dependía de una sección eficaz. Ya que el error en la k-efectiva es debido a las contribuciones de todas las secciones eficaces simultáneamente, se emplea la siguiente expresión para determinar el cuadrado del error como aproximación de primer orden en los desarrollos en serie de Taylor:

$$(\Delta k)^2 = \sum_{r=1}^R \left(\frac{\partial k}{\partial \Sigma_r} \right)^2 (\Sigma_r - \tilde{\Sigma}_r)^2 = \sum_{r=1}^R S_{\Sigma_r}^2 \varepsilon_r^2 \quad (10.10)$$

donde R es el número de diferentes secciones eficaces macroscópicas (diferente tipo de reacción y/o diferente grupo de energía) y S se refiere al vector de coeficientes de sensibilidad de la k-efectiva respecto a las secciones eficaces macroscópicas:

$$S = \left[\frac{\partial k}{\partial \Sigma_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial k}{\partial \Sigma_j} \quad \cdots \quad \frac{\partial k}{\partial \Sigma_R} \right] \quad (10.11)$$

Para obtener la estructura 1D de puntos óptima se tiene que encontrar una relación entre el error de interpolación (relacionado con la k-efectiva a través de la ecuación 10.10) y la posición de los puntos de malla.

Para empezar, sobre el rango de variación $[a, b]$ de la variable donde la malla está siendo optimizada se definen I puntos de interpolación. Habitualmente, el primer punto de interpolación coincide con el límite inferior del intervalo $\rho_1 = a$.

Después, se define un conjunto de K pasos de malla $\Delta \rho_k$ que se van a utilizar para sacar los *data-points* con los que se va a efectuar la interpolación en cada uno de los I puntos de interpolación. Éstos, han de quedar siempre en el punto medio entre data-points; de forma que para el punto de interpolación i -ésimo y el paso de malla k -ésimo, la pareja de *data-points* que se van a utilizar para evaluar el error viene determinada por la siguiente fórmula:

$$\rho_{i,k}^1 = \rho_i - \frac{\Delta \rho_k}{2}; \quad \rho_{i,k}^2 = \rho_i + \frac{\Delta \rho_k}{2} \quad (10.12)$$

PUNTOS DE INTERPOLACIÓN	PASOS DE MALLA	DATA-POINTS	
ρ_i	$\Delta\rho_k$	$\rho_{i,k}^1$	$\rho_{i,k}^2$
360	10	355	365
	90	315	405
	210	255	465
440	10	435	445
	90	395	485
	210	335	545

Tabla 10.1: Ejemplo de dos puntos de interpolación elegidos para la densidad (kg/m^3) y los correspondientes *data-points* al emplear tres pasos de malla diferentes

En la tabla 10.1 se muestra un ejemplo con dos puntos de interpolación y los correspondientes data-points para la combinación de tres pasos de malla diferentes.

Con ello en cada punto de interpolación ρ_i se calculan los errores de interpolación para todos los pasos de malla $\Delta\rho_k$ por lo que ya tendríamos el término $\varepsilon_r(\rho_i, \Delta\rho_k)$. Introduciendo estos errores de interpolación en la ecuación 10.10, una vez conocido el vector de coeficientes de sensibilidad, se determina el error en la k-efectiva que induce cada paso de malla en cada punto de interpolación.

De esta manera se acotan los pasos de malla que inducen errores en la k-efectiva justo por encima $\Delta\rho_{H,i}$ y por debajo $\Delta\rho_{L,i}$ del límite objetivo impuesto, por ejemplo 10 pcm, y el paso de malla óptimo $\Delta\rho_{opt,i}$ se ubica entre medias de esos valores.

Los errores de interpolación en las secciones eficaces para cada reacción ε_r pueden ser expresados en función del paso de malla óptimo como sigue:

$$\frac{\varepsilon_r(\Delta\rho_{H,i}) - \varepsilon_r(\Delta\rho_{L,i})}{\Delta\rho_{H,i} - \Delta\rho_{L,i}} = \frac{\varepsilon_r - \varepsilon_r(\Delta\rho_{L,i})}{\Delta\rho_{opt,i} - \Delta\rho_{L,i}} \implies \varepsilon_r \equiv f(\Delta\rho_{opt,i}) \quad (10.13)$$

De esta forma se tiene expresado el error de interpolación de cada sección eficaz en función de un paso óptimo y se introduce esta expresión en la ecuación 10.10 con el término $\Delta\rho_{opt,i}$ como incógnita. Así se determinara el paso de malla óptimo para cada punto de interpolación ρ_i .

Finalmente, para obtener la distribución final de puntos 1D optimizada $\{x_m\}$ se aplica un proceso resumido en el algoritmo 10.1 e ilustrado en la figura 10.5.

10.2.4. Construcción de una malla optimizada multidimensional

El procedimiento unidimensional expuesto en la sección precedente se puede generalizar para problemas multidimensionales. La estructura de puntos óptima es un espacio multidimensional de variables de estado se puede diseñar por aplicación recursiva del procedimiento unidimensional en cada variable.

Algoritmo 10.1 Algoritmo para obtener la malla optimizada en una variable de estado

```

 $m \leftarrow 1$ 
 $x_1 \leftarrow \rho_i |_{i=1}$  /*El primer punto de la malla es el primer punto de interpolación*/
repeat
  obtención  $\Delta\rho_{opt}(x_m)$  por interpolación lineal de  $\{\Delta\rho_{opt}(\rho_i)\}$ 
   $x_{m+1} \leftarrow x_m + \Delta\rho_{opt}(x_m)$  /*Posición del siguiente punto de malla según el paso óptimo*/
  for  $i \leftarrow 1$  until  $I$  do /*Bucle para chequear que no existe ningún punto de interpolación
                                intermedio con un paso de malla menor*/
    if  $((x_m < \rho_i < x_{m+1}) \text{ AND } (\rho_i + \Delta\rho_{opt}(\rho_i) < x_{m+1}))$  then
       $x_{m+1} \leftarrow \rho_i$ 
      go to 100
    endif
  end
end
end
[100]  $m \leftarrow m + 1$ 
until  $x_m > \rho_i$ 

```

Figura 10.5: Obtención de la malla optimizada para el caso de pasos óptimos crecientes con el valor de la variable de estado

Figura 10.6: Construcción de la malla de puntos sobre ρ para diferentes valores de T (figura 10.6a), de la malla de puntos sobre T para diferentes valores de ρ (figura 10.6b) y malla final 2-D regular (figura 10.6c)

Asúmase un espacio 2-D con las variable de estado (ρ, T) por lo que $\Sigma = \Sigma(\rho, T)$. Para definir una malla sobre el dominio, de debe centrar primero en la primera variable y aplicar el proceso unidimensional para saca la malla de puntos óptimizada sobre el eje ρ estando fijada la otra variable T a un valor constante.

El error máximo en k -efectiva debido únicamente a esa variable de estado Δk_ρ se debe fijar. Ya que los coeficientes de sensibilidad aplicados también dependen de la variable T , el procedimiento se repite para diferentes valores de T que cubre el rango completo de valores que pueda tomar. La malla optimizada final se corresponderá con el caso más restrictivo entre los T valores considerados. Supóngase que N_ρ es el número total resultante de *data-points* en la malla optimizada sobre el eje ρ en el caso más desfavorable. Este proceso se ilustra en la figura 10.6a para un caso de $N_\rho = 3$.

Después, se continúa centrándose en la segunda variable T , y ahora se construye la malla optimizada por aplicación del procedimiento unidimensional para diferentes valores de ρ . EL caso más restrictivo se elige para definir el número N_T de puntos sobre el eje T . EL número total de puntos será el producto $N_\rho \cdot N_T$ que respresentará las combinaciones de *data-points* para las cuales habría que realizar cálculos *lattice branch*. Este proceso se ilustra en la figura 10.6. La estructura 2-D de puntos resulta, como se puede ver, de la intersección de ambas mallas optimizadas. Este proceso se puede generalizar a dimensiones superiores.

10.2.5. Coeficientes de sensibilidad

Los coeficientes de sensibilidad requeridos para el proceso de optimización aquí presentado han sido obtenidos usando teoría de perturbaciones de primer orden, la cual requiere la resolución de la ecuación de difusión adjunta. El cálculo del flujo adjunto fue implementado en el código de difusión COBAYA3 [53]. Posteriormente, se puede aplicar la teoría ASAP para calcular el cambio previsto en una respuesta (k -efectiva) debido a las perturbaciones en determinados parámetros de entrada (secciones eficaces homogeneizadas) [56].

El producto escalar en el dominio P de las variables espaciales, como lo son los flujos de

cada grupo de energía, se define como:

$$\langle \vec{\phi}_1 | \vec{\phi}_2 \rangle = \sum_{\forall g} \int \int \int_P \phi_1^g(\vec{r}) \cdot \phi_2^g(\vec{r}) d\vec{r} \quad (10.14)$$

La expresión de la ecuación de difusión empleando la notación estándar es la siguiente:

$$\nabla \cdot (-D^g \nabla \phi^g) + \Sigma_a^g \phi^g + \sum_{\forall g' \neq g} \Sigma_s^{g \rightarrow g'} \phi^{g'} = \frac{1}{k} \chi^g \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} + \sum_{\forall g' \neq g} \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \phi^{g'} \quad g = 1, \dots, G \quad (10.15)$$

Y la ecuación adjunta de la anterior se define como:

$$\nabla \cdot (-D^g \nabla \phi^{*g}) + \Sigma_a^g \phi^{*g} + \sum_{\forall g' \neq g} \Sigma_s^{g \rightarrow g'} \phi^{*g} = \frac{1}{k} \chi^g \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{*g'} + \sum_{\forall g' \neq g} \Sigma_s^{g' \rightarrow g} \phi^{*g'} \quad g = 1, \dots, G \quad (10.16)$$

Las expresiones explícitas para cada parámetro de la ecuación de difusión son las siguientes:

$$\frac{\partial k}{\partial D^g} = \frac{k^2}{\langle \vec{\phi}^* | \vec{\chi} \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} \rangle} \iiint_P \phi^{*g} \nabla \cdot (\nabla \phi^g) d\vec{r} \quad (10.17)$$

$$\frac{\partial k}{\partial \Sigma_a^g} = \frac{k^2}{\langle \vec{\phi}^* | \vec{\chi} \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} \rangle} \iiint_P \phi^{*g} \phi^g d\vec{r} \quad (10.18)$$

$$\frac{\partial k}{\partial \Sigma_s^{g \rightarrow g'}} = \frac{k^2}{\langle \vec{\phi}^* | \vec{\chi} \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} \rangle} \left[- \iiint_P \phi^{*g} \phi^g d\vec{r} + \iiint_P \phi^{*g'} \phi^g d\vec{r} \right] \quad (10.19)$$

$$\frac{\partial k}{\partial \chi^g} = \frac{k^2}{\langle \vec{\phi}^* | \vec{\chi} \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} \rangle} \iiint_P \phi^{*g} \sum_{\forall g'} (\nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'}) d\vec{r} \quad (10.20)$$

$$\frac{\partial k}{\partial \nu \Sigma_f^g} = \frac{k^2}{\langle \vec{\phi}^* | \vec{\chi} \sum_{\forall g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi^{g'} \rangle} \sum_{\forall g'} \iiint_P \phi^{*g'} \phi^g d\vec{r} \quad (10.21)$$

Como se muestra en las anteriores expresiones, hay cinco parámetros que intervienen en la ecuación de difusión y que tienen influencia sobre a la k-efectiva. El caso del coeficiente de difusión no se ha llevado a cabo en este estudio ya que se han considerado elementos combustibles en red regular (malla infinita) por lo que no hay términos de fugas y el coeficiente de difusión no tendría efecto.

Asimismo, el espectro de fisión (χ) a pesar de tener influencia sobre la k-efectiva es un parámetro que apenas depende de las condiciones termo-hidráulicas, lo que implica que el

Variable	Rango de variación	Unidades
Temperatura del combustible (T_f)	560-1200	K
Temperatura del moderador (T_m)	560-617	K
Densidad del moderador (ρ)	200-850	kg/m^3
Concentración de boro	0-2000	ppm

Tabla 10.2: Rango de variación de las variables de estado

mallado determinado para otras secciones eficaces también minimizará el del espectro a valores aceptables.

Por lo tanto, en esta metodología se han tenido en cuenta los coeficientes de sensibilidad de la k -efectiva con respecto a las secciones eficaces de absorción, dispersión y producción neutrónica. Los valores de estos coeficientes de sensibilidad van a ser diferentes para cada condición lo que afectará en las mallas generadas. Por ejemplo, una malla más restrictiva (con mayor número de puntos) será requerida en regiones donde la k -efectiva sea más sensible y mallas más espaciadas en regiones donde el error de la constante esté menos influenciado por las incertidumbres de los parámetros.

10.3. Aplicación para un elemento combustible de un PWR

El proceso descrito en la sección anterior se va a ilustrar con la aplicación a una librería de secciones eficaces para un elemento típico de un PWR, considerando las cuatro variables de estado típicas mostradas en la tabla 10.2. Se han adoptado como base las especificaciones del conocido *benchmark* del MOX/UO_2 de la OECD/NEA [82]. Para la evaluación de errores se consideran las siguientes secciones eficaces: absorción, nu-fisión (producción) y dispersión.

El rango de variación de las variables termo-hidráulicas se impone de acuerdo a la consecuente aplicación de la librería de secciones eficaces. Por ejemplo, si la librería se va a aplicar para el análisis de situaciones donde se alcance ebullición en el refrigerante, la malla de puntos para la densidad del moderador deberá empezar en valores bajos, correspondientes a alto un nivel de fracción de huecos, y llegar a los valores correspondientes a parada caliente (HZP). Consideraciones similares se adoptan para elegir el rango de las restantes variables.

El código *lattice* APOLLO2 ha sido utilizado para obtener las secciones eficaces macroscópicas condensadas en pocos grupos de energía. El proceso de optimización fue programado para el programa libre Octave [38]. Por último, se han realizado igualmente cálculos de difusión, tanto con flujo directo como con flujo adjunto, con el código COBAYA3 con objeto de computar los coeficientes de sensibilidad y para chequear que las mallas optimizadas construidas en efecto verifican el error objetivo impuesto en k -efectiva.

10.3.1. Librerías tabuladas optimizadas y en dos grupos de energía

Supónganse tres niveles diferentes de precisión definidos por el usuario en la k -efectiva por variable de estado: 5 pcm, 10 pcm y 25 pcm. Consecuentemente se construirán tres distribuciones óptimas. Se elige un tipo de elemento fresco, con combustible UO_2 y con un enriquecimiento del 4.2 % de entre todos los elementos combustibles que aparecen en el *benchmark* del MOX/UO_2 .

Primeramente, se define para cada variable de estado, y de acuerdo a su rango de variación, un conjunto muy refinado de puntos que incluyen los puntos de interpolación (donde se van a evaluar los errores de interpolación en las secciones eficaces) y los puntos de malla (que se utilizan para poder interpolar entre ellos). Recuerdese que para un mismo punto de interpolación se definen varias parejas de puntos de malla, variando los pasos de malla. Para todos los puntos, de interpolación y de malla, se computan las secciones eficaces homogeneizadas y en dos grupos de energía para las combinaciones termo-hidráulicas. Este cómputo se lleva a cabo mediante cálculos de criticidad (esto es, de k -efectiva) con APOLLO2. Lo habitual para la generación de librerías de secciones eficaces suele ser utilizar cálculos de búsqueda de *buckling* crítico, en lugar k -efectiva, pues para la utilización posterior en cálculos de núcleo es una aproximación más realista. Sin embargo, en este caso como queremos evaluar diferencias en k -efectiva resulta más útil de esta manera.

La librería obtenida con APOLLO2 se puede usar para calcular los coeficientes de sensibilidad de la k -efectiva respecto a las secciones eficaces para todas las combinaciones de variables de estado, empleando para ello el código de difusión COBAYA3. Como ejemplo, se representan las sensibilidades de la k respecto a las secciones eficaces de absorción y *nu*-fisión en el grupo rápido frente a las variables de estado por pares.

La figura 10.7 muestra la sensibilidad respecto a la absorción en el grupo rápido frente a la variables densidad-concentración de boro y temperatura del combustible-temperatura del moderador. En cada una de ellas, las variables que no intervienen están fijadas al valor nominal. Se puede comprobar como las sensibilidades son negativas y muy influenciadas por la densidad del moderador y la temperatura del combustible mientras que para la concentración de boro y temperatura del moderador no son muy dependientes. El signo del coeficiente de sensibilidad es acorde con el significado físico, pues ante un aumento de la temperatura del combustible el efecto Doppler hará que aumenten las absorciones por lo que repercute negativamente sobre la k .

Los mismos resultados se representan en la figura 10.8 para la sección eficaz *nu*-fisión en el grupo rápido, donde las sensibilidades son positivas. Con ello se puede concluir que la variación de los coeficientes de sensibilidad a lo largo del espacio paramétrico es muy significativa y que constituyen un elemento muy valioso para el diseño de distribuciones de malla.

Una vez computado el vector de los coeficientes de sensibilidad con respecto a las secciones eficaces, se evalúan los errores de interpolación en los puntos de interpolación considerando diferentes pasos de malla. En la figura 10.9 se representan estos errores para la sección eficaz de absorción en el grupo rápido a diferentes valores de densidad (es decir, los diferentes

Figura 10.7: Sensibilidades relativas de la k -efectiva respecto a la sección eficaz de absorción en el grupo rápido vs. $\rho - C_B$ y $T_f - T_m$

Figura 10.8: Sensibilidades relativas de la k -efectiva respecto a la sección eficaz de nu-fisión en el grupo rápido vs. $\rho - C_B$ y $T_f - T_m$

Figura 10.9: Representación de los errores de interpolación de la sección eficaz de absorción en el grupo rápido vs. ancho de malla para diferentes valores de densidad

puntos de interpolación) en función del paso de malla. Los errores máximos se corresponden a valores bajos de densidad empleando mallas muy anchas, como ya se vio en la figura 10.3.

Después del proceso de optimización, la figura 10.10 muestra las dos proyecciones dimensionales de la malla construida para un nivel de precisión impuesto en k -efectiva de 5 pcm. Las figuras 10.11 y 10.12 muestran las mismas proyecciones para mallas construidas con unos niveles de precisión más laxos: 10 y 25 pcm respectivamente. El número total de *data-points* para cada malla varía claramente de una a otra dependiendo del límite impuesto sobre la k -efectiva. A título de ejemplo, para el caso de nivel de precisión de 5 pcm se requieren 17 *data-points* en la densidad del moderador para cubrir su espacio paramétrico, mientras que para el caso de 25 pcm sólo hacen falta 9 puntos. Lo mismo ocurre para el resto de variables: en la temperatura del combustible el número de puntos de malla es 7 y 3 respectivamente; y para la concentración de boro 8 y 4.

Es de destacar igualmente como el nivel de refinamiento de la malla requerido es muy diferente para las cuatro variables de estado y como varía a lo largo del dominio de cada una de ellas. La distribución óptima para la concentración de boro contiene muchos menos puntos que la de la densidad del moderador; y mientras que los pasos de malla no están muy lejos de una distribución uniforme, la densidad requiere pasos más finos cuanto menor es su valor. Para la temperatura del moderador no se requiere ningún refinamiento en el rango determinado para satisfacer el criterio de precisión.

En [121] se llevan a cabo una serie de cálculos a modo de prueba para verificar si en cálculos posteriores de difusión se verifican los límites de precisión. Asimismo se hace un estudio sobre la influencia que otros factores como el tipo de elemento, el quemado del elemento o el número de grupos de energía puedan tener sobre las estructuras de las mallas.

Figura 10.10: Proyecciones bidimensionales de la malla fina con un nivel de precisión de 5 pcm

Figura 10.11: Proyecciones bidimensionales de la malla intermedia con un nivel de precisión de 10 pcm

Figura 10.12: Proyecciones bidimensionales de la malla gruesa con un nivel de precisión de 25 pcm

10.4. Desarrollo de una metodología alternativa

La metodología expuesta en la sección 10.2, aunque permite optimizar al máximo las mallas de puntos sobre cada variable de estado presenta sin embargo algunos inconvenientes. El principal es la necesidad de tener que llevar a cabo un gran número de cálculos *lattice* previamente para poder evaluar el error de interpolación en varios puntos y con varios pasos de malla, y tener que repetir sucesivamente este proceso para distintas combinaciones del resto de variables. Esto hace que a la hora de generar librerías de secciones eficaces no resulte práctico este método.

Por este motivo se ha desarrollado una metodología alternativa basada igualmente en el empleo de coeficientes de sensibilidad y más fácil de llevar a la práctica. De echo, esta metodología se ha utilizado en el marco del proyecto NURES SAFE para la generación de mallas optimizadas para las aplicaciones del PWR y del VVER [120, 76]. Este procedimiento es similar al empleado por el código NJOY, particularmente el módulo RECONR, a la hora de reconstruir el comportamiento de las secciones eficaces con la energía [94].

La idea consiste en partir de un intervalo inicial amplio, que se corresponda por ejemplo con el dominio de cada una de las variables, e ir dividiéndolo en subintervalos por la mitad tras comprobar si en los puntos medios se verifica el criterio de precisión impuesto. La figura 10.13 muestra el esquema seguido en este procedimiento. Se parte del intervalo inicial con los límites inferior y superior de cada variable, que indudablemente van a ser puntos de malla (de ahí la nomenclatura seguida, donde M indica que se trata de un punto de malla). En el punto intermedio (I1) se evalúan los errores de interpolación de las secciones eficaces y se propagan, a través de los coeficientes de sensibilidad, a la k-efectiva; y se comprueba si el error en este parámetro es menor o igual al valor límite adoptado por el usuario. En caso afirmativo no sería necesario incluir dicho punto a la malla y el proceso finalizaría. En caso contrario, el punto I1 pasaría a formar parte de la malla que tendría en este caso 3 *data-points*. Para poder evaluar el error en el punto I1 se recuerda que es necesario calcular en dicho punto los valores reales de las secciones eficaces. Seguidamente los dos subintervalos

Figura 10.13: Esquema alternativo para la obtención de una malla optimizada

entre puntos de malla se dividen en dos, evaluando de nuevo en los puntos medios el error en la k-efectiva. Si en alguno de ellos no se verifica el criterio se incorpora a la malla, y se repite el proceso. Si por el contrario alguno sí verifica el criterio se deja de refinar la malla en esa zona. Siguiendo con el ejemplo de la figura 10.13 se supone que de los dos puntos donde se evalúa el error, uno de ellos no verifica el criterio (el primero de ellos) mientras que el segundo sí. Por ese motivo la malla queda formada por cuatro puntos. De nuevo se repite el proceso de verificación en los nuevos subintervalos hasta que en todos los puntos medios se verifique el criterio de error en la k-efectiva, quedando la malla integrada definitivamente por cuatro puntos.

La realización de esta metodología es sensiblemente más sencilla de llevar a la práctica que la anterior, aún cuando no está optimizada al máximo. Otra ventaja que ofrece este proceso es la posibilidad de llevarlo a la práctica *on-the-fly*, es decir, ejecutando los cálculos *lattice* de manera inmediata cuando se vayan realizando progresivamente las comprobaciones en cada punto medio. Esto supone una ventaja desde el punto de vista computacional ya que no se exige la realización de varios cálculos *lattice* a priori.

Parte IV

APLICACIONES

Capítulo 11

Propagación de incertidumbres en cálculos de núcleo

En los capítulos 7 y 8 se propagaron las incertidumbres debidas a los datos nucleares y tecnológicas, respectivamente, a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas. Esto es, se hicieron sendos ejercicios de propagación de incertidumbres en cálculos *lattice* de elemento.

En este capítulo se culmina el proceso de propagación de incertidumbres en cálculos puramente neutrónicos hasta el cálculo de núcleo. Para ello se va a utilizar el código de difusión COBAYA, empleando las dos técnicas UQ que tiene implementadas. Se van a realizar dos ejercicios de propagación de incertidumbres: primeramente propagando sólo las incertidumbres debidas a los datos nucleares y, en segundo lugar, propagando también las incertidumbres tecnológicas. En el primer caso, se realizarán cálculos a nivel nodal y *pin-by-pin*, comparando las soluciones obtenidas por la metodología determinista y por la estocástica. Los resultados de esta parte se encuentran recogidos en la publicación [19]. El segundo caso es más reducido y se hará únicamente a nivel nodal y empleando la técnica basada en muestreo.

Al igual que en el resto de la tesis, se utilizarán las especificaciones correspondientes al *benchmark* de UAM, concretamente las del ejercicio I-3 para llevar a cabo este ejercicio.

11.1. Revisión de la configuración del núcleo

Aunque ya fueron descritas, al explicar el *benchmark* de UAM en el capítulo 6, las configuraciones correspondientes al ejercicio I-3; no está de más volver a recordar de nuevo las características principales del núcleo de TMI-1. Es un núcleo PWR compuesto por 177 elementos combustibles, cuya disposición se muestra en la figura 11.1, agrupados en 11 tipos diferentes (tabla 6.2). La presencia del control convierte a un tipo de elemento en otro diferente por lo que el número de tipos se incrementa a 18 cuando se quieren hacer cálculos con el control insertado (ARI). En la figura 11.1 se distinguen los elementos que tienen bancos de control de operación en naranja, de parada en morado y de tipo APSR

1	2	3	2	4	5	6	6	R
2	7	2	6	2	3	8	9	R
3	2	7	2	7	5	4	6	R
2	6	2	4	10	7	8	R	R
4	2	7	10	3	11	2	R	
5	3	5	7	11	3	R	R	
6	8	4	8	2	R	R		
6	9	6	R	R	R			
R	R	R	R					

Figura 11.1: Esquema del núcleo del ejercicio I-3 del *benchmark* de UAM

[49] en verde.

Como se mencionó también en el apartado 6.1.1.3 la nodalización axial que se adopta es de 16 nodos iguales de altura 22.32 cm para cubrir la altura activa del combustible más dos nodos adicionales para el reflector axial, uno en la parte inferior y otro en la superior.

Las condiciones termohidráulicas recordemos que eran las correspondientes a HZP y con una concentración de boro de 2600 ppm. Las secciones eficaces del reflector se han calculado utilizando el modelo de *colorset-1D* expuesto en el apartado 7.4.3.

11.2. Ejercicios de propagación de incertidumbres

11.2.1. Datos nucleares

Como se ha dicho anteriormente, en primer lugar se propagarán las incertidumbres debidas a los datos nucleares y se compararán los resultados empleando ambas metodologías UQ. Se han empleado para ello herramientas ya utilizadas en otras partes de la tesis. Con SAMPLER se muestrean los datos nucleares y con NEWT se generan las secciones eficaces homogeneizadas por tipo de elemento, con un total de 900 historias. Se han desarrollado herramientas auxiliares que permiten que para cada historia se obtengan en formato NEM-TAB las secciones eficaces de cada tipo de elemento y se ensamblen en un único fichero. Posteriormente cada ejecución de COBAYA lee como librería el fichero correspondiente a la ejecución pertinente.

Para el caso determinista se utiliza una matriz de covarianzas completa (figura 7.24) para aplicar la regla del sándwich.

Se realizan cálculos nodales y *pin-by-pin* para dos configuraciones: ARO y ARI. Los resultados que se van a comparar son k-efectiva y distribuciones de potencia.

11.2.1.1. Resultados en k-efectiva

En la tabla 11.1 se presenta un resumen de los resultados obtenidos. Respecto al valor de k-efectiva se comprueba que en ambas configuraciones los resultados son similares para las dos metodologías y tipo de cálculo. Para el caso de la metodología por muestreo el valor de k-efectiva que se proporciona es el correspondiente al valor medio de la 900 ejecuciones. En la figura 11.2 se representa la variación del valor medio de k-efectiva con el número de ejecuciones para el caso nodal ARO, mostrándose que el valor medio final es muy próximo al valor nominal y que el número de 900 ejecuciones garantiza la correcta convergencia del mismo. En la figura 11.3 se comprueba adicionalmente que los valores de k-efectiva se ajustan a una distribución normal por lo que el valor medio y la desviación típica son suficientes para caracterizar la distribución. En las incertidumbres, expresadas en valor relativo se comprueba que existe también un buen acuerdo obteniendo valores muy próximos entre ambas metodologías.

Respecto a los tiempos de ejecución cabe destacar que el cálculo de COBAYA emplea 2 minutos en realizar la secuencia del cálculo directo, adjunto, coeficientes de sensibilidad y aplicar la regla del sandwich. Sin embargo, como es de esperar la metodología basada en muestreo implica la ejecución de 900 casos, consumiendo cerca de 12 horas la ejecución lineal (un caso detrás de otro) de todos ellos; si bien es cierto que este proceso es fácilmente paralelizable en máquinas de más de un procesador. Asimismo, el tiempo de computación varía también sensiblemente entre un cálculo nodal y uno *pin-by-pin*.

<i>Solver</i>	Configuración	Metodología	k_{eff}	$\Delta k_{eff}/k_{eff}$ (%)
Nodal	ARO	Determinista	1.09860	0.518
Nodal	ARO	Muestreo	1.09855	0.520
Nodal	ARI	Determinista	1.00374	0.511
Nodal	ARI	Muestreo	1.00373	0.515
PbP	ARO	Determinista	1.09899	0.519
PbP	ARO	Muestreo	1.09895	0.520
PbP	ARI	Determinista	1.00351	0.517
PbP	ARI	Muestreo	1.00350	0.515

Tabla 11.1: Resultados de k-efectiva y su incertidumbre

Es importante destacar que para obtener valores de incertidumbre coherentes a nivel nodal y con la metodología determinista es imprescindible que la matriz de covarianzas empleada al aplicar la regla del sándwich sea la matriz de covarianzas completa, es decir, aquella que tiene en cuenta correlaciones no sólo entre reacciones y energía sino también entre tipos diferentes de elementos. Esta observación ya fue realizada en una de las reuniones de UAM por participantes del GRS [71] y en [19] se cuantifica el efecto, resultando una incertidumbre de $\Delta k_{eff} = 0,215\%$ para el caso ARO en el caso de no considerar correlaciones entre tipos frente al valor de $0,518\%$ que se obtiene al emplear la matriz completa.

Figura 11.2: Convergencia del valor medio de k -efectiva del núcleo con el número de muestras para un cálculo nodal ARO

Figura 11.3: Histogramas de la k -efectiva obtenidos para la configuración ARO (izda.) y ARI (dcha.)

11.2.1.2. Resultados en distribución de potencia

En este caso, sólo se comparan resultados obtenidos por aplicación de la metodología basada en muestreo, ya que, como ha quedado expuesto, por la metodología determinista sólo se pueden obtener incertidumbre en la k -efectiva como respuesta. Las figuras 11.4 y 11.5 muestran los mapas con los valores de distribución de potencia a ARO y ARI respectivamente. En los dos casos se representa, de izquierda a derecha, el valor medio de los cálculos nodales, el valor medio de los cálculos *pin-by-pin* promediando por elemento y el valor medio por celda. En la fila inferior y en el mismo orden se representan los valores de incertidumbre, en valor relativo como es habitual.

Figura 11.4: Distribuciones de potencia y su incertidumbre a ARO

Figura 11.5: Distribuciones de potencia y su incertidumbre a ARI

Se puede comprobar que con el control extraído se genera más potencia en la parte central del núcleo mientras que con el control insertado el máximo de potencia se desplaza a una

zona más periférica pero sin llegar a los elementos que tocan con el reflector. Las soluciones nodales y *pin-by-pin* son coherentes y predicen la misma forma de la distribución de potencia. Se puede apreciar en la solución por celdas la presencia de los tubos guía en todos los elementos al no producirse en estos potencia. Respecto a las incertidumbres, se comprueba en las dos configuraciones, ARO y ARI, que hay dos regiones donde la incertidumbre es mayor: en la zona central y en la zona periférica diagonal. Además se aprecia la existencia de un anillo central donde la incertidumbre es más baja. Esta distribución coincide en gran medida con la obtenida en [111], siendo achacada a un desplazamiento del flujo, es decir, que en cada una de las ejecuciones no siempre el flujo máximo están ubicados en el mismo elemento.

En [19] se completa el análisis de resultados con un análisis de los factores de pico, obteniéndose que no todos se ajustan a una distribución normal por el hecho de que no en todas las simulaciones siempre resulte el mismo elemento o celda como el/la más caliente. Individualmente el factor de pico de cada elemento o celda sí sigue una distribución normal pero factores promediados como el FdH no se ajustan. Este mismo comportamiento se obtuvo con el sistema Polaris/PARCS durante la realización del ejercicio I-3 de UAM debido a un cambio en las especificaciones del ejercicio.[132]

11.2.2. Datos nucleares y variables tecnológicas

En este caso se perturban de manera simultánea tanto datos nucleares como variables tecnológicas (radios de pastilla, espesor de vaina, densidad de combustible y enriquecimiento). La incertidumbre del resultado final tendrá englobada ambas contribuciones. En este caso sólo se llevarán a cabo cálculos nodales a condiciones ARO y ARI.

11.2.2.1. Resultados en k-efectiva

En la tabla 11.2 se incluyen los resultados y su comparación con los anteriores.

Configuración	Propagación	k_{eff}	$\Delta k_{eff}/k_{eff}$ (%)
ARO	Datos Nucleares	1.09855	0.520
ARO	Datos Nuc. y Var. Tecn.	1.09859	0.5253
ARI	Datos Nucleares	1.00373	0.515
ARI	Datos Nuc. y Var. Tecn.	1.00377	0.5221

Tabla 11.2: Comparación de resultados de k-efectiva y su incertidumbre

Se comprueba que el valor medio de la k-efectiva apenas varía 4 pcm en cada configuración respecto al caso de propagación de los datos nucleares. Sin embargo, en la incertidumbre de la k-efectiva sí que se aprecian modestas variaciones. De hecho, si obtenemos la diferencia relativa en cada caso obtenemos valores del 1.16 % en ARO y 1.43 % en ARI. Se comprueba,

al igual que en el capítulo 8 que el impacto de las incertidumbres en la geometría e isotopía es muy limitado comparado con el de los datos nucleares.

11.2.2.2. Resultados en distribución de potencia

La figura 11.6 muestra la distribución de potencia en el núcleo (valor medio) para cada configuración. Como se puede comprobar son totalmente equivalentes a los del caso anterior, al igual que las distribuciones de la incertidumbre mostradas en la figura 11.7.

Figura 11.6: Distribuciones de potencia en el núcleo a ARO (izquierda) y a ARI (derecha)

Figura 11.7: Distribución de la incertidumbre de la potencia en el núcleo

Capítulo 12

Efectos de la generación y optimización de librerías de secciones eficaces sobre transitorios operacionales

12.1. Introducción

Un análisis preciso de los transitorios que tienen lugar en los reactores de agua ligera requiere de cálculos acoplados neutrónicos/termo-hidráulicos junto con métodos de cinética 3D. Este es el caso del accidente de rotura de línea principal de vapor (MSLB) [65] o los escenarios de expulsión de barra de control [83], donde la redistribución fuertemente asimétrica del flujo neutrónico no puede ser resuelta empleando modelos de cinética puntual. En la actualidad, todos los códigos de núcleo basados en teoría de difusión emplean modelos de cinética 3D para los análisis *best-estimate*.

En el capítulo 6 se puso de manifiesto la importancia de las incertidumbres relacionadas con la neutrónica, dentro de las cuales destacan los errores debidos a la interpolación de las secciones eficaces durante el cálculo a nivel de núcleo completo. En la metodología expuesta en el capítulo 10 se obtiene una malla de puntos sobre cada una de las variables de estado en las que se tabula la librería de secciones eficaces que minimiza el error de interpolación. En [121] se llevan a cabo una serie de cálculos de difusión demostrativos a nivel de elemento combustible 2D para comprobar los errores introducidos y si verifican el nivel de precisión exigido.

El siguiente paso consiste en evaluar el impacto de la distribución de puntos de malla, y en consecuencia los errores de interpolación, sobre el análisis de un transitorio a escala de núcleo completo. Con este propósito, se han escogido diferentes *benchmarks* internacionales que analizan la evolución de diferentes transitorios. Concretamente, el *benchmark* del PWR MOX/VO₂ de la OECD/NEA [82] analiza la expulsión de una barra de control en un núcleo cargado parcialmente con combustible MOX. Por su parte en el proyecto NURES SAFE se

lleva a cabo un *benchmark* centrado en la evolución de un MSLB en un núcleo con las mismas especificaciones que el anterior, sólo que a final de vida.

En el mencionado *benchmark* del PWR *MOX/UO₂* se proporcionaban los datos de composiciones isotópicas de los materiales así como geometrías de celdas y elementos por lo que es posible utilizar un código *lattice* para generar nuevas librerías de secciones eficaces con diferentes distribuciones de puntos de malla. Adicionalmente, se aportaba una librería a nivel nodal en dos grupos de energía para una malla determinada. Consecuentemente esto permite que se evalúen, además de los efectos de la optimización, también los que tiene la generación de diferentes librerías sobre los resultados del transitorio. Ello se puede hacer por comparación con las soluciones aportadas por los participantes en el *benchmark* y disponibles en [83].

En el caso del *benchmark* del proyecto NURESAFE la librería provista con las especificaciones fue generada con el código APOLLO y obtenida aplicando la metodología de optimización. Para estudiar el efecto de la optimización lo que se hará será construir una nueva librería a partir de la anterior quitando puntos de malla intermedio sobre las variables de estado y analizar las diferencias entre la librería reducida y la optimizada.

Finalmente también se incluye el análisis, también de un MSLB, sobre un reactor tipo VVER de geometría hexagonal. Este trabajo también se ha desarrollado en el seno del proyecto NURESAFE.

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

12.2.1. Descripción del *OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO₂ core transient benchmark*

Este *benchmark* es un ejercicio de núcleo completo que sirve para comprobar y comparar las soluciones que ofrecen diferentes códigos de simulación en la modelización de un transitorio con unas especificaciones determinadas. Particularmente este *benchmark* consiste en el modelado de un transitorio de expulsión de barra de control en un núcleo parcialmente cargado con combustible de óxidos mixtos (MOX) a partir de un estado estacionario sin potencia (HZP). El diseño del núcleo se basa en una planta nuclear tipo PWR de Westinghouse con cuatro lazos. Este núcleo tiene una potencia nominal de 3565 MWt y 193 elementos combustibles de *UO₂/MOX*. La configuración del mismo se muestra en la figura 12.1, donde un ciclo de equilibrio se compone por tercios de elementos frescos, con un ciclo y con dos ciclos de quemado. Todos los restantes detalles sobre definición geométrica del núcleo, disposición de elementos combustibles, bancos de control y condiciones termo-hidráulicas vienen recogidas en las mismas especificaciones [82]. El *benchmark* se compone de cuatro partes o problemas: tres de ellos correspondientes a distintos cálculos de estados estacionarios y uno correspondiente a la respuesta transitoria a la expulsión de la barra de control.

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

Figura 12.1: Disposición de elementos combustibles y bancos de control en el núcleo PWR MOX/UO₂

Los resultados que se van a mostrar en este capítulo se corresponden a la Parte 3 y 4:

- La Parte 3 está dedicada a caracterizar el estado estacionario previo al transitorio. El núcleo se encuentra en estado HZP, siendo la temperatura de entrada del refrigerante de 560 K y la presión de entrada del mismo 15.5 MPa. Los bancos de control están completamente insertados mientras que los de parada están extraídos. Se pide que se calcule la concentración de boro que hace crítico el reactor.
- La Parte 4 comprende el transitorio en sí. Partiendo de las condiciones estacionarias anteriores se asume que la barra eyectada lo hace en 0.1 segundos, después de lo cual no se considera el disparo del reactor, es decir la entrada de los bancos de parada. Durante el cálculo, la concentración de boro y la posición de los restantes bancos de control se asume que son constantes. El transitorio se calcula hasta el instante 1.0 s.

12.2.2. Librerías de secciones eficaces

Como ya se ha comentado en la introducción, en el *benchmark* se proporcionaba como parte de las especificaciones una librería de secciones eficaces homogeneizadas a nivel de elemento y en dos grupos de energía. Esta librería también incluye los factores ADF así como los datos de β y λ para seis familias de neutrones diferidos.

Adicionalmente, en la documentación del *benchmark* también se especifican las composiciones isotópicas y las geometrías de las celdas y elementos de manera que permite que otros participantes, haciendo uso de otros códigos *lattice*, generen librerías propias de secciones eficaces y se comparen los resultados con la suministrada en el *benchmark*. Esto convierte a este *benchmark* en idóneo para el propósito de este trabajo, donde los efectos de diferentes librerías quieren ser evaluados. Para este análisis se utilizan tres librerías diferentes detalladas a continuación.

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

Código <i>lattice</i> usado: HELIOS1.7- 47 grupos de energía			
Temperatura del combustible (K)	560	900	1320
Concentración de boro (ppm)	0	1000	2000
Densidad del moderador (kg/m^3)	661.14	711.87	752.06

Tabla 12.1: Código *lattice* y puntos *branch* para la librería proporcionada en el *benchmark* (LIB-A)

12.2.2.1. Librería de secciones eficaces proporcionada en el *benchmark* (Librería-A)

La librería proporcionada se ajusta al formato NEMTAB, el mismo que en otro *benchmark* de la OECD [65]. Los datos se dan en dos grupos de energía, donde el corte entre ambos es el valor estándar de 0.625 eV. Las secciones eficaces han sido calculadas con el código HELIOS1.7 [50] con una estructura en 47 grupos de energía y a diferentes condiciones de temperatura de combustible, densidad del moderador y concentración de boro de manera que cubran todo el rango de variación previsto.

La temperatura del moderador no se incluye como una variable de estado sino que su efecto se trata implícitamente en la densidad del moderador, asumiendo que habrá una fase única a presión constante. La presencia del control no se trata como una variable adicional, sino que los mismos cálculos se repiten con el control insertado.

Los valores para los cálculos *branch* se muestran en la tabla 12.1, donde una malla con tres *data-points* por variable de estado se ha considerado; por lo que se requiere un total de 27 cálculos *branch* por cada tipo de elemento combustible.

De ahora en adelante se referirá a esta librería como LIB-A.

12.2.2.2. Librería de secciones eficaces generada usando los mismos puntos de malla que en el *benchmark* (Librería-B)

Partiendo de la geometría y composiciones isotópicas proporcionados en las especificaciones del *benchmark* se ha obtenido una librería de secciones eficaces también en 2 grupos y en formato NEMTAB empleando para ello el código APOLLO2.8, y referida como LIB-B. Se emplea la misma malla de tres puntos por variable de estado que en la LIB-A, como se puede ver en la tabla 12.2. Por ello la única diferencia entre ambas librerías (LIB-A y LIB-B) es el código de transporte utilizado para su generación y por ello la librería de datos nucleares en la que está basado aquél, con la consecuente estructura energética.

Es posible evaluar la influencia que los errores de interpolación van a tener sobre la k-efectiva en cálculos 2D de difusión a nivel de elemento al usar esta malla. Considerando los puntos medios entre *data-points* para cada variable de estado y computando en dichos puntos las secciones eficaces reales con APOLLO2, el error en la k-efectiva en esos puntos debido a la contribución de todas las secciones eficaces será la diferencia entre los valores reales y los

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

Código <i>lattice</i> usado: APOLLO2.8- 281 grupos de energía basado en la JEFF3.1.1			
Temperatura del combustible (K)	560	900	1320
Concentración de boro (ppm)	0	1000	2000
Densidad del moderador (kg/m^3)	661.14	711.87	752.06

Tabla 12.2: Código *lattice* y puntos *branch* para la librería generada con APOLLO2 usando la misma malla que en el *benchmark* (LIB-B)

Código <i>lattice</i> usado: APOLLO2.8- 281 grupos de energía basado en la JEFF3.1.1								
Temperatura del combustible (K)	560	640	720	850	950	1070	1200	1348
Concentración de boro (ppm)	0	325	833	1452	2106			
Densidad del moderador (kg/m^3)	661.14	715.5	772	836				

Tabla 12.3: Código *lattice* y puntos *branch* para la librería generada con APOLLO2 usando la malla optimizada (LIB-C)

obtenidos por interpolación.

Procediendo de esta manera se encuentra un error máximo sobre la *k*-efectiva de 37 pcm por variable de estado. En consecuencia, la combinación de errores en cálculos 3D neutrónicos/termo-hidráulicos inducirá un error mayor.

12.2.2.3. Librería de secciones eficaces generada usando una malla de puntos optimizada (Librería-C)

Se obtiene también una librería adicional con APOLLO2.8, referida como LIB-C, a partir de los mismos datos de geometría y composición pero con una malla de puntos optimizada. Por ello la diferencia entre LIB-B y LIB-C es únicamente la distribución y el número de puntos de malla en cada variable de estado.

La malla ha sido optimizada siguiendo el procedimiento descrito en el capítulo 10 fijando un nivel de precisión en *k*-efectiva de 5 pcm por variable de estado. La tabla 12.3 muestra las distribuciones de puntos para cada una de las variables siendo destacable la diferencia de puntos requeridos en cada una de ellas.

12.2.3. Resultados

12.2.3.1. Parte III: Estacionario

En el *benchmark* hubo una notable participación con gran número de soluciones aportadas por diversas instituciones empleando diferentes códigos de cálculo. Entre ellos destacan CORETRAN [39] y PARCS [35] como códigos basados en teoría de difusión, BARS [4] como

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

Código	Método de resolución	Librería y código <i>lattice</i>	Boro crítico (ppm)	Errores de potencia	
				% PWE	% EWE
DeCART	Transporte het.	47G - HELIOS1.8	1265	Ref	Ref
BARS	Transporte hom.	5G - UNK	1296	2.65	5.66
PARCS	Difusión nodal	2G (LIB-A) HELIOS1.7	1341	1.05	3.49
CORETRAN	Difusión nodal	2G (LIB-A) HELIOS 1.7	1346	1.09	3.72
COBAYA3	Difusión nodal	2G (LIB-A) HELIOS 1.7	1345	1.06	3.24
COBAYA3	Difusión nodal	2G (LIB-B) APOLLO2.8	1292	1.70	4.02
COBAYA3	Difusión nodal	2G (LIB-C) APOLLO2.8	1269	1.49	4.19

Tabla 12.4: Comparación de la concentración de boro crítico y los errores en la potencia por elemento

código de transporte homogéneo y DeCART [69] como código de transporte heterogéneo. Ya que las secciones eficaces nodales fueron generadas empleando el código HELIOS, con una librería en 47 grupos de energía, y que DeCART está también basado en la misma librería; se adopta este último como referencia. Además, su cálculo de transporte se considera el más detallado.

La tabla 12.4 muestra la comparación con los valores de concentración de boro crítico y errores en la potencia por elemento, incluyendo los resultados obtenidos con COBAYA3 usando las tres librerías: LIB-A, LIB-B, LIB-C. Se recuerda que los cálculos de COBAYA3 se han llevado a cabo con ANDES, el *solver* nodal, acoplado con el código COBRA-TF. Para evaluar los errores de la potencia por elemento se empleen los parámetros PWE (*power-weighted error*) y EWE (*error-weighted error*) definidos en el informe final del *benchmark*. El PWE es similar al error absoluto, pesando el error porcentual respecto a la referencia mientras que en el EWE pesan más las diferencias porcentuales mayores respecto a las menores.

Un análisis de la tabla muestra que el acuerdo entre códigos nodales es excelente empleando la misma librería (LIB-A) y la misma nodalización (4 nodos por elemento combustible). Las diferencias en la concentración de boro crítico son inferiores a 5 ppm. En [92] se encuentra una comparación más detallada incluyendo diferentes nodalizaciones, estructuras de grupos de energía y comparaciones en los factores de pico. En cualquier caso, se encuentra una diferencia no despreciable entre la concentración de boro crítico calculada por los códigos de difusión empleando la librería del *benchmark* y la solución proporcionada por los códigos BARS y DeCART.

Sin embargo, los resultados de COBAYA3 con la LIB-B son diferentes. La concentración de boro crítico es 52 ppm inferior a la obtenida con la LIB-A, pasando de 1345 a 1292 ppm. Éste último valor es casi idéntico al obtenido con BARS (1296) y se aproxima más a la referencia de DeCART. Las distribuciones de potencia también son muy similares a las previstas por BARS por lo que consecuentemente los parámetros PWE y EWE se incrementan ligeramente respecto a la solución de referencia.

El instituto ruso Kuchatov fue el único de todos los participantes en el *benchmark* que generó su propia librería de secciones eficaces, en lugar de utilizar la librería proporcionada, y esa librería propia generada fue la que se usó en los cálculos posteriores con el código BARS. Siguiendo el informe final del *benchmark*, se reportó que generaron dicha librería en 5 grupos de energía empleando el código UNK como código *lattice* y la librería de datos nucleares ENDF/B-VI. El acuerdo entre los resultados de BARS y los de COBAYA3 con la LIB-B es muy bueno, teniendo en cuenta que se podrían esperar notables discrepancias debidas al empleo de diferentes librerías en multigrupos, diferentes códigos *lattice* con sus consecuentes aproximaciones y diferentes métodos de resolución del cálculo de núcleo.

Por último, los resultados de COBAYA3 con la librería optimizada (LIB-C) muestran la mejora que conlleva el proceso de optimización. El refinamiento de la malla empleada lleva a un valor de boro crítico casi idéntico al de DeCART, mientras que las distribuciones de potencia siguen siendo muy parecidas a las previstas por BARS con diferencias menores del 0,1 %.

En resumen, la razón para las discrepancias entre participantes del *benchmark* en la parte III parece ser la librería de secciones eficaces nodales y no otras achacables al empleo de diferentes *solvers* para el cálculo de núcleo, tales como esquemas de acoplamiento, aproximaciones geométricas o esquemas temporales para la resolución cinética 3D. Los cálculos llevado a cabo con COBAYA3 y APOLLO2 sugieren que o bien las densidades atómicas de los nucleidos o las geometrías o las opciones durante el cálculo de transporte empleado para producir la librería no son consistentes con las utilizadas en HELIOS para generar la LIB-A (diferente reducción de isótopos con baja densidad, simplificaciones hechas y no consideradas en HELIOS...)

12.2.3.2. Parte IV: Transitorio

En la parte IV del *benchmark* todos los códigos nodales aportaron soluciones, mientras que de los códigos basados en otro método de resolución de mayor orden sólo BARS proporcionó resultados. Algunas limitaciones impidieron que DeCART ofreciera una solución de referencia en este ejercicio. En la figura 12.2 se comparan las respuestas al transitorio computadas con los diferentes códigos y librerías. Asimismo, en la tabla 12.5 se recogen los valores de reactividad máxima, pico de potencia, instante en el que tiene lugar el pico y temperatura Doppler al segundo de iniciarse el transitorio. Al igual que en la parte III los resultados con COBAYA3/COBRA-TF se dan con las tres librerías: LIB-A, LIB-B y LIB-C.

Los resultados una vez más muestran que todos los códigos nodales arrojan soluciones muy similares cuando utilizan la misma librería de secciones eficaces, con ligeras diferencias debidas al método nodal empleado y/o el esquema de acoplamiento neutrónico-termohidráulico.

Sin embargo, la solución de transporte de BARS es significativamente diferente del resto. En el informe final del *benchmark* estas diferencias se explican como consecuencia de la diferente predicción en la distribución de potencia en la parte III, tanto axial como radial, y III atribuida a las diferentes secciones eficaces generadas de manera propia. Pero en cualquier caso no se resolvía totalmente el asunto.

12.2. Análisis de un transitorio de expulsión de barra de control en un PWR

Figura 12.2: Evolución de la potencia durante el transitorio de expulsión de barra de control

Código	Librería	Instante del pico (s)	Pico de potencia (MW)	Pico de potencia (%)	Reactividad máxima (pcm)	T ^a Doppler ($t = 1s$) (K)
BARS	5G UNK	0.21	18607	522	1.29	597
PARCS	2G LIB-A	0.34	5052	142	1.12	532
CORETRAN	2G LIB-A	0.33	5926	166	1.14	586
COBAYA3	2G LIB-A	0.34	5725	161	1.11	583
COBAYA3	2G LIB-B	0.23	16955	475	1.15	591
COBAYA3	2G LIB-C	0.23	15847	444	1.15	591

Tabla 12.5: Comparación de resultados en la ejecución del transitorio

Ahora, la comparación de los resultados de COBAYA3/COBRA-TF con las librerías LIB-A y LIB-B muestra las mismas discrepancias. Al usar la librería recomputada con APOLLO2 (LIB-B) COBAYA3 predice un pico de potencia tres veces superior donde además la subida súbita tiene lugar antes que cuando se usa la librería del *benchmark*. Todo ello lleva a que tanto el pico de potencia como el instante en el que tiene lugar son muy cercanos a los calculados por BARS. Esto quiere decir que las secciones eficaces nodales proporcionadas en el *benchmark* no son consistentes con las especificaciones dadas para generar librerías propias, como se ha hecho en BARS con UNK o en COBAYA3 con la LIB-B.

La justificación para las dos diferencias principales (el valor del pico y el instante en el que tiene lugar) radica en las secciones eficaces. En primer lugar, diferentes valores de secciones eficaces para el elemento con control insertado en la posición E5 en la figura 12.1 llevan a diferentes valores de inserción de reactividad cuando la barra es expulsada. En segundo lugar, se tienen diferentes parámetros cinéticos en las librerías LIB-A y LIB-B. Por ejemplo, mientras que la LIB-A considera los mismos valores del término $\frac{1}{v}$ para elementos con control insertado y sin insertar y no lo parametriza según las variables de estado, la LIB-B incluye diferentes valores de $\frac{1}{v}$ para cada tipo de elemento y para cada combinación de variables de estado.

Los resultados de COBAYA3 con la LIB-C muestran los efectos de la optimización de la malla. La curva de la evolución de la potencia es muy similar a la obtenida con la LIB-B, aunque el valor del pico de potencia desciende un 7 %, diferencias que llegado el caso sí pueden ser significativas por ejemplo en factores de pico.

Por último hay que indicar que este trabajo ha sido recogido en una publicación [122].

12.3. Análisis de un transitorio MSLB en un PWR

Dentro de las tareas desarrolladas en el marco del proyecto NURESAFE destaca la simulación de un transitorio tipo MSLB haciendo uso de las herramientas desarrolladas dentro de la plataforma europea NURESIM. En el caso de la UPM el transitorio se simuló con COBAYA4 acoplado con COBRA-TF como código termo-hidráulico de subcanal. Para la correcta simulación de este transitorio es necesario el acoplamiento con un código termo-hidráulico de planta para predecir el comportamiento de la misma y determinar el caudal y condiciones (presión y temperatura) a la que llega el refrigerante al núcleo. Debido a que ese acoplamiento con COBAYA no está disponible se han utilizado unas condiciones de contorno, donde se dan en formato tabular la presión a la salida del núcleo y caudal y temperatura a la entrada para cada paso de tiempo y por canal del núcleo, computadas con el código ATHLET empleando el modelo de mezcla ROCOM. [72]

La librería de secciones eficaces homogeneizadas, de acuerdo a la subtarea 1.2.2.1, fue generada por la UPM en colaboración con el IRSN, y se describirá más adelante. El objetivo de este análisis es la simulación del transitorio con dos librerías diferentes, una optimizada y otra reducida, con el propósito de analizar el efecto de la utilización de diferentes librerías sobre este tipo de transitorio.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	U 4.2% (CR-D) 57.0	U 4.2%	U 4.2% (CR-A) 46.0	U 4.5% 26.0	U 4.5% (CR-SD) 58.0	M 4.3% 41.0	U 4.5% (CR-C) 26.0	U 4.2% 43.0
B	U 4.2% 28.0	U 4.2% 43.0	U 4.5% 53.0	M 4.0% 46.0	U 4.2% 28.0	U 4.2% (CR-SB) 53.0	M 4.0% 24.0	U 4.5% 31.0
C	U 4.2% (CR-A) 46.0	U 4.5% 53.0	U 4.2% (CR-C) 46.0	U 4.2% 28.0	U 4.2% 46.0	M 4.3% 41.0	U 4.5% (CR-B) 26.0	M 4.3% 47.0
D	U 4.5% 26.0	M 4.0% 46.0	U 4.2% 28.0	M 4.0% 60.0	U 4.2% 28.0	U 4.5% (CR-SC) 44.0	M 4.3% 21.0	U 4.5% 31.0
E	U 4.5% (CR-SD) 58.0	U 4.2% 28.0	U 4.2% 46.0	U 4.2% 28.0	U 4.2% (CR-D) 57.0	U 4.5% 26.0	U 4.2% (CR-SA) 34.0	
F	M 4.3% 41.0	U 4.2% (CR-SB) 53.0	M 4.3% 41.0	U 4.5% (CR-SC) 44.0	U 4.5% 26.0	M 4.3% 21.0	U 4.5% 42.0	
G	U 4.5% (CR-C) 26.0	M 4.0% 24.0	U 4.5% (CR-B) 26.0	M 4.3% 21.0	U 4.2% (CR-SA) 34.0	U 4.5% 42.0		
H	U 4.2% 43.0	U 4.5% 31.0	M 4.3% 47.0	U 4.5% 31.0	Fuel type CR group Burnup [GWd/t]			

Figura 12.3: Disposición de elementos combustibles y bancos de control en el núcleo para análisis de un MSLB en el proyecto NURES SAFE

A continuación, e igual que se hizo con el caso de la expulsión de barra de control, se hace una breve descripción de las especificaciones para explicar seguidamente las distintas librerías empleadas en la simulación. Por último, se ofrecen los resultados obtenidos.

12.3.1. Descripción de las especificaciones

Las especificaciones del problema se definen en uno de los deliverables del proyecto [85] y en [73]. Están basadas en el *benchmark* del PWR *MOX/* UO_2 por lo que el reactor de referencia es el mismo que en la sección anterior. Sin embargo, el transitorio tiene lugar a final de ciclo (EOC) por lo que hay que realizar un cálculo de quemado del núcleo para obtener el estado del mismo antes del transitorio. El núcleo resultante obtenido se muestra en la figura 12.3.

Se asume igualmente la concentración de boro disuelto en el refrigerante es nula y que no existe xenon como producto de fisión ya que éste se ha desintegrado por completo. Asimismo, el transitorio se inicia desde un estado subcrítico a HZP correspondiente a un margen de parada del 1 % y con todas las barras de control insertadas excepto la de mayor valor que se supone que queda atascada. Dicha barra coincide además con el cuadrante del núcleo que se ve afectado por la rama donde ha tenido lugar la rotura.

Como se ha mencionado previamente se imponen unas condiciones de contorno termo-

Concentración de boro (ppm)	0	600			
Temperatura del combustible (K)	373	779.75	1186.5	2000	
Temperatura del moderador (K)	373	495	617		
Densidad del moderador (kg/m^3)	300	382.58	465.15	630.3	960.6

Tabla 12.6: Puntos *branch* de la librería optimizada para el análisis del MSLB

hidráulicas dependientes del tiempo al sistema COBAYA4/CTF que determinan la respuesta de la planta ante el evento.

12.3.2. Librerías de secciones eficaces

Como se dijo anteriormente, la librería de secciones eficaces fue generada en colaboración entre la UPM y el IRSN, y toda la información sobre la misma puede encontrarse en el delviable D12.23 del proyecto [120].

La distribución de *data-points* fue obtenida de acuerdo con la metodología explicada en la sección 10.4 con las siguientes consideraciones acerca de los límites de cada variable termo-hidráulica:

- El límite inferior de la temperatura del moderador corresponde a 373K (100 °C) y el valor superior 617K, correspondiente a la temperatura de saturación del agua a una presión de 154.4bar.
- El valor mínimo de la densidad del moderador se considera 300 kg/m^3 correspondiente a un volumen de huecos de 20.18 %, por si ocurre alguna ebullición localizada en algún punto caliente. El valor máximo corresponde a las condiciones más restrictivas de subenfriamiento y despresurización (373K y 50bar) y es 960.6 kg/m^3 .
- La temperatura del combustible varía desde 373K a 2000K. El primer valor sería el equilibrio del combustible con el moderador a HZP, y el segundo un límite superior al mayor valor esperado
- La concentración de boro va desde 0 hasta 600 ppm.

Todas estas consideraciones se han adoptado después de la ejecución de algunas simulaciones con ATHLET que sirvieron como preparación del análisis del MSLB para acotar el rango de variabilidad en los que se moverían las variables termo-hidráulicas durante el transitorio.

Aplicando la metodología expuesta basada en la utilización de los coeficientes de sensibilidad se obtiene la distribución de puntos para cada una de las variables independientes expuesta en la tabla 12.6.

Con objeto de valorar los efectos de la optimización sobre el transitorio MSLB se construye a partir de la anterior una librería con menor número de *data-points*, donde la interpolación será menos precisa. Esta librería reducida se obtiene eliminando puntos intermedios sobre

Concentración de boro (ppm)	0	600	
Temperatura del combustible (K)	373	779.75	2000
Temperatura del moderador (K)	373	617	
Densidad del moderador (kg/m^3)	300	465.15	960.6

Tabla 12.7: Puntos *branch* de la librería reducida para el análisis del MSLB

Figura 12.4: Evolución de la potencia durante el transitorio MSLB

cada una de las distribuciones, resultando una estructura de puntos *branch* como se ve en la tabla 12.7.

12.3.3. Resultados

La evolución del transitorio se muestra en las figuras 12.4 y 12.5 donde se representa la evolución temporal de la potencia y de la reactividad, respectivamente. Debido al subenfriamiento causado por la rotura de la línea de vapor, que ocurre en el instante $t = 0$ s, tiene lugar una inserción positiva de reactividad dominada por un coeficiente de temperatura del moderador muy negativo. Partiendo de un valor inicial de -1000 pcm, que se corresponde con el valor del margen de parada impuesto, la reactividad tiene un crecimiento continuado en la fase inicial del transitorio. El reactor retorna a criticidad a los 28 segundos y alcanza un valor máximo de reactividad en torno a los 48 segundos, instante en el que tiene lugar una excursión de potencia súbita. A partir de ese instante el coeficiente de temperatura del combustible (Doppler) empieza a hacer efecto y hace que la reactividad comience a descender.

La excursión de potencia viene seguida por un incremento más suave hasta alcanzar un máximo en torno a los 94 segundos. El desfase entre la curva de reactividad y la de potencia se debe al tiempo característico de los neutrones diferidos, que determinan la cinética del

Figura 12.5: Evolución de la reactividad durante el transitorio MSLB

transitorio ya que la reactividad se mantiene siempre por debajo de 1\$.

La diferencia entre las dos librerías se aprecia sobre todo en el valor máximo de la potencia, alcanzando los 256 MW en el caso de la librería completa y los 218 MW, lo cual supone una diferencia del 8.25 %.

En [123] y [48] se lleva a cabo un análisis más exhaustivo del transitorio y el estacionario previo, comparando soluciones a nivel nodal y *pin-by-pin* tanto en la reactividad como en factores de pico y distribuciones de potencia.

12.4. Análisis de un transitorio MSLB en un reactor VVER

La simulación de un MSLB en un reactor tipo VVER era otro de los paquetes de trabajo incluidos dentro del proyecto NURESAFE donde la UPM contaba con una importante participación. En este caso, no se va a analizar el efecto de utilizar diferentes librerías como en los casos anteriores. Simplemente se realiza un análisis escueto sobre el transitorio con COBAYA para que quede constancia en la tesis de este trabajo realizado fruto de la participación en NURESAFE. Información detallada del mismo puede encontrarse en [117].

12.4.1. Descripción de las especificaciones

En este caso el reactor de referencia se vuelve a tomar de otro *benchmark* internacional. Se trata del OECD VVER-1000 *Main Steam Line Break* (V1000CT-2) [78]. La definición de los tipos de elementos combustibles se corresponde con el ciclo 8 del núcleo tipo VVER-1000 Kozloduy-6, que está completamente descrito en las referencias [78, 79]. En la figura 12.6

Figura 12.6: Disposición radial de los bancos de control en el núcleo VVER

se incluye una representación del núcleo y la disposición radial de los bancos de control. El estado inicial se simula en condiciones de quemado EOC y a plena potencia. En este ejercicio también se incluyen un conjunto de estados estacionarios a HZP. Se consideran dos escenarios: uno realístico, próximo a los considerados en los procesos de licenciamiento actuales y otro pesimista, derivado del primero pero suponiendo que todas las bombas del primario siguen en operación y que las secciones eficaces de los bancos de control se modifican para que se produzca un retorno a potencia después del disparo.

Los estados estacionarios HZP se definen de la siguiente manera: la potencia del reactor es de 3000 W, las temperaturas del combustible y del refrigerante son 552.15 K, y la densidad del moderador es $766,5 \text{ kg/m}^3$ a 15.8 MPa. En la tabla 12.8 se listan todos los estacionarios HZP que se realizan en este *benchmark*.

La librería de secciones eficaces fue generada nuevamente con APOLLO2 y aplicando el procedimiento de optimización. La librería está tabulada en función de tres variables: temperatura Doppler, temperatura del moderador y densidad del moderador. Para la primera variable se obtuvieron 5 data-points (470, 852.5, 1235, 1617.5, 2000 K), 3 para la segunda (470, 545, 620 K) y 13 para la densidad (76, 102, 128, 154, 207, 259, 311, 363, 467.5, 572, 676, 885 kg/m^3). Destaca el abultado número de puntos de malla para la densidad del moderador, debiéndose a que se escogió un rango de variabilidad muy ancho, comenzando en un valor de densidad muy bajo correspondiente a altas ebulliciones.

La librería de secciones eficaces está disponible en dos formatos:

Caso	Condiciones TH	Posición de barras	Escenario XS's
0	HZP	Grupos 1-10 ARO	1
1a	HZP (casi crítico)	Grupos 1-5 ARO, 7-10 ARI Grupo 6 81 % extraído	1
1b	HZP	Grupos 1-10 ARI	1
2	HFP	Grupos 1-9 ARO Grupo 10 80 % ext.	1
3	HZP	Grupos 1-10 ARI Barra 90 100 % ext.	1
4	HZP	Grupos 1-10 ARI Barra 140 100 % ext.	1
5	HZP	Grupos 1-10 ARI Barras 140 y 117 100 % ext.	2

Tabla 12.8: Definición de estados estacionarios del *benchmark* V1000-CT2

- Compacta, donde los factores de discontinuidad no se dan explícitamente sino que se aplica la teoría SET por la que se dividen los valores de las secciones eficaces entre ellos. Además, la sección eficaz de *up-scattering* no se da sino que se corrige la de *down-scattering*.
- Extendida, donde se dan todos los parámetros de manera explícita: factores de discontinuidad, matriz de dispersiones completa, etc.

Para la simulación del transitorio se asume que tras el disparo del reactor las barras número 117 y 140 se quedan atascadas. Nuevamente se requiere de unas condiciones de contorno que incluyan la respuesta de la planta ante el suceso iniciador. Estas condiciones se han generado con el código de planta CATHARE2 e incluyen la información de caudal de entrada al núcleo, temperatura de entrada al núcleo y presión a la salida para todos los canales y por paso de tiempo.

12.4.2. Resultados

En la tabla 12.9 se proporcionan los resultados obtenidos con COBAYA para algunos de los estados estacionarios. Se incluyen valores de k -efectiva, factor de pico radial y factor de pico axial. Estos resultados están en buen acuerdo con otras soluciones, como es el caso de la aportada por DYN3D [117]. En la figura 12.7 se muestra por ejemplo el perfil axial de potencia para el caso 1a utilizando la librería compacta y se observa que son perfiles prácticamente superpuestos.

Respecto al transitorio en la figura 12.8 se muestra la comparación de la evolución de la potencia durante el MSLB empleando tres sistemas: COBAYA4/CTF, DYN3D/CTF y

Caso	Lib. XS	Escenario	k-efectiva	F_{xy}	F_z
0	Compacta	1	1.02534	1.341	2.983
0	Extendida	1	1.02541	1.344	3.010
1a	Compacta	1	0.98804	1.406	2.001
1a	Extendida	1	0.98757	1.431	1.997
1b	Compacta	1	0.94823	1.454	2.713
1b	Extendida	1	0.94851	1.473	2.764
4	Compacta	2	0.99792	1.8	2.835
4	Extendida	2	0.99828	1.77	2.893
5	Compacta	2	0.99891	2.504	2.801
5	Extendida	2	0.99923	2.446	2.853

Tabla 12.9: Resultados obtenidos con COBAYA para los estados estacionarios

Figura 12.7: Perfil axial de la potencia para el estado estacionario 1a con COBAYA y DYN3D

Figura 12.8: Evolución de la potencia del núcleo VVER durante el transitorio MSLB

COBAYA3/FLICA4. Se observa que se produce un retorno a potencia alcanzando un valor máximo en torno al 66-68 % del valor nominal. El acuerdo entre las tres soluciones es bueno existiendo un ligero desplazamiento entre las curvas. En el caso entre DYN3D y COBAYA4 esta diferencia se debe al método de resolución neutrónico mientras que en las versiones de COBAYA se debe al esquema de acoplamiento ya que el esquema de cálculo neutrónico es el mismo. En [117] se presentan también comparaciones en la distribución de potencia en diferentes instantes del transitorio

Parte V

CONCLUSIONES

Capítulo 13

Conclusiones y desarrollos futuros

En este último capítulo se exponen las conclusiones del trabajo de investigación realizado y se proponen algunas ideas adicionales como desarrollos futuros del mismo.

13.1. Conclusiones

El presente trabajo se ha dedicado a la generación de librerías optimizadas de secciones eficaces incluyendo covarianzas, para su utilización posterior en el análisis BEPU de transitorios de reactores nucleares. Esta tesis se enmarca dentro de la participación de la UPM en el *OECD/NEA Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modeling for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs* y del proyecto de investigación europeo NURE-SAFE correspondiente al 7º Programa Marco. A continuación se exponen las principales conclusiones sobre el trabajo realizado agrupadas por las diferentes áreas temáticas.

En relación a las fuentes de incertidumbre neutrónicas y metodologías para su propagación a las librerías de secciones eficaces homogeneizadas

- **Debidas a los datos nucleares**

La forma de aportar datos de incertidumbre con una librería de secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos es suministrando, junto con los valores nominales de la librería, una matriz de covarianzas. Esta matriz debe incluir incertidumbres en las constantes y correlaciones entre: grupos de energía, tipos de reacción y regiones de homogeneización.

Con SCALE es posible obtener esta matriz de covarianzas empleando dos secuencias diferentes: SAMPLER y TSUNAMI, basadas respectivamente en muestreo aleatorio y teoría de perturbaciones de primer orden. Ambas opciones ofrecen resultados de incertidumbres y de correlaciones equivalentes, lo que muestra que la aproximación de primer orden en cálculos puramente neutrónicos es aceptable, no habiendo efectos no lineales.

Sin embargo, el uso de teoría de perturbaciones de primer orden exige tener formulada e implementada la resolución del problema adjunto para cada respuesta, lo que no siempre

está disponible. Por ejemplo, en TSUNAMI no es posible obtener las incertidumbres para los factores de discontinuidad o coeficientes de difusión. Por ello se identifica la herramienta SAMPLER como idónea para obtener la matriz de covarianzas ya que permite propagar incertidumbres de todas las constantes (secciones eficaces y factores de discontinuidad) a las librerías de una forma directa, pudiendo determinarse los coeficientes de correlación entre ellas.

Un análisis estadístico permite comprobar que tanto la k -inf como las secciones eficaces homogeneizadas se distribuyen de acuerdo a una distribución normal, siendo verificado además por un test de bondad de ajuste χ^2 . Por ello, la media y la desviación típica son parámetros adecuados para caracterizar su incertidumbre. Y si se dispone de estos valores, junto con la matriz de covarianzas, es posible por muestreo aleatorio de una distribución normal obtener librerías perturbadas para aplicar metodologías basadas en muestreo para la propagación de incertidumbres a cálculos de núcleo.

Por tanto, el producto obtenido de la tesis es una librería, nodal o *pin-by-pin*, acompañada de una matriz de covarianzas o un conjunto de 900 librerías diferentes (necesarias para eliminar el sesgo entre el valor medio y el valor nominal). Ambas opciones son válidas para la propagación de incertidumbres con un simulador de núcleo, aplicando teoría de perturbaciones y la regla del sándwich en el primer caso y un cálculo basado en muestreo en el segundo. Sin embargo, hay que destacar que en los cálculos *pin-by-pin* donde la homogeneización es a nivel de celda, la dimensión de la matriz de covarianzas se incrementa notablemente (en un factor de 64 para elementos simétricos de configuración 15x15). La estructura individual de los bloques correspondientes a celdas de combustibles son bastante similares entre sí, resultando además que los valores de incertidumbre son a su vez muy parecidos a los de homogeneización nodal. El tamaño de la matriz de covarianzas *pin-by-pin* no constituye un problema para un cálculo en condiciones termohidráulicas fijas, pero puede serlo al generar una librería con la dependencia de variables termohidráulicas como se requiere para transitorios.

Respecto a la cuantificación de incertidumbres, se han obtenido incertidumbres, expresadas en valor relativo, de 0.537 % en la k -infinito (lo que equivale a 625 pcm) y oscilando entre 0.17 % y 1.42 % para las secciones eficaces homogeneizadas. Se ha comprobado que las secciones eficaces correspondientes al grupo rápido siempre tienen mayor incertidumbre que las del grupo térmico (por ejemplo, 0.962 % frente a 0.17 % en la absorción o 0.626 % frente a 0.497 % en la ν -fisión). La constante homogeneizada con mayor incertidumbre es el coeficiente de difusión, nuevamente del grupo rápido (2.65 %) seguido de la dispersión del grupo rápido al térmico o *down-scattering* (1.42 %). Entre los mayores contribuyentes a la incertidumbre de las secciones eficaces del grupo rápido se encuentran la reacción de captura y de dispersión inelástica, ambas en el U^{238} , lo que los convierte en los datos nucleares más susceptibles de ser reevaluados. Hay que destacar que estos valores corresponden al uso de la matriz de covarianzas 56COV-SCALE6.2. Se ha estudiado el impacto de utilizar otra matriz de covarianzas (en concreto, se ha utilizado la 44COV-SCALE6.1), observándose diferencias muy apreciables. Se concluye por tanto que las estimaciones de incertidumbres en los cálculos neutrónicos van a reflejar inevitablemente la matriz de covarianzas básica empleada, por lo que dichas estimaciones tienen que ser reevaluadas a medida que se avance en el conocimiento de los datos nucleares.

Adicionalmente se ha estudiado la influencia de algunas variables sobre las covarianzas de las constantes en pocos grupos. Se observa que el tipo de elemento modifica tanto las incertidumbres como las correlaciones. En cambio, no se producen diferencias significativas en las incertidumbres cuando se varía la vecindad y las condiciones de operación. Las correlaciones por su parte sí difieren tanto con la configuración como con las condiciones de operación. Se concluye que para generar las matrices de covarianzas es necesario considerar las mismas dependencias que para generar las secciones eficaces nominales.

- **Debidas a las incertidumbres tecnológicas**

La propagación de las incertidumbres tecnológicas (diámetro de la pastilla de combustible, espesor del huelgo, espesor de la vaina, densidad del combustible y concentración de uranio 235) a las librerías de secciones eficaces se ha llevado a cabo con la metodología basada en muestreo. La comparación entre incertidumbres debidas a los datos nucleares y tecnológicas muestra como la importancia de éstas últimas es prácticamente despreciable frente a las primeras en el parámetro integral k-infinito, siendo uno o dos órdenes de magnitud inferior. Sin embargo, en las secciones eficaces ambos valores de incertidumbre son semejantes.

También se ha comprobado que el grado de correlación entre ambas fuentes de incertidumbre es prácticamente inexistente lo que permite el muestreo independiente de parámetros (datos nucleares y variables geométricas).

- **Debidas a métodos y modelos**

Se ha llevado a cabo una valoración de los errores introducidos por los métodos y modelos, que en el caso de la aproximación estándar se trata principalmente de la aproximación en multigrupos y las simplificaciones en el cálculo *lattice*. Primeramente, se han valorado los errores en los cálculos de *cell physics* correspondientes al autoblandaje de las resonancias, comparando valores de k-infinito y secciones eficaces suministrados por cálculos de Monte Carlo en energía continua y en multigrupos (código KENO de SCALE6.2). Los resultados muestran que los errores debidos a la aproximación de multigrupos no superan las 35 pcm.

Se han valorado también los errores asociados al cálculo *lattice* comparando los resultados obtenidos por un cálculo de Monte Carlo con el código *lattice* empleado (KENO-MG y NEWT) con la misma utilizando en ambos casos la misma estructura energética. Se ha comprobado que estos errores son del orden de 100 pcm, mucho mayores que los introducidos por el autoblandaje, obteniendo además unos errores mayores (150 pcm) en los elementos con control insertado. Eso sugiere la necesidad de refinar las opciones del cálculo *lattice* en elementos con mucha heterogeneidad para reducir el error sistemático.

Respecto a la introducción de errores debidos a métodos y modelos en los cálculos de núcleo completo se ha desarrollado una metodología para minimizar el error de interpolación al emplear librerías tabuladas. Esta metodología está basada en el empleo de coeficientes de sensibilidad que permiten refinar la malla de puntos en aquellas regiones donde el error de interpolación tenga mayor efecto sobre la k-efectiva. Se trata por tanto de un procedimiento de optimización para determinar la distribución de *data-points* de la librería.

En relación a la revisión del proceso de generación de secciones eficaces

Se ha llevado a cabo una revisión del proceso de generación de librerías de secciones eficaces homogeneizadas necesarias para cálculos de difusión. El objetivo de esta revisión es introducir una serie matices que permitan la generación de librerías avanzadas. Se propone que los cálculos *lattice* deben ser cálculos de búsqueda de *k*-efectiva y no de búsqueda de *buckling* por la variación que produce en el valor del coeficiente de difusión. Asimismo se propone una corrección para los factores de discontinuidad de elementos adyacentes al reflector.

En la generación de librerías para cálculos *pin-by-pin* se propone llevar a cabo la homogeneización a partir de cálculos de elemento y no de cálculos de celda en red regular infinita; homogeneización que debe realizarse para cada celda individualmente dentro del elemento, teniendo en cuenta su entorno, y no agrupando por tipo de celda. De esta manera se pueden obtener los factores de discontinuidad de cada celda que permitirán un cálculo de difusión *best-estimate*.

Se han generado librerías de secciones eficaces utilizando los códigos *lattice* APOLLO2 y NEWT/SCALE. Ambas pueden aplicarse en el código de difusión COBAYA, ya que se han desarrollado herramientas de post-proceso que a partir de los *outputs* de transporte permiten acondicionar los datos en el formato de lectura de COBAYA y calcular los factores de discontinuidad a partir de los datos de corrientes y flujos de interfase proporcionados por los códigos *lattice*. Es decir, se tiene en cuenta el acoplamiento existente entre el código *lattice* empleado y el simulador de núcleo, en este caso, COBAYA.

Se identifica como óptima para la generación de librerías de secciones eficaces para su utilización rutinaria en la UPM la secuencia SCALE6.2/COBAYA por dos razones: por motivos de licencia (APOLLO2 es un código propietario) y por las capacidades para análisis de sensibilidad e incertidumbre incluidas en SCALE. Se dispone por tanto del sistema SCALE6.2/COBAYA como herramienta robusta con la capacidad de predicción de incertidumbres en cálculos de núcleo completo.

En relación a la aplicación a cálculos de núcleo completo

Para poder llevar a cabo cuantificación de incertidumbres en cálculos puramente neutrónicos de núcleo completo pueden emplearse códigos de transporte. Existen herramientas, como por ejemplo los módulos TSUNAMI/KENO de SCALE6.2, que permiten obtener coeficientes de sensibilidad de la *k*-efectiva en cálculos de transporte de núcleo completo y por tanto propagar las incertidumbres en dicha respuesta mediante la regla del sándwich. Sin embargo, las incertidumbres en otras respuestas, como por ejemplo la potencia, no pueden ser calculadas al no tener implementada la formulación de la obtención de los coeficientes de sensibilidad respecto a esas respuestas. La alternativa sería recurrir a la metodología basada en muestreo utilizando los módulos SAMPLER/KENO-3D, que si permitiría la obtención directa de las incertidumbres en cualquier respuesta, pero con un elevadísimo coste computacional y no siendo de aplicabilidad práctica. Se hace necesario, por tanto, aplicar códigos de difusión para la evaluación de incertidumbres en cálculos de núcleo completo, resultando además imprescindibles para cálculos de transitorios (con acoplamiento termohidráulico).

Se han identificado dos técnicas de propagación de incertidumbres en cálculos de núcleo

completo empleando el código COBAYA. La metodología determinista o basada en el empleo de coeficientes de sensibilidad sólo permiten propagar incertidumbres a la *k*-efectiva mientras que la metodología por muestreo permite a más respuestas como la potencia. Se han llevado a cabo dos ejercicios de propagación: propagando incertidumbres debidas a datos nucleares y propagando además las incertidumbres tecnológicas, y nuevamente se ha visto que la influencia de las segundas es casi inapreciable con respecto a las primeras. Los cálculos se han hecho además en los dos niveles posibles: nodal y *pin-by-pin*. Los valores de incertidumbre en la *k*-efectiva se sitúan en torno a 0.5 %, independientemente del cálculo (nodal o *pin-by-pin*) y de la configuración (ARO o ARI). Ello implica que la aproximación lineal asociada a la metodología determinista es perfectamente aceptable para la propagación de incertidumbres a la *k*-efectiva de un cálculo de núcleo estacionario. Las incertidumbres en la potencia oscilan desde máximos del 2 % en ARO hasta del 7 % en ARI.

Se han llevado a cabo análisis de dos diferentes transitorios: una expulsión de barra de control y un MSLB. En ambos casos el análisis se hace con diferentes librerías para valorar los efectos que tienen sobre los resultados, el código con el que se genera y la optimización propuesta. Concretamente, el análisis de expulsión de barra se lleva a cabo con tres librerías diferentes lo que permite comparar librerías generadas con diferentes códigos (HELIOS y APOLLO) y librerías optimizadas y no optimizadas. Los resultados muestran que diferentes códigos neutrónicos utilizando la misma librería, la generada con HELIOS, ofrecen resultados muy similares, lo que constituye un buen ejercicio de verificación. Sin embargo, los resultados de COBAYA utilizando librerías generadas con APOLLO difieren enormemente de los anteriores, y se aproximan a su vez a los de otros códigos con librerías propias. Ello invita a suponer que la librería generada con HELIOS no se corresponde con la isotopía especificada, utilizada para generar las otras librerías con APOLLO. El efecto de la optimización supone una diferencia del 7 % en el valor del pico de potencia. El transitorio MSLB, propuesto en el proyecto NURESAFE, se ha simulado con dos librerías diferentes, una optimizada y otra reducida, obteniéndose diferencias del 8 % en el valor máximo de potencia.

Ambos casos prueban la influencia de los errores de interpolación al reproducir los valores de secciones eficaces en el código de núcleo sobre los resultados finales. Esto es, los errores de interpolación son una fuente no despreciable de incertidumbre cuyo impacto debe ser tenido en cuenta en cálculos *best-estimate*. Estas incertidumbres se pueden reducir optimizando adecuadamente la distribución de puntos (*data-points*) para los que se tabula los valores de las secciones eficaces.

Por último se ha realizado un análisis resumido sobre un MSLB en un reactor VVER, al haber sido objeto de atención en uno de los paquetes de trabajo del proyecto NURESAFE en los que la UPM ha estado involucrada. Las soluciones predichas por COBAYA, tanto en el transitorio como en estados estacionarios, es muy similar a la proporcionada por el código DYN3D. Así mismo, en este paquete de trabajo la generación de librerías ha sido objeto de mucha atención, especialmente para computar los factores de discontinuidad, que permiten que las soluciones predichas por COBAYA sean más similares a teoría de transporte.

13.2. Desarrollos futuros

Durante la realización de esta tesis varios puntos de potencial interés no han sido abordados, y abren varias líneas de continuación para trabajos futuros.

Estudio de una metodología para evaluar el error sistemático

Los métodos y modelos empleados en la aproximación estándar (cálculos *lattice*) para determinar las secciones eficaces homogeneizadas en pocos grupos introducen, como se ha visto en la tesis, errores sistemáticos o sesgos. Esos errores han sido evaluados para distintas secciones eficaces al disponerse de lo que puede denominarse experimentos numéricos (valores proporcionados por cálculos de Monte Carlo de energía continua). Cabe plantearse la siguiente pregunta: ¿Es posible extrapolar la información obtenida de la comparación entre las secciones eficaces de cálculos *lattice* y experimentales a otras secciones eficaces similares en las que no se ha evaluado el sesgo?

Las herramientas TSUNAMI-IP y TSURFER de SCALE se están utilizando actualmente en el campo de la criticidad para evaluar las similitudes entre aplicaciones y experimentos (TSUNAMI-IP) y utilizarlas para inferir el sesgo que se está produciendo en una determinada aplicación e incluso ajustar el resultado (TSURFER). El grado de similitud o coeficiente de correlación se determina en función de los coeficientes de sensibilidad junto con la matriz de covarianzas en la regla del sándwich. Sería interesante aplicar estas mismas herramientas para evaluar si es posible estimar el sesgo de las secciones eficaces determinadas con códigos *lattice*.

Para aplicar esta aproximación, habría que aceptar la premisa de asumir que secciones eficaces que tengan sensibilidades similares a los datos nucleares tendrán sesgos computacionales similares. Los sesgos están producidos por la aproximación en multigrupos y las aproximaciones en la resolución de transporte, que tendrán un impacto diferente en función de la composición isotópica del caso. Habría que analizar si secciones eficaces con sensibilidades similares, presentan sesgos similares respecto a los valores experimentales que proporcionaría un cálculo de Monte Carlo de energía continua. En ese caso, esta herramienta podría permitir acompañar a la librería generada de una estimación del sesgo en sus secciones eficaces a partir del sesgo calculado para unas pocas o incluso podría permitir minimizar dicho sesgo.

Validación del sistema SCALE6.2/COBAYA

Se apunta la necesidad de validar más exhaustivamente el sistema SCALE6.2/COBAYA respecto a cálculos de transporte de Monte Carlo (KENO en energía continua sería la opción óptima). En esta tesis se han contrastado soluciones de COBAYA frente a resultados de NEWT en configuraciones sencillas (reflector o elemento *pin-by-pin*) con objeto de comprobar el correcto cálculo y utilización de los factores de discontinuidad. Sin embargo, se exige una validación más robusta comparando, no sólo valores de *k*-efectiva, sino también distribuciones de potencia, tanto a nivel nodal como *pin-by-pin*.

Validación del sistema SCALE6.2/COBAYA/COBRA-TF

Gracias al trabajo realizado dentro del proyecto NURESAFE que ha permitido la integración

y acoplamiento de los códigos COBAYA y COBRA-TF dentro de la plataforma SALOME, se dispone de la secuencia completa SCALE6.2/COBAYA/COBRA-TF para llevar a cabo análisis *best-estimate* completos, y no sólo desde el punto de vista neutrónico. Nuevamente, esta secuencia debe validarse frente a modelos considerados precisos. Concretamente, y en colaboración con la NCSU, desarrolladores de la última versión de COBRA-TF, ya se está realizando la validación respecto al sistema MCNP/COBRA-TF (al disponer la NCSU de un acoplamiento entre estos códigos), para un elemento combustible.

Generación de librerías con incertidumbres para simulaciones multifísica

En esta tesis las librerías generadas con incertidumbres se han limitado a casos puramente neutrónicos. El siguiente paso inmediato sería la generación de librerías avanzadas que permitan la cuantificación de incertidumbres en escenarios multifísica en los que intervenga el quemado y/o la termohidráulica. Habría que analizar las nuevas fuentes de incertidumbre que aparecen; sin ser exhaustivo, habría que tener en cuenta las incertidumbres en nuevos datos nucleares como los rendimientos de fisión y las constantes de desintegración, incertidumbres en las condiciones de operación, efectos inducidos por la irradiación, o incertidumbres de la termohidráulica.

Cálculos UQ en simulaciones multifísica y multiescala con COBAYA/COBRA-TF

Sería muy interesante, ya que se dispone de un sistema que permite llevar a cabo cálculos acoplados neutrónicos/termohidráulicos, de realizar un ejercicio de propagación de incertidumbres en simulaciones multifísica y multiescala (a diferentes niveles de detalle: nudo/canal, *pin-cell*/subcanal, *pin-cell*/canal). El mejor método podría ser un muestreo aleatorio de los distintos parámetros inciertos, siguiendo la misma secuencia que el esquema nominal de cálculo acoplado.

Implementación de la resolución de la ecuación adjunta para la potencia en COBAYA

Con objeto de poder aplicar la metodología determinista para la propagación de incertidumbres con COBAYA en respuestas diferentes a la *k*-efectiva, como por ejemplo la potencia, convendría implementar la resolución de la ecuación adjunta para esta respuesta. Ello permitiría disponer de los coeficientes de sensibilidad de la potencia respecto a las secciones eficaces homogeneizadas, y obtener sus incertidumbres aplicando la regla del sandwich, lo que permitiría realizar una comparación más rigurosa con la metodología basada en muestreo.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía

- [1] C. Ahnert. *Desarrollo y validación de Métodos de Cálculo de Núcleos Heterogéneos de Reactores de Agua Ligera*. PhD thesis, Facultad de Ciencias Físicas de la Universidad Complutense de Madrid, 1985.
- [2] C. Ahnert, J.M. Aragonés, A. Crespo, A. Labay, and J.R. León. Validation of the PWR Core Analysis System SEANAP-86 with Measurements in Test and Operation. In *International Meeting on Advances in reactor Physics, Mathematics and Computation*, volume I, page 471, April 27-30 1987.
- [3] C. Ahnert, J.M. Aragonés, A. Crespo, A. Labay, and J.R. León. Validation of the PWR Core Analysis System SEANAP with Measurements in Test and Operation. *Nuclear Science and Engineering*, 100:305, 1988.
- [4] S. Akimushkin et al. Validation of a pin-by-pin heterogeneous method against LWR MOX benchmarks. In *PHYSOR 2002*, 2002.
- [5] J.M. Aragonés and C. Ahnert. A Linear Discontinuous Finite Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion. *Nuclear Science and Engineering*, 94:309, 1986.
- [6] M. Avramova and K. Ivanov. Verification, validation and uncertainty quantification in multi-physics modeling for nuclear reactor design and safety analysis. *Progress in Nuclear Energy*, 52(7):601–614, 2010.
- [7] B. Becker and P. Schillebeeckx. Evaluation of measurement uncertainties. Technical report, GENTLE, Geel, 23-27 June 2014. Intersemester course Nuclear Safeguards and Security.
- [8] C. Beckert and U. Grundmann. Development and verification of a nodal approach for solving the multigroup SP3 equations. *Annals of Nuclear Energy*, 35(1):75–86, 2008.
- [9] P.R. Bevington and K. Robinson. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill, 2003.
- [10] P.M. Bokov. Automated few-group cross-section parameterization based on quasi-regression. *Annals of Nuclear Energy*, 36(8):1215 – 1223, 2009.
- [11] D. Botes and P.M. Bokov. Polynomial interpolation of few-group neutron cross sections on sparse grids. *Annals of Nuclear Energy*, 64:156–168, 2014.

-
- [12] B.L. Broadhead. Uncertainty analysis methods for S/U criticality validation techniques. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 83:93–95, 2000.
- [13] B.L. Broadhead, B.T. Rearden, C.M. Hopper, J.J. Wagschal, and C.V. Parks. Sensitivity- and Uncertainty-Based Criticality Safety Validation Techniques. *Nuclear Science and Engineering*, 146:340–366, 2004.
- [14] O. Buss, A. Hoefer, and J. Nueber. NUDUNA - Nuclear Data Uncertainty Analysis. In *Proc. Int. Conf. on Nuclear Criticality (ICNC 2011)*, 2011. Edingburgh, Scotland.
- [15] O. Cabellos, E. Castro, C. Ahnert, and C. Holgado. Propagation of nuclear data uncertainties for PWR core analysis. *Nuclear Engineering and Technology*, 46(3), 2014.
- [16] D. G. Cacuci. *Sensitivity and Uncertainty Analysis: I Theory*. Chapman & Hall, 2003.
- [17] D. G. Cacuci, J. M. Aragonés, D. Bestion, P. Coddington, and C. Chauliac. NURE-SIM: A European Platform for Nuclear Reactor Simulation. In *Proceedings of FISA 2006*, 2006.
- [18] E. Castro, C. Ahnert, O. Buss, N. Garcia-Herranz, A. Hoefer, and D. Porsch. Improving pwr core simulations by monte carlo uncertainty analysis and bayesian inference. *Annals of Nuclear Energy*, 95:148–156, 2016.
- [19] E. Castro, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, and D. Cuervo. Uncertainty propagation techniques for nodal and pin-by-pin full core calculations using cobaya diffusion code. *Annals of Nuclear Energy*, 2017. Submitted.
- [20] E. Castro, S. Sánchez-Cervera, A. Martínez Campo, and N. García-Herranz. Uncertainty propagation techniques for reactor core calculations using COBAYA code. Technical report, UPM, 2015. Presented in UAM9 Meeting, Madrid.
- [21] B. Chanaron, C. Ahnert, N. Crouzet, V. Sanchez, N. Kolev, O. Marchand, S. Kliem, and A. Papukchiev. Advanced Multi-physics simulation for reactor safety in the framework of the NURES SAFE project. *Annals of Nuclear Energy*, 84:166–177, 2015.
- [22] Y.A. Chao. A theoretical analysis of the coarse mesh finite difference representation in advanced nodal methods. In *Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, 1999.
- [23] Y.A. Chao. Coarse mesh finite difference methods and applications. In *PHYSOR-2000*, 2000.
- [24] C. Chauliac. NUClear Reactor Integrated Simulation Project NURISP. Technical report, 2009.
- [25] C. Chauliac, J.M. Aragonés, D. Bestion, D.G. Cacuci, N. Crouzet, F.P. Weiss, and M.A. Zimmermann. NURESIM - A European simulation Platform for nuclear reactor safety: Multi-scale and Multi-physics calculations, sensitivity and uncertainty analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 241(9):3416–3426, 2011.

-
- [26] N. Cho et al. Whole-core heterogeneous transport calculation and their comparison with diffusion results. In *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 2000.
- [27] D. Colemann et al. As-Built Design and Material Characteristics of the TMI-2 Core. Technical report, NSAC, EPRI, 1986.
- [28] M. Coste-Delclaux and S. Mengelle. New resonant mixture self-shielding treatment in the code APOLLO2. In *PHYSOR04*, 2004. Chicago, IL, USA. April 25-29.
- [29] A. Crespo, J.M. Aragonés, and C. Ahnert. Pin Power and Burnup Calculation by the SEANAP PWR Core Analysis System. In *International Reactor Physics Conference*, volume II, 1988.
- [30] Cross Sections Evaluation Working Group (CSEWG). ENDF-6 Formats Manual. Data formats and procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. Technical report, BNL-90365-2009 Rev.2, ENDF-102, BNL, 2012.
- [31] F. Curca-Tivig, S. Merk, A. Pautz, and S. Thareau. ARCADIA - A new generation of coupled neutronics/core thermal-hydraulics code system at AREVA NP. In *Proc. Int. Conf. LWR fuel performance meeting*, Sept. 2007. San Francisco, CA, USA.
- [32] M. Daeubler, A. Ivanov, B.L. Sjenitzer, V. Sanchez, R. Stieglitz, and R. Macian. High-fidelity coupled Monte-Carlo neutron transport and thermal-hydraulic simulations using Serpent 2/SUBCHANFLOW. *Annals of Nuclear Energy*, 83:352–375, 2015.
- [33] M.D. DeHart. *NEWT: A new transport algorithm for two-dimensional discrete-ordinate analysis in non-orthogonal geometries*. Oak Ridge National Laboratory, 6.2 edition, 2015.
- [34] P.J. Dossantos-Uzarralde and A. Guittet. A polynomial chaos approach for nuclear data uncertainties evaluations. *Nuclear Data Sheets*, 109(12):2894–2899, 2008.
- [35] T. Downar, D. Lee, Y. Xu, T. Kozlowski, and J. Staudenmier. *PARCS V2.6 U.S. Nrc Core Neutronics Simulator Theory Manual*. Purdue University, Lafayette, 2006.
- [36] J. Dufek. Building the nodal nuclear data dependences in a many-dimensional state-variable space. *Annals of Nuclear Energy*, 38:1569–1577, 2011.
- [37] C.J. Díez de la Obra. *Development of a methodology for nuclear data uncertainty propagation on isotopic evolution calculations for advanced nuclear systems*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2014.
- [38] J.W. Eaton, D. Bateman, and S. Hauberg. *GNU Octave Manual Version 3*, network theory limited edition, 2008.
- [39] L. D. Eisenhart, A. F. Dias, J. L. Westcott, T. J. Downar, and H. G. Joo. CORETRAN-01: A Three-Dimensional Program for Core Physics and Thermal-Hydraulic Analysis. Technical report, EPRI Report WO-3574, Revision 3, 2000.

-
- [40] E. Brun et al. Overview of TRIPOLI-4 version 7 continuous-energy Monte-Carlo transport code. In *ICAPP 2011*, 2-5 May 2011. Nice, France.
- [41] J. A. Favorite. Eigenvalue Sensitivity Analysis using the MCNP5 Perturbation Capability. In *Nuclear Criticality Safety Division Topical Meeting*, September 13-17 2009. Richland, Washington.
- [42] H. Ferroukhi, O. Zerkak, and R. Chawla. Cross-section modelling effects on pressurised water reactor main steam line break analyses. *Annals of Nuclear Energy*, 36(8):1184 – 1200, 2009.
- [43] J.C.B. Fiel, F. Carvalho da Silva, A. Senra Martínez, and L.C. Leal. Parameterized representation of macroscopic cross section for PWR reactor. *Annals of Nuclear Energy*, 75:736–741, 2015.
- [44] T. Fujita, K. Tada, A. Yamamoto, Yamane Y., S. Kosaka, and G. Hirano. Investigation on macroscopic cross section model for BWR pin-by-pin core analysis. In *PHYSOR 2010*. Pittsburg, Pennsylvania, USA, 2010.
- [45] M. Gamarino, D. Tomatis, A. Dall’Osso, D. Lathouwers, J.L. Kloosterman, and T.H.J.J. van der Hagen. Investigation of rehomogenization in the framework of nodal cross section corrections. In *PHYSOR2016*, 2016. Sun Valley, Idaho, USA.
- [46] N. García-Herranz. Overview de SCALE/TSUNAMI. Technical report, UPM, Julio 2013. Seminario de Formación.
- [47] N. García-Herranz, O. Cabellos, J. Sanz, J. Juan, and J.C. Kuijper. Propagation of statistical and nuclear data uncertainties in Monte Carlo burn-up calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 35(4):714–730, 2010.
- [48] N. García-Herranz, D. Cuervo, A. Sabater, G. Rucabado, S. Sánchez-Cervera, and E. Castro. Multiscale neutronics/thermal-hydraulics coupling with COBAYA4 code for pin-by-pin PWR transient analysis. *Nuclear Engineering and Design*, 2017. In press.
- [49] R. W. Garner, D. E. Owen, and M. R. Martin. An assessment of the TMI-2 axial power-shaping-rod dynamic test results. Technical report, EG&G Idaho. Idaho Falls, 1983.
- [50] F.D. Giust, R.J.J. Stamm’ler, and A.A. Ferri. HELIOS 1.7. User Guide and Manual. Technical report, Studsvik-Scandpower, 2001.
- [51] S. Goluoglu, S. Bowman, and M. Dunn. KENO Monte Carlo code capabilities. In *American Nuclear Society. Winter Meeting. Washington D.C.*, 11-15 November 2007.
- [52] G. Gunow, J. Tramm, B. Forget, K. Smith, and T. He. Simple MOC- A Performance abstraction for 3D MOC. In *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method*, 19-23 April 2015. Nashville, Tennessee.

-
- [53] J.J. Herrero. *Métodos avanzados multiescala núcleo-celdas en geometrías tridimensionales y multigrupos para el cálculo de reactores de agua ligera*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2012.
- [54] J.J. Herrero. Introducción a TSUNAMI-IP. Technical report, UPM, Julio 2013. Seminario de Formación.
- [55] J.J. Herrero, C. Ahnert, and J.M. Aragonés. 3D Whole Core Fine Mesh Multigroup Diffusion calculations by Domain Decomposition through Alternate Dissections. In *M&C/SNA*, 2007.
- [56] J.J. Herrero, A.F. Badea, and D.G. Cacuci. Sensitivity analysis and cross sections data adjustment for multigroup transport and diffusion. In *PHYSOR 2008*, 2008.
- [57] J.J. Herrero, N. García-Herranz, D. Cuervo, and C. Ahnert. Neighborhood-corrected interface discontinuity factors for multi-group pin-by-pin diffusion calculations for lwr. *Annals of Nuclear Energy*, 46:106–115, 2012.
- [58] J.J. Herrero and S. Sánchez-Cervera. *SAPHYB-BROWSER Manual*. UPM, 2015.
- [59] A. Hébert. A consistent technique for the pin-by-pin homogenization of a pressurized water reactor assembly. *Nuclear Science and Engineering*, 113(3):227, 1993.
- [60] A. Hébert. *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechnique, 2009.
- [61] A. Hébert and G. Mathonniere. Development of a 3rd-generation superhomogenization method for the homogenization of a pressurized water reactor assembly. *Nuclear Science and Engineering*, 115(2):129, 1993.
- [62] A. Ivanov, V. Sanchez, R. Stieglitz, and K. Ivanov. High fidelity simulation of conventional and innovative LWR with the coupled Monte-Carlo thermal-hydraulic system MCNP/SUBCHANFLOW. *Nuc. Eng. Desing*, 262:264–275, 2013.
- [63] A. Ivanov, V. Sanchez, R. Stieglitz, and K. Ivanov. Internal multi-scale multi-physics coupled system for high fidelity simulation of light water reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 66:104–112, 2014.
- [64] K. Ivanov, M. Avramova, S. Kamerow, I. Kodeli, E. Sartori, E. Ivanov, and O. Cabellos. *Benchmark for uncertainty analysis in modeling (UAM) for design, operation and safety analysis of LWRs*. OECD Nuclear Energy Agency, May 2013. Volume I: Specification and Support Data for Neutronics Cases (Phase I).
- [65] K. Ivanov, T.M. Beam, A.J. Barratta, A. Irani, and N. Trikouros. Pressurize Water Reactor Main Steam Line Break (MSLB) Benchmark. Volume I: Final Especifications. Technical Report NEA/NSC/DOC(99)8, Nuclear Energy Agency, April 1999.
- [66] M.A. Jessee, M.L. Williams, and M.D. DeHart. Development of Generalized Perturbation Theory capability within SCALE code package. In *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2009)*, 2009. Saratoga Springs.

-
- [67] J. Jiménez. *Desarrollo e implementación de la descomposición en subdominios del acoplamiento neutrónico-termohidráulico mediante disecciones alternadas con un sistema de cálculo multiescala*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2010.
- [68] J. Jiménez, D. Cuervo, and J.M. Aragonés. A domain decomposition methodology for pin-by-pin coupled neutronic and thermal-hydraulic analyses in COBAYA3. *Nuclear Engineering and Design*, 240(2):313–320, 2010.
- [69] H.G. Joo, J.Y. Cho, H.Y. Kim, S.Q. Zee, and M.H. Chang. Dynamic implementation of the equivalence theory in the heterogeneous whole core transport calculation. In *PHYSOR 2002*, 2002.
- [70] H.G. Joo, J.Y. Cho, K.S. Kim, C.C. Lee, and S.Q. Zee. Methods and Performance of a Three-Dimensional Whole-Core Transport code DeCART. In *PHYSOR 2004*, April 2004.
- [71] M. Klein, I. Pasichnyk, and W. Zwermann. Influence of nuclear data uncertainties on reactor core calculations. Technical report, GRS, 2011. Presented in UAM5 Meeting, Stockholm.
- [72] S. Kliem et al. D12.41-Final report on the advanced case of PWR MSLB benchmark. Technical report, HZDR, GRS, UJV, UPM, IRSN, PSI, 2015. Deliverable NURES SAFE Project.
- [73] S. Kliem, Y. Kozmenkov, J. Hadek, Y. Perin, F. Fouquet, F. Bernard, A. Sargeni, D. Cuervo, A. Sabater, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, O. Zerkak, H. Ferrroukhi, and P. Mala. Testing the NURESIM platform on a PWR main steam line break benchmark. *Nuclear Engineering and Design*, 2016. Submitted.
- [74] B. Kochuas, S. Stimpson, B. Collins, T. Downar, R. Brewster, E. Baglietto, and Yan J. Coupled full core neutron transport/CFD simulation of pressurized water reactors. In *PHYSOR2012*, 2012.
- [75] K. Koebke, H. Haase, L. Hetzelt, and H.J. Winter. Application and verification of the Simplified Equivalence Theory for burnup states. *Nuclear Science and Engineering*, 92(1):56–65, 1986.
- [76] N. Kolev, N. Petrov, I. Spasov, S. Sánchez-Cervera, and N. García-Herranz. D14.25b: Nodal-level XS library v.2 for VVER parameterized for MSLB. Technical report, INRNE, UPM, 2015. Deliverable NURES SAFE Project.
- [77] N. Kolev, G. Todorova, C. Magnaud, F. Damian, and P. Bellier. Development of calculation schemes and generation of XS libraries with APOLLO2 at the nodal level for CRONOS2 and DYN3D diffusion and SP3 analyses of PWR and VVER. Technical report, INRNE, CEA, 2011. Deliverable 1.3.1 NURISP Project.
- [78] N. P. Kolev, N. Petrov, J. Donovan, and D. Angelova. VVER-1000 Coolant Transient Benchmark Phase 2 (V1000CT-2), Vol. II: MSLB Problem, Final Specifications. Technical report, OECD NEA/NSC/DOC (2006)6, 2006.

-
- [79] N.P. Kolev, I. Spasov, N. Petrov, and J. Donovan. Specifications of the V1000CT2-EXT2 multi-physics benchmark of NURESIM 2007, Rev.1 Nov. 2008. Technical report, INRNE, 2007.
- [80] A.J. Koning and D. Rochman. Towards sustainable nuclear energy: Putting nuclear physics to work. *Annals of Nuclear Energy*, 35(11):2024–2030, 2008.
- [81] S. Kosaka and T. Takeda. Verification of 3D heterogeneous core transport calculation utilizing non-linear iteration technique. *Nuclear Science and Technology*, 41(6):645–654, June 2004.
- [82] T. Kozlowski and J. Downar. OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark, Final Specifications, Revision 2. Technical report, Purdue University, West Lafayette, Indiana USA, 2003.
- [83] T. Kozlowski and T. Downar. OECD/NEA and U.S.NRC PWR MOX/UO₂ core transient benchmark. Final Report. Technical report, NEA/NSC/DOC(2006)20, 2007.
- [84] T. Kozlowski, Xu Y., T.J. Downar, and D. Lee. Cell homogenization method for pin-by-pin neutron transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 169(1):1–18, 2011.
- [85] Y. Kozmenkov and S. Kliem. D12.11-PWR MSLB Specification report. Technical report, HZDR, 2014. Deliverable NURESAFE Project.
- [86] Oak Ridge National Laboratory. *SCALE: A comprehensive modeling and simulation suite for nuclear safety analysis and design. ORNL/TM-2005/39, Version 6.1*. Oak Ridge, Tennessee, June 2011. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- [87] G. S. Lee, N. Z. Cho, and S. G. Hong. Acceleration and parallelization of the method of characteristics for lattice and whole-core heterogeneous calculations. In *PHYSOR 2000*, 2000.
- [88] J. Leppänen. *SERPENT 2 - A continuous-energy Monte Carlo reactor physics burnup calculation code*. VTT Technical Research Center of Finland, 2013.
- [89] J. Leppänen, R. Mattila, and M. Pusa. Validation of the Serpent-ARES code sequence using the MIT BEAVRS Benchmark - Initial core at HZP conditions. *Annals of Nuclear Energy*, 69:212–225, 2014.
- [90] R.C. Little, T. Kawano, G.D. Hale, M.T. Pigni, M. Herman, P. Obložinský, M.L. Williams, M.E. Dunn, G. Arbanas, D. Wiarda, R.D. McKnight, J.N. McKamy, and J.R. Felty. Low-fidelity covariance project. *Nuclear Data Sheets*, 109(12):2828–2833, 2008.
- [91] J.A. Lozano. *Desarrollo de un código nodal analítico de difusión neutrónica en multigrupos para reactores en geometrías 3D rectangulares y hexagonales*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2010.

-
- [92] J.A. Lozano, J.M. Aragonés, and N. García-Herranz. The analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry: Development and performance analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 35:2365–2374, 2008.
- [93] Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA). *Neutronics. LE MONITEUR*, 2015. A Nuclear Energy Division Monograph.
- [94] R.E. MacFarlane, D.W. Muir, R.M. Boicourt, and A.C. Kahler. The NJOY Nuclear Data Processing System, version 2012. Technical Report LA-UR-12-27079, Los Alamos National Laboratory, December 2013.
- [95] R. Macian, M. Zimmermann, and R. Chawla. Statistical Uncertainty Analysis Applied to Fuel Depletion Calculations. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 44(6):875–885, 2007.
- [96] W.R. Martin. Challenges and prospects for whole-core Monte Carlo analysis. *Nuclear Engineering and Technology*, 44(2):151–160, 2012.
- [97] E. Masiello, B. Martin, and J.M. Do. Domain decomposition and CMFD Acceleration applied to discrete-ordinate methods for the solution of the transport equation in XYZ geometries. In *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*. Rio de Janeiro, Brasil, 2011.
- [98] R. Mendizábal Sanz. *Contribución al estudio de las metodologías de cálculo realista con incertidumbre (BEPU) dentro del análisis determinista de seguridad de plantas nucleares*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2016.
- [99] W.L. Oberkampf and C.J. Roy. *Verification and Validation in Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2010.
- [100] F. Plaza Martínez. Metodología de procesamiento de las librerías de secciones eficaces. Aplicación a la librería JEFF3.2. Master's thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2014. Trabajo Fin de Grado.
- [101] F. Puente Espel, M. Avramova, K. Ivanov, and S. Misu. New developments of the MCNP/CTF/NEM/NJOY code system - Monte Carlo based coupled code for high accuracy modeling. *Annals of Nuclear Energy*, 21:18–26, 2013.
- [102] C. Queral, M. Coriso, P.J. García-Sedano, J.A. Ruiz, J.M. Posada, G. Jiménez-Varas, I. Sol, and L.E. Herranz. Aplicación de los códigos termo-hidráulicos en el sector nuclear español. *Nuclear España*, 314:31–40, Enero 2011.
- [103] B. Rearden, L. Petrie, D. Peplow, K. Bekar, D. Wiarda, C. Celik, C. Perfetti, A. Ibrahim, S.W.D. Hart, M. Dunn, and W. Marshall. Monte Carlo capabilities of the SCALE code system. *Annals of Nuclear Energy*, 82:130–141, 2015.
- [104] B.T. Rearden and M.A. Jessee. *SCALE Code System*. ORNL/TM-2005/39, Version 6.2, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 2016. Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834.

-
- [105] D. Rochman, O. Leray, M. Hursin, H. Ferroukhi, A. Vasiliev, A. Aures, F. Bostelmann, W. Zwermann, O. Cabellos, C.J. Diez, J. Dyrda, N. Garcia-Herranz, E. Castro, S. van der Marck, H. Sjöstrand, A. Hernandez, M. Fleming, J.-Ch. Sublet, and L. Fiorito. Nuclear Data Uncertainties for Typical LWR Fuel Assemblies and a Simple Reactor Core. *Nuclear Data Sheets*, 139:1 – 76, 2017.
- [106] G. Rucabado, A. Sabater, and D. Cuervo. Acoplamiento independiente y automático entre códigos neutrónicos y termohidráulicos. In *41 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española*, 23-25 Septiembre 2015. La Coruña.
- [107] R. Sanchez. Assembly homogenization techniques for core calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 51:14–31, 2009.
- [108] R. Sanchez. APOLLO2 Year 2010. *Nuclear Engineering and Technology*, 42(5):474–499, October 2010.
- [109] R. Sanchez. Prospects in deterministic Three-Dimensional Whole-core Transport calculations. *Nuclear Engineering and Technology*, 44, March 2012.
- [110] R. Sanchez, G. Dante, and I. Zmijarevic. Diffusion piecewise homogenization via flux discontinuity ratios. *Nuclear Engineering and Technology*, 45:706–720, 2013.
- [111] A. Santamarina, P. Blaise, N. Dos Santos, C. Vaglio, and C. Saint-Jean. Nuclear data uncertainty propagation on power maps in large LWR cores. In *PHYSOR 2014*, 2014.
- [112] A. Santamarina, C. Collignon, and C. Garat. French calculation schemes for LWR analysis. In *PHYSOR04*, 2004. Chicago, IL, USA. April 25-29.
- [113] K. S. Smith. Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis. *Progress in Nuclear Energy*, 17, n^o3:303–355, 1986.
- [114] K. S. Smith. Nodal diffusion methods: understanding numerous unpublished details. In *PHYSOR 2016*, May 2016. Sun Valley, Idaho.
- [115] George W. Snedecor and William G. Cochran. *Statistical Methods*. Iowa State University Press, 1989.
- [116] L. Snoj, I. Lengar, G. Zerovnik, and M. Ravnik. MCNP and visualization of neutron flux and power distributions. In *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009)*, 2009. Saratoga Springs.
- [117] I. Spasov, S. Mitkov, N. Kolev, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, A. Sabater, D. Cuervo, J. Jimenez, V. Sanchez, and L. Vyskocil. Best-estimate simulation of a VVER MSLB core transient using NURESIM platform codes. *Nuclear Engineering and Design*, 2017. In press.
- [118] S. Sánchez-Cervera. Estudio de la funcionalización de secciones eficaces nodales en multigrupos para cálculos 3D neutrónicos-termohidráulicos para núcleos PWR. Master's thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2011. Proyecto fin de carrera.

-
- [119] S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, and F. Bernard. D12.24-Pin-level XS library parameterized for MSLB. Technical report, UPM, IRSN, 2014. Deliverable NURE-SAFE Project.
- [120] S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, and F. Bernard. D12.23-Nodal-level XS parameterized for MSLB. Technical report, UPM, IRSN, 2014. Deliverable NURESAFE Project.
- [121] S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, J.J. Herrero, and O. Cabellos. Optimization of multidimensional cross-section tables for few-group core calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 69:226 – 237, 2014.
- [122] S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, J.J. Herrero, and D. Cuervo. Effects of cross sections tables generation and optimization on rod ejection transient analyses. *Annals of Nuclear Energy*, 73:387 – 391, 2014.
- [123] S. Sánchez-Cervera, A. Sabater, D. Cuervo, and N. Garcia-Herranz. Coupled calculations COBAYA/CTF for different MSLB scenarios in the frame of NURESAFE project. In *M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering*, April 2017. Jeju, South-Korea.
- [124] M. Tatsumi and A. Yamamoto. SCOPE2: Object-Oriented Parallel Code for Multi-Group Diffusion-Transport Calculations in three-dimensional Fine-Mesh Reactor Core Geometry. In *PHYSOR 2002*, 2002.
- [125] M. Tatsumi and A. Yamamoto. Advanced PWR core Calculation based on multi-group nodal-transport method in Three-Dimensional pin-by-pin geometry. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 40(6):376, 2003.
- [126] X-5 Monte Carlo Team. MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 5, Volume I: Overview and Theory Report. Technical report, Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [127] R.B. Turski, E.E. Morris, T.A. Taiwo, and J.E. Calahan. Macroscopic cross section generation and application for coupled spatial kinetics and thermal hydraulics analysis with SAS-DIF3DK. In *Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications*. Saratoga Springs, New York, 6-10 Oct 1997.
- [128] M. Vazquez, H. Tsige-Tamirat, L. Ammirabile, and F. Martin-Fuertes. Coupled neutronics thermal-hydraulics analysis using Monte Carlo and sub-channel codes. *Nuc. Eng. Desing*, 250:403–411, 2012.
- [129] M. Vázquez Antolín. *Monte Carlo neutronics and thermal-hydraulics coupling applied to fast reactors*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2014.
- [130] J.K. Watson and K.N. Ivanov. Improved cross-section modeling methodology for coupled three-dimensional transient simulations. *Annals of Nuclear Energy*, 29:937–966, 2002.

-
- [131] D. Wiarda, M.L. Williams, C. Celik, and M.E. Dunn. AMPX: A Modern Cross Section Processing System for Generating Nuclear Data Libraries. In *Proceedings of International Conference on Nuclear Criticality Safety*, Sept. 13-17 2015. Charlotte, NC.
- [132] W. Wieselquist, H. Zhou, M. Jessee, A. Ward, and T. Downar. Polaris/PARCS Results for Exercise I-3. Technical report, ORNL, 2016. Presented in UAM 10 Meeting, PSI, Villigen, Switzerland.
- [133] M.L. Williams. Resonance Self-Shielding Methodologies in SCALE 6. *Nuclear Technology*, 174(2):149–168, May 2011.
- [134] M.L. Williams, G. Ilas, M.A. Jessee, B.T. Rearden, D. Wiarda, W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, and A. Pautz. A statistical sampling method for uncertainty analysis with SCALE and XSUSA. *Nuclear Technology*, 183(3):515–526, September 2013.
- [135] M.L. Williams, D. Wiarda, H. Smith, M.A. Jessee, B.T. Rearden, W. Zwermann, M. Klein, A. Pautz, B. Krzykacz-Hausmann, and L. Gallner. Development of a statistical sampling method for uncertainty analysis with SCALE. In *PHYSOR 2012*, 2012.
- [136] A. Yankov, B. Collins, M. Klein, M.A. Jessee, W. Zwermann, K. Velkov, A. Pautz, and T. Downar. A two-step approach to uncertainty quantification of core simulators. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2012.
- [137] V.G. Zimin and A.A. Semenov. Building neutron cross-section dependencies for few-group reactor calculations using stepwise regression. *Annals of Nuclear Energy*, 32(1):119 – 136, 2005.
- [138] W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, and A. Pautz. Influence of nuclear covariance data on reactor core calculations. In *Proc. Second Int. Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor Applications (WONDER 2009)*, pages 99–104, 2009. Cadarache, France.

CURRICULUM VITAE

Curriculum Vitae Abreviado

Formación

- Ingeniero Industrial por la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid Abril 2011
- Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Nuclear por la Universidad Politécnica de Madrid Noviembre 2012

Actividades docentes desempeñadas

- Colaboración en actividades docentes dentro del Dep. Ing. Energética por un total de 10 horas lectivas. Curso académico 2014-2015
- Colaboración en actividades docentes dentro del Dep. Ing. Energética por un total de 30 horas lectivas. Curso académico 2015-2016

Becas

- Beca de la Sociedad Nuclear Española para la realización de estudios de especialización nuclear Septiembre 2011
- Beca de la Fundación para el Fomento de la Innovación Industrial para la colaboración en proyectos de investigación científica y técnica Septiembre 2011 - Febrero 2012
- Beca de la Cátedra Federico Goded de la Universidad Politécnica de Madrid y Consejo de Seguridad Nuclear Marzo 2012 - Marzo 2017
- Contrato como personal investigador en formación en el Departamento de Ingeniería Energética de la Universidad Politécnica de Madrid Septiembre 2013 - Septiembre 2017

Proyectos en los que ha participado

- Proyecto NURISP (NUclear Reactor Integrated Simulation Platform). Proyecto integrado del 7º Programa Marco de la Comunidad Europea (EURATOM). Nº contrato 232124

- Proyecto NURESAFE (Nuclear Reactor Safety Simulation Platform). Proyecto integrado del 7º Programa Marco de la Comunidad Europea (EURATOM). Nº contrato 323263
- Acuerdo específico de colaboración entre el CSN y la UPM en el área de propagación de incertidumbres en los cálculos neutrónicos. Nº contrato P120530507

Estancias en centros extranjeros

- Estancia de 1 semana en el centro de investigación SCK·CEN (Bélgica) para la asistencia a al curso “*Operation and Control on Nuclear Power Plants*” (40 horas) dentro de la red europea ENEN Marzo 2013
- Estancia de 1 semana en el *Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire* (París) (Colaboración en el uso del código APOLLO dentro de NURESAFE) Febrero 2014

Publicaciones

- *Optimization of multidimensional cross-section tables for few-group core calculations.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, J.J. Herrero, O. Cabellos. *Annals of Nuclear Energy* 69, 226-237. 2014
- *Effects of cross sections tables generation and optimization on rod ejection transient analyses.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, J.J. Herrero, D. Cuervo. *Annals of Nuclear Energy* 73, 387-391. 2014
- *Uncertainty propagation techniques for nodal and pin-by-pin full core calculations using COBAYA diffusion code.* E. Castro, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, D. Cuervo. *Progress in Nuclear Energy* (en revisión). 2017
- *Multiscale neutronics/thermal-hydraulics coupling with COBAYA4 code for pin-by-pin PWR transient analysis.* N. García-Herranz, D. Cuervo, A. Sabater, G. Rucabado, S. Sánchez-Cervera, E. Castro. *Nuclear Engineering and Design. In press* <http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2017.03.017>. 2017
- *Best-estimate simulation of a VVER MSLB core transient using NURESIM platform codes.* I. Spasov, S. Mitkov, N. Kolev, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, A. Sabater, D. Cuervo, J. Jimenez, V. Sanchez, L. Vyskocil. *Nuclear Engineering and Design. In press* <http://dx.doi.org/10.1016/j.nucengdes.2017.03.032>. 2017
- *Testing the NURESIM platform on a PWR main steam line break benchmark.* S. Kliem, Y. Kozmenkov, J. Hadek, Y. Perin, F. Fouquet, F. Bernard, A. Sargeni, D. Cuervo, A. Sabater, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, O. Zerkak, H. Ferroukhi, P. Mala. *Nuclear Engineering and Design* (aceptado). 2017

Conferencias y workshops

- *Overview of the UPM-CSN activities for Uncertainty Quantification in PWR full core simulations.* N. García-Herranz, D. Cuervo, C. Ahnert, E. Castro, S. Sánchez-Cervera, A. Sabater, R. Mendizábal. *48th Annual Meeting on Nuclear Technology, Focus Session on Uncertainty Analyses in Reactor Core Simulations.* (ponencia invitada) Berlín, Alemania. 16-17 Mayo de 2017
- *Coupled calculations COBAYA4/CTF for different MSLB scenarios in the frame of NURESAFE project.* S. Sánchez-Cervera, A. Sabater, D. Cuervo, N. García-Herranz. *M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering.* Jeju, Corea del Sur. 16-20 Abril de 2017
- *Comparison of subchannel and averaged channel thermal-hydraulic descriptions on coupled pin-by-pin neutronic calculations.* A. Sabater, D. Cuervo, S. Sánchez-Cervera. *American Nuclear Society, Winter Meeting.* Las Vegas, Estados Unidos. 6-10 Noviembre de 2016
- *Advanced cross-section libraries with uncertainty quantification for simulation of challenging accidental scenarios in nuclear reactors.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz. *Industriales Research Meeting IRM16.* Madrid. 20 Abril de 2016
- *Covarianzas de las secciones eficaces homogeneizadas en dos grupos de energía para cálculos de difusión.* S. Sánchez-Cervera, E. Castro, N. García-Herranz. *41 Reunión Anual de la SNE.* La Coruña. 23-25 Septiembre de 2015
- *Metodologías de propagación de incertidumbres en el código de difusión COBAYA.* E. Castro, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz. *41 Reunión Anual de la SNE.* La Coruña. 23-25 Septiembre de 2015
- *Efectos de generación y optimización de librerías de secciones eficaces en el análisis de transitorios en reactores PWR.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, D. Cuervo, C. Ahnert. *40 Reunión Anual de la SNE.* Valencia. 1-3 Octubre de 2014
- *Optimización de librerías tabuladas de secciones eficaces mediante el empleo de coeficientes de sensibilidad.* S. Sánchez-Cervera, J.J. Herrero, N. García-Herranz, C. Ahnert. *38 Reunión Anual de la SNE.* Cáceres. 17-19 Octubre de 2012
- *Estudio de la funcionalización de secciones eficaces nodales en multigrupos para cálculos 3D neutrónicos-termohidráulicos de núcleos PWR.* S. Sánchez-Cervera, C. Hueso, J.J. Herrero, N. García-Herranz, C. Ahnert. *37 Reunión Anual de la SNE.* Burgos. 28-30 Septiembre de 2011
- *Steps ahead in the few-group cross-section library generation at the pin level.* N. Petrov, J.J. Herrero, S. Sánchez-Cervera. *Proceedings of the 21st Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety.* AER-2011

Presentaciones técnicas en proyectos

- *Results for Exercise I-3 with COBAYA: Analysis of the peaking power factors.* E. Castro, S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, D. Cuervo. *UAM-11 Meeting.* Erlangen, Alemania. 8-12 Mayo de 2017

- *Exercise I-3: Comparison of uncertainty propagation in nodal and pin-by-pin calculations using COBAYA code.* S. Sánchez-Cervera, E. Castro, N. García-Herranz, D. Cuervo. *UAM-10 Meeting.* Villigen, Suiza. 1-3 Junio de 2016
- *Status of UPM contribution to WP1.2.* A. Sabater, D. Cuervo, N. García-Herranz, S. Sánchez-Cervera, G. Rucabado, C. Ahnert. *7th SP1 Meeting NURES SAFE.* Bruselas, Bélgica. 5-6 Noviembre de 2015
- *Status of UPM contribution to WP1.4.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, A. Sabater, D. Cuervo, C. Ahnert. *7th SP1 Meeting NURES SAFE.* Bruselas, Bélgica. 5-6 Noviembre de 2015
- *Status of the COBAYA options and calculations for hexagonal geometry.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, A. Sabater, C. Ahnert. *6th SP1 Meeting NURES SAFE.* París, Francia. 1-2 Julio de 2015
- *Overview of COBAYA calculations for Cartesian geometry.* A. Sabater, D. Cuervo, N. García-Herranz, S. Sánchez-Cervera, G. Rucabado, C. Ahnert. *6th SP1 Meeting NURES SAFE.* París, Francia. 1-2 Julio de 2015
- *Uncertainty propagation techniques for reactor core calculations using COBAYA code* E. Castro, S. Sánchez-Cervera, A. Martínez Campo, N. García-Herranz. *UAM-9 Meeting.* Madrid, España. 18-22 Mayo de 2015
- *Covariance matrices of few-group homogenized cross-sections for core diffusion calculations.* S. Sánchez-Cervera, E. Castro, A. Martínez Campo, N. García-Herranz. *UAM-9 Meeting.* Madrid, España. 18-22 Mayo de 2015
- *Pin-by-pin cross-section library and verification with COBAYA for PWR.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz. *5th SP1 Meeting NURES SAFE.* Rez, Praga, Rep. Checa. 17-18 Febrero de 2015
- *Comparison of HZP calculations using the nodal XS library with COBAYA, CRONOS and DYN3D.* F. Bernard (IRSN), S. Sánchez-Cervera (UPM), Y. Kozmenkov (HZDR), J. Hadek (UJV). *5th SP1 Meeting NURES SAFE.* Rez, Praga, Rep. Checa. 17-18 Febrero de 2015
- *Status of the pin-by-pin cross-section library for the PWR MSLB.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM), F. Bernard (IRSN). *4th SP1 Meeting NURES SAFE.* Budapest, Hungría. 18-19 Junio de 2014
- *Status of the nodal cross-section library for the PWR MSLB benchmark.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM), F. Bernard (IRSN). *4th SP1 Meeting NURES SAFE.* Budapest, Hungría. 18-19 Junio de 2014
- *NURES SAFE PWR MSLB simulation. Status of cross section libraries.* F. Bernard (IRSN), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM). *3rd SP1 Meeting NURES SAFE.* Madrid, España. 30-31 Enero de 2014
- *Procedures for meshing optimization for XS generation in PWR and VVER.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz. *3rd SP1 Meeting NURES SAFE.* Madrid, España. 30-31 Enero de 2014

- *Preparing Exercise I-3: Optimization of cross-section tables using sensitivity coefficients in COBAYA3.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, J.J. Herrero, O. Cabellos. *UAM-7 Meeting*. París, Francia. 10-12 Abril de 2013

Deliverables

- *NURESAFE Deliverable 12.23. Nodal-level XS library parameterized for MSLB.* F. Bernard (IRSN), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM). 2014
- *NURESAFE Deliverable 12.24. Pin-level XS library parameterized for MSLB.* S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM), F. Bernard (IRSN). 2014
- *NURESAFE Deliverable 14.25b. Nodal-level XS library v2 for VVER parameterized for MSLB.* N. Petrov, I. Spasov, N. Kolev (INRNE), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM). 2015
- *NURESAFE Deliverable 14.26. Pin-level cross-section library parameterized for VVER MSLB.* N. Zheleva, G. Todorova, N. Kolev (INRNE), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz (UPM). 2014
- *NURESAFE Deliverable 14.31. Intermediate report compiling VVER MSLB results of the reference case.* N. Kolev, I. Spasov, N. Petrov, N. Zheleva, G. Todorova, O. Kamenscic (INRNE), J. Hadek, L. Vyskocil (UJV), J. Jimenez, V. Sanchez (KIT), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, D. Cuervo (UPM). 2015
- *NURESAFE Deliverable 14.41. Final report on latest results from the reference and advance cases.* N. Kolev, I. Spasov, N. Zheleva, G. Todorova, N. Petrov, P. Ivanov, S. Mitkov, O. Kamenscic (INRNE), J. Hadek, L. Vyskocil (UJV), J. Jimenez, V. Sanchez (KIT), S. Sánchez-Cervera, N. García-Herranz, A. Sabater, D. Cuervo (UPM). 2016