



VALIDACIÓN DE CSAS26 (SCALE 4.4a) EN PLATAFORMA PC PARA CÁLCULOS DE CRITICIDAD

*Óscar Zurrón Cifuentes, Guillermo Sánchez de León, Carolina Álvaro Pérez
ENUSA – Fábrica de Juzbado*

1. INTRODUCCIÓN

Este trabajo presenta la metodología y resultados de la validación del módulo CSAS26 (BONAMI/NITAWL-II/KENO-VI) de SCALE 4.4a, realizada por la Fábrica de Juzbado para la ejecución de cálculos de criticidad sobre plataforma PC.

Cualquier método de cálculo que se utilice para analizar el comportamiento de sistemas con material fisiónable debe ser validado con el fin de determinar su sesgo y las correspondientes incertidumbres. Esto permite normalizar el método dentro de su rango de aplicabilidad, de modo que sea capaz de predecir correctamente condiciones de criticidad dentro de los límites de las incertidumbres asociadas tanto al sesgo como a la k_{eff} de cada caso particular.

Una de las posibles estrategias de validación consiste en simular configuraciones críticas utilizando el método de cálculo que se pretende validar y comparar los resultados con los valores experimentales. Siguiendo esta estrategia y a partir de los datos experimentales de la referencia *1/*, en los apartados siguientes se presentan los resultados de la simulación de 120 configuraciones críticas realizada utilizando el módulo CSAS26 con la librería de secciones eficaces de 44 grupos ENDF/B-V. Los cálculos se han ejecutado en el servidor J_TSERV2 (Pentium II / 450 MHz) bajo SO Windows NT 4.0 Terminal Server. Estos resultados se comparan con los valores experimentales de cada configuración crítica, obteniendo finalmente el valor del sesgo del método y las incertidumbres estadísticas asociadas.

2. SELECCIÓN DE LA MATRIZ DE EXPERIMENTOS

Desde 1992, la Agencia de la Energía Nuclear (OECD/NEA) viene realizando una enorme recopilación de experimentos críticos cuya descripción y resultados se presentaron durante el transcurso de la VI Conferencia Internacional sobre Seguridad Nuclear (ICNC'99), celebrada en Versalles (Francia) del 20 al 24 de Septiembre de 1999. Este compendio,

que se recoge de forma normalizada en la referencia **/1/**, constituye una fuente de inestimable valor como instrumento de validación de los métodos de cálculo utilizados para estudios de criticidad.

De los 2157 experimentos críticos incluidos en la referencia **/1/**, se han seleccionado 120 que, en términos generales, se ajustan a las características de los sistemas a simular posteriormente con CSAS26 y en particular, a las distintas configuraciones que adquiere el diseño VVER-440 durante las etapas mecánicas de su proceso de fabricación. Esta matriz de experimentos comprende configuraciones heterogéneas de UO_2 de bajo enriquecimiento ($1.6\% \leq \leq 5.0\% \text{ }^{235}\text{U}$), en el rango térmico, dispuestas en malla hexagonal, moderadas por agua ligera y en presencia de diversos absorbentes, tales como B, Eu o Gd.

2.1 EXPERIMENTOS VVER, KFKI (Budapest)

Entre 1972 y 1990, los países usuarios del combustible VVER establecieron un Colectivo Internacional Temporal (CIT), liderado por Hungría, con el fin de realizar experimentos conjuntos y desarrollar códigos de cálculo aplicables a dicho diseño de combustible. La base experimental del CIT era el reactor ZR-6(M), operado por el Instituto de Investigación de Física de la Academia Húngara de Ciencias (KFKI, Budapest) **/2-3/**.

Las configuraciones experimentales estudiadas en el reactor ZR-6(M) utilizaron barras de UO_2 de diversos enriquecimientos, comprendidos entre el 1.60 y 4.40% ^{235}U . En algunos casos, estas configuraciones incluían diferentes tipos de barras absorbentes (con B, Eu o Gd) y distintas concentraciones de H_3BO_3 disuelto en el moderador (agua ligera). Modificando estos parámetros, así como la geometría de las configuraciones o la temperatura, se experimentó con un total de 334 configuraciones, de las que 165 se incluyen en la referencia **/2/** y 69 en la **/3/**. En todas ellas, la criticidad se alcanzaba variando la altura del moderador intersticial.

Del total de configuraciones críticas incluidas en las referencias **/2/** y **/3/**, se han seleccionado 98 para la validación de CSAS26. Estas configuraciones se encuadran dentro de las siguientes categorías:

- a.1) Configuraciones regulares** (grupo LCT15A, casos 1-55), son aquellas que contienen únicamente barras de UO_2 , del mismo enriquecimiento **/2/**, véase la Figura 1.
- a.2) Configuraciones regulares con enriquecimiento mixto** (grupo LCT15B, casos 56-58) **/2/**. La Figura 2 muestra un esquema típico de la sección transversal de este tipo de configuraciones. Obsérvese cómo las barras del segundo enriquecimiento se distribuyen en torno a la configuración regular formando una corona cilíndrica.

- a.3) Configuraciones con perturbaciones puntuales** (grupos LCT15C, casos 59-77 y LCT36, casos 80-98), que se definen a partir de configuraciones regulares en las que algunas barras de UO_2 han sido reemplazadas por barras absorbentes o huecos /2-3/ (Figura 3).
- a.4) Combinaciones de a.1) y a.2)** (grupo LCT15D, casos 78-79) /2/. En la Figura 4 se muestra un esquema típico. Se observan las dos grandes zonas de diferente enriquecimiento y el posicionamiento de huecos y barras absorbentes en la parte central de la configuración.

Figura 1

Sección transversal de una configuración regular.

Figura 2

Sección transversal de una configuración con enriquecimiento mixto

Figura 3

Sección transversal de una configuración con perturbaciones puntuales

Figura 4

Sección transversal de una configuración tipo a.4)

2.2 CONFIGURACIONES REGULARES DE BARRAS DE $\text{U}(5\%)\text{O}_2$, RRCKI (Moscú)

En 1961 se realizaron en el Centro Ruso de Investigación "Kurchatov Institute" varias series de experimentos críticos con configuraciones hexagonales de barras cilíndricas de bajo enriquecimiento ($\sim 5\%$ ^{235}U), moderadas por agua ligera con o sin H_2BO_3 /4-7/. La criticidad se alcanzaba variando el número de barras y la separación entre ellas o el nivel de moderador intersticial.

Para la validación de CSAS26 se han seleccionado las 22 configuraciones incluidas en las referencias /4-7/, que se clasifican, en función del tipo de vaina o del moderador, del siguiente modo:

- b.1) Configuraciones con vaina de acero inoxidable** (grupo LCT19, casos 99-101) /4/.
- b.2) Configuraciones con vaina de Zc** (grupos LCT20, casos 102-108 y LCT31, casos 115-120) /5, 7/.

b.3) Configuraciones con vaina de Zc moderadas por agua con H₃BO₃ (grupos LCT21A, casos 109-111 y LCT21B, casos 112-114) /6/.

Todas ellas siguen esquemas similares al representado en la Figura 1.

3. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Los 120 experimentos críticos seleccionados se han simulado utilizando CSAS26 con la librería de secciones eficaces de 44 grupos ENDF/B-V en el servidor J_TSERV2 de ENUSA. Como resultado se obtienen los coeficientes de multiplicación $k_{m(i)}$ ($i = 1, \dots, 120$) que se muestran en la Tabla 1, junto con sus correspondientes errores típicos de la media, designados por $m(i)$. Para cada simulación se emplearon 1500 neutrones iniciales y 250 neutrones por generación. En todas las simulaciones se eliminan las 50 primeras generaciones, cuyas k_{eff} presentan una fuerte dispersión, antes de promediar el valor de k_{eff} . Como valor objetivo se toma la k_{eff} con menor dispersión (más pequeña). Estos valores corresponden a los $k_{m(i)}$ y $m(i)$ indicados en la Tabla 1.

En todos los casos el valor de k_{eff} experimental es igual a 1.0000, aunque su precisión depende de la configuración. Así, los experimentos realizados en condiciones similares aparecen agrupados en la Tabla 1 indicando en cada caso la precisión ($I_{exp(g)}$) del valor de k_{eff} experimental. La columna "Config." se incluye con el fin de relacionar cada caso con la configuración experimental asociada, que mantiene la identificación de la referencia de origen.

Tabla 1

Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$	Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$
LCT15 A /2/	0.0030	1	175/175	1.0005	0.0017	LCT 15C /2/	0.0030	61	158-3/155	0.9967	0.0014
		2	174/174	1.0013	0.0016			62	158-4/155	0.9984	0.0016
		3	154/154	0.9994	0.0016			63	158-5/155	0.9982	0.0014
		4	246/246	0.9946	0.0016			64	158-6/155	0.9975	0.0014
		5	173/173	0.9997	0.0015			65	158-7/155	0.9982	0.0014
		6	52/23	0.9973	0.0013			66	155/155	1.0036	0.0016

Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$	Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$
		7	172a/172	0.9980	0.0015			67	155-1/155	1.0021	0.0016
		8	51/24	0.9970	0.0013			68	156/155	0.9983	0.0014
		9	171a/171	0.9984	0.0015			69	244/244	0.9974	0.0014
		10	170/170	0.9972	0.0014			70	243/243	0.9986	0.0016
		11	169/169	0.9955	0.0020			71	156-1/155	0.9998	0.0013
		12	158/155	0.9964	0.0015			72	1244/244	0.9966	0.0014
		13	162/161	0.9931	0.0015			73	157/155	0.9954	0.0016
		14	161/161	0.9939	0.0013			74	245/244	0.9974	0.0016
		15	163/161	0.9891	0.0012			75	189/189	0.9954	0.0014
		16	247/247	0.9940	0.0012			76	242/242	0.9970	0.0014
		17	195/39	0.9941	0.0015			77	190/190	0.9996	0.0015
		18	194/194	0.9971	0.0014	LCT	0.0030	78	197/197	1.0040	0.0015
		19	193/193	0.9939	0.0016	15D		79	198/198	1.0047	0.0013
		20	192/192	0.9966	0.0013	/2/		80	293/293	0.9974	0.0014
		21	188/40	0.9922	0.0015	LCT	0.0090	81	294/294	0.9982	0.0016
		22	191/191	0.9938	0.0013	36		82	295/295	0.9946	0.0016
		23	212/212	1.0026	0.0016	/3/		83	296/296	0.9932	0.0015
		24	213/213	1.0012	0.0016			84	297/297	0.9964	0.0017
		25	214/214	0.9987	0.0014			85	298/298	0.9952	0.0017
		26	220/220	1.0005	0.0014			86	299/299	0.9975	0.0014
		27	215/215	0.9992	0.0014			87	302/302	0.9940	0.0015
		28	216/216	0.9985	0.0013			88	303/303	0.9969	0.0016
		29	217/217	0.9979	0.0015			89	304/304	0.9950	0.0016
		30	218/218	0.9985	0.0015			90	305/305	0.9968	0.0017
		31	219/219	0.9987	0.0016			91	306/306	0.9988	0.0015
		32	233/233	0.9947	0.0014			92	307/307	0.9975	0.0016
		33	232/232	0.9945	0.0014			93	308/308	0.9981	0.0016
		34	234/234	0.9947	0.0013			94	309/309	0.9927	0.0015
		35	235/235	0.9957	0.0012			95	310/310	0.9973	0.0016
		36	236/236	0.9910	0.0013			96	311/311	0.9949	0.0015
		37	237/237	0.9924	0.0013			97	312/312	0.9976	0.0018

Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$	Grupo /Ref./	$I_{exp(g)}$	Ca-so	Config	$k_{m(i)}$	$m(i)$
		38	230/230	1.0005	0.0016			98	313/313	0.9952	0.0014
		39	229/229	0.9980	0.0015	LCT	0.0061	99	#1	1.0165	0.0014
		40	225/225	0.9999	0.0015	19		100	#2	1.0118	0.0014
		41	221/221	1.0008	0.0017	/4/		101	#3	1.0111	0.0013
		42	224/224	0.9995	0.0016		0.0061	102	#1	0.9981	0.0014
		43	223/223	0.9995	0.0018			103	#2	1.0027	0.0018
		44	208/208	1.0060	0.0015	LCT		104	#3	1.0072	0.0015
		45	207/207	1.0056	0.0016	20		105	#4	1.0042	0.0014
		46	206/206	1.0041	0.0013	/5/		106	#5	1.0056	0.0015
		47	205/205	1.0051	0.0016			107	#6	1.0082	0.0013
		48	204/204	1.0049	0.0014			108	#7	1.0064	0.0015
		49	203/203	1.0033	0.0016	LCT	0.0072	109	#1	1.0023	0.0014
		50	202/202	1.0025	0.0014	21A		110	#2	1.0030	0.0015
		51	201/201	1.0037	0.0014	/6/		111	#3	1.0073	0.0015
		52	200/200	1.0037	0.0015	LCT	0.0050	112	#4	1.0070	0.0013
		53	199/199	1.0040	0.0014	21B		113	#5	1.0062	0.0013
		54	110/110	0.9963	0.0017	/6/		114	#6	1.0040	0.0012
		55	164/110	0.9970	0.0014	LCT	0.0045	115	#1	0.9923	0.0015
LCT15	0.003	56	160/160	0.9951	0.0012	31		116	#2	0.9953	0.0013
B	0	57	166/166	0.9949	0.0015	/7/		117	#3	0.9931	0.0015
/2/		58	231/231	0.9983	0.0012			118	#4	0.9883	0.0014
LCT15	0.003	59	158- 1/155	0.9961	0.0014			119	#5	0.9919	0.0015
C	0	60	158- 2/155	0.9974	0.0015			120	#6	0.9928	0.0015
/2/											

Seguendo los criterios establecidos en la referencia /8/ para la validación de métodos de cálculo, se tiene que, al calcular el factor de multiplicación neutrónica k_p de un determinado sistema, debe contemplarse la incertidumbre asociada Δk_p , de modo que

$$k_p + (1 - k_c) + |\Delta k_c| + |\Delta k_p| \geq 1 - |\Delta k_m| \quad (1)$$

donde, k_c es la k_{eff} media resultante de la simulación de experimentos críticos utilizando el método de cálculo que se pretende validar, Δk_c es la incertidumbre en la determinación de k_c , e Δk_m es un valor (arbitrario) requerido para asegurar un margen aceptable de subcriticidad.

Para determinar los valores de k_c e $\ddot{A}k_c$ se ha comenzado por aplicar el test de normalidad de Kolmogorov-Smirnov-Lilliefors a los 120 casos, llegando a la conclusión de que no puede admitirse que el conjunto de experimentos críticos seleccionados proceda de una población normal. Por tanto, y dado que tras analizar los resultados no se observa ningún tipo de correlación asociada a algún parámetro concreto (p.e. enriquecimiento, H/U, etc.), se ha optado por agrupar los casos pertenecientes a configuraciones experimentales similares, con lo que resultan los 10 grupos que aparecen en la Tabla 1. Aplicando el test de normalidad a cada uno de ellos se constata una gran evidencia para aceptar la hipótesis de normalidad. Como cada grupo posee sus propias condiciones experimentales, puede considerarse como una muestra de una población diferenciada del resto de experimentos críticos. Sobre estos supuestos se estiman los valores de k_c e k_c . Este último término debe incorporar tanto la incertidumbre experimental como la asociada al propio método de cálculo.

Como estimador de k_c del conjunto de los grupos se toma la media aritmética ponderada, dada por la expresión

$$\tilde{k}_c = \frac{\sum_{g=1}^m N_g k_g}{\sum_{g=1}^m N_g} \quad (2)$$

donde m es el número de grupos, N_g el tamaño de cada grupo (número de casos) y k_g es el coeficiente de multiplicación medio correspondiente al grupo g .

El término $\ddot{A}k_c$ se calcula a partir de la varianza e incertidumbre experimental conjuntas. Así, la varianza conjunta s_c^2 viene determinada por la expresión **19**:

$$s_c^2 = \frac{\sum_{g=1}^m (N_g - 1) s_g^2}{\sum_{g=1}^m (N_g - 1)} \quad (3)$$

siendo s_g^2 la varianza muestral de cada grupo. Como cada grupo tiene su propia precisión $I_{exp(g)}$, la incertidumbre conjunta I_{exp} vendrá entonces determinada por:

$$I_{exp}^2 = \frac{\sum_{g=1}^m (N_g - 1) I_{exp(g)}^2}{\sum_{g=1}^m (N_g - 1)} \quad (4)$$

La documentación incluida en las referencias **12-71** no describe los niveles de confianza utilizados para calcular los términos $l_{exp(g)}$. Por esta razón se asume el criterio habitual de suponer que éstos vienen determinados para un intervalo centrado y un nivel de confianza del 95%. Es decir, se toma $l_{exp(g)} = 2 \cdot t_{exp(g)}$ y por tanto, $t_{exp}^2 = l_{exp}^2/4$.

El término Δk_p relativo a la incertidumbre del caso concreto, se determina a partir del error típico de la media σ_p del estimador \tilde{k}_p del valor de la k_{eff} del caso. Ambos valores son suministrados por CSAS26.

Teniendo en cuenta estas consideraciones y el criterio de adición de varianzas asociadas a variables aleatorias estadísticamente independientes, se tiene que

$$\Delta k_p + \Delta k_c \leq \sqrt{K_p^2 \mathbf{s}_p^2 + K_c^2 s_c^2 + K_{exp}^2 \frac{I_{exp}^2}{4}} \quad (5)$$

donde K_p , K_c y K_{exp} dependen del nivel de confianza $1 - \alpha$ con el que se pretenda calcular k_p y k_c . Dado que las varianzas son estimadas y se desea establecer un límite unilateral para k_p , estos factores se determinan a partir de la distribución t -central de Student, por lo que

$$\Delta k_p + \Delta k_c \leq \sqrt{t_{(f_p, 1-\alpha)}^2 \mathbf{s}_p^2 + t_{(f_c, 1-\alpha)}^2 s_c^2 + t_{(f_{exp}, 1-\alpha)}^2 \frac{I_{exp}^2}{4}} \quad (6)$$

siendo f_p , f_c y f_{exp} el número de grados de libertad con el que están calculados σ_p , s_c e l_{exp} , respectivamente. Como usualmente su valor es mayor que 30, los factores que aparecen en **(6)** multiplicando a las incertidumbres pueden ser aproximados por el valor de $z_{1-\alpha}$ de la distribución normal estándar, resultando:

$$\sqrt{t_{(f_p, 1-\alpha)}^2 \mathbf{s}_p^2 + t_{(f_c, 1-\alpha)}^2 s_c^2 + t_{(f_{exp}, 1-\alpha)}^2 \frac{I_{exp}^2}{4}} \approx z_{1-\alpha} \sqrt{\mathbf{s}_p^2 + s_c^2 + \frac{I_{exp}^2}{4}} \quad (7)$$

lo cual permite escribir **(1)** del modo siguiente:

$$k_p + (1 - \tilde{k}_c) + z_{1-\alpha} \sqrt{\mathbf{s}_p^2 + s_c^2 + \frac{I_{exp}^2}{4}} \leq 1 - \Delta k_m \quad (8)$$

Si k_p se expresa con un nivel de confianza del 95%, $z_{1-\alpha} = 1.645$. La Tabla 2 muestra los cálculos intermedios y los valores de \tilde{k}_c , s_c e l_{exp} resultantes de la aplicación de las expresiones **(2-4)**.

Tabla 2
Determinación de los parámetros \tilde{k}_c , s_c e l_{exp}

Grupo	k_g	s_g	N_g	$N_g k_g$	l_{exp}	$N_g - 1$	$(N_g - 1) s_g^2$	$(N_g - 1) l_{exp}^2$
LCT15A	0.9983	0.0040	55	54.91	0.0030	54	8.55E-04	4.86E-04
LCT15B	0.9961	0.0019	3	2.99	0.0030	2	7.28E-06	1.80E-05
LCT15C	0.9981	0.0021	19	18.96	0.0030	18	7.76E-05	1.62E-04
LCT15D	1.0044	0.0005	2	2.01	0.0030	1	2.45E-07	9.00E-06
LCT36	0.9962	0.0018	19	18.93	0.0090	18	5.71E-05	1.46E-03
LCT19	1.0131	0.0029	3	3.04	0.0061	2	1.72E-05	7.36E-05
LCT20	1.0046	0.0034	7	7.03	0.0061	6	7.00E-05	2.23E-04
LCT21A	1.0042	0.0027	3	3.01	0.0072	2	1.47E-05	1.04E-04
LCT21B	1.0057	0.0016	3	3.02	0.0050	2	4.83E-06	5.00E-05
LCT31	0.9923	0.0023	6	5.95	0.0045	5	2.60E-05	1.01E-04
Totales			120	119.85		110	1.13E-03	2.68E-03

\tilde{k}_c	l_{exp}^2	s_c^2	$(l_{exp}^2)/4 + s_c^2$
0.999	2.441E-05	1.027E-05	1.637E-05

4. CONCLUSIONES

Sustituyendo los parámetros de (8) por sus valores numéricos y k_p por su estimador, se obtiene la expresión normalizada que permite determinar, con un nivel de confianza del 95%, el límite superior unilateral de la k_{eff} de un sistema y compararlo con el valor de seguridad establecido:

$$\tilde{k}_p + 0.001 + 1.645 \sqrt{s_p^2 + 1.637 \times 10^{-5}} \leq 1 - \Delta k_m \quad (9)$$

donde \tilde{k}_p y s_p son los valores suministrados por CSAS26 de la k_{eff} del sistema objeto de estudio y de su desviación estándar, respectivamente, e k_m es un margen adicional de seguridad. La expresión (9) es válida para cálculos realizados con la librería de secciones eficaces de 44 grupos ENDF/B-V sobre sistemas de características similares a las configuraciones críticas utilizadas para la validación.

5. REFERENCIAS

1. "International handbook of evaluated criticality safety benchmark experiments". NEA/NSC/DOC(95)03. OECD/NEA (Septiembre 1999).

2. *"The VVER experiments: regular and perturbed hexagonal lattices of low enriched UO₂ fuel rods in light water"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-015. OECD/NEA (Septiembre 1999).
3. *"The VVER experiments: regular and perturbed hexagonal lattices of low enriched UO₂ fuel rods in light water - Part 2"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-036. OECD/NEA (Septiembre 1999).
4. *"Water moderated hexagonally pitched lattices of U(5%)O₂ stainless steel clad fuel rods"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-019. OECD/NEA (Septiembre 1999).
5. *"Water moderated hexagonally pitched partially flooded lattices of U(5%)O₂ zirconium clad fuel rods, 1.3 cm pitch"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-020. OECD/NEA (Septiembre 1999).
6. *"Hexagonally pitched partially flooded lattices of U(5%)O₂ zirconium clad fuel rods moderated by water with boric acid"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-021. OECD/NEA (Septiembre 1999).
7. *"Water moderated hexagonally pitched partially flooded lattices of U(5%)O₂ zirconium clad fuel rods, 0.8 cm pitch"*. NEA/NSC/DOC(95)03/IV LEU-COMP-THERM-031. OECD/NEA (Septiembre 1999).
8. *"Nuclear criticality safety in operations with fissionable material outside reactors"*. ANSI/ANS-8.1-1998.
9. *"The statistical analysis of experimental data"*, J. Mandel. Dover (1984).