

2 1984

REPUBLICA ARGENTINA
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
Dependiente de la Presidencia de la Nación
CENTRO ATOMICO BARILOCHE

METODOS DE ACELERACION Y MODELOS EN CALCULOS Sn

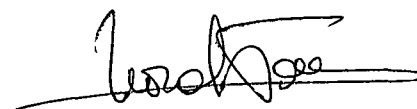
M.M. Sbaffoni y M.J. Abbate

1984

S.C. DE BARILOCHE,

SEÑOR JEFE DEPTO. INFORMACION TECNICA:
(Dr. Tito Suter)

Remito tres fotocopias de la Nota Técnica 13/4 titulada
"METODOS DE ACELERACION Y MODELOS EN CALCULOS Sn" producido por
M.M. Sbaffoni y M.J. Abbate para el archivo en Biblioteca Central.



Nora Mackern de Toews
Sector Publicaciones

Recibido
9/10/84

RESUMEN

En ciertos problemas de cálculo neutrónico resueltos por el método S_n , es relativamente común observar algunas particularidades como, por ejemplo, aparición de flujos negativos, lentitud e inseguridad en la convergencia, e inestabilidad de las soluciones.

Ante un problema práctico, caracterizado por un medio con fuerte efecto de "upscattering", se han analizado los modelos habituales para el cálculo del flujo de neutrones, y los métodos de aceleración que se incluyen en los programas de uso más difundido.

Se presentan algunas conclusiones especiales derivadas de dicho análisis, y un nuevo método para efectuar la aceleración por rebalance del término de "upscattering" que soluciona, en este tipo de casos, los problemas antes mencionados.

Este último ha sido incorporado al programa bidimensional DOT3.5, con lo cual se ha obtenido una nueva versión de ese código de aplicación más amplia.

I. INTRODUCCION

Si el cálculo del flujo de neutrones se efectúa a partir de la ecuación de transporte diferencial, en la mayor parte de los casos ésta debe resolverse numéricamente y por lo tanto discretizarse tanto en energías como en posición y ángulos.

Este tipo de resoluciones requiere, por sus características, la aplicación de métodos iterativos.

Para el caso de aproximaciones multigrupo y S_n en sistemas con fenómenos de "upscattering", resulta necesario efectuar un doble ciclo de iteraciones. Las llamadas iteraciones interiores se realizan a energía constante (dentro de cada grupo de energías) y consisten en balancear la ecuación a partir de flujos estimados, considerando las variables espacial y angular. Finalizados estos ciclos para todos los grupos, se ha completado una iteración exterior. Dado que dentro de cada grupo, al considerarse el aporte de neutrones de los grupos de menor energía se lo ha hecho con los flujos de una iteración previa, todo el proceso debe repetirse hasta llegar, por iteraciones exteriores sucesivas, a hallar la solución del sistema dentro de una dada precisión.

La forma discretizada de la ecuación de transporte a utilizar contiene 5 incógnitas por elemento de volumen. Dos de ellas pueden darse como condiciones de contorno, por lo que se requieren dos ecuaciones adicionales que se definen a partir de ciertas hipótesis sobre el comportamiento del flujo dentro de la celda y que denominaremos "modelos".

Los principales puntos a considerar en este esquema de trabajo son la posible aparición de flujos negativos y la compatibilidad entre la velocidad de convergencia y la precisión de los resultados.

Su resolución implica siempre un compromiso con las limitaciones involucradas en un planteo demasiado detallado, fundamentalmente mayores requerimientos de memoria y tiempo de computadora.

Es claro que, en general, si la fuente y las secciones eficaces son positivas, deberían resultar flujos también positivos, pero esto puede no ocurrir de ese modo; aparecen, entonces, flujos negativos que se propagan muy rápidamente, invalidando los resultados por su falta de significado físico. Su origen estará en las distintas aproximaciones aplicadas para simplificar el problema y para calcularlo.

Por otro lado, la resolución iterativa puede implicar una convergencia muy lenta. Para acelerarla, los programas suelen incluir métodos de rebalance que permiten corregir o renormalizar los flujos entre iteraciones. Estos métodos también pueden, si no están correctamente tratados, generar flujos negativos.

El método de ordenadas discretas (S_n) ha resultado muy adecuado en numerosas aplicaciones por lo que constituye la base de distintos programas de cálculo de amplia difusión y uso, y se encuentra en continua revisión y perfeccionamiento /1/, /2/, /3/, /4/, /5/ /6/ y /7/.

Este trabajo se centró principalmente en la utilización del programa DOT3.5 /8/, que puede considerarse, en cuanto a su arquitectura y la teoría aplicada, una versión bidimensional del ANISN /9/; éste último ha sido ampliamente probado en problemas del tipo de los que nos ocupan, sin embargo en el DOT3.5 (usado hasta el momento fundamentalmente en cálculos de blindaje) pudo observarse que los modelos en uso no aseguran flujos positivos y que los métodos de aceleración pueden generar flujos negativos; además, la definición de convergencia aplicada, puede provocar la finalización del cálculo al azar.

II) GENERALIDADES SOBRE EL METODO Sn

1. Modelos de cálculo

Por completitud se presentarán aquí, en forma resumida, los distintos modelos de cálculo que pueden encontrarse en los programas Sn de uso más difundido, como DTF-4 /10/, ANISN /9/, DOT3.5 /8/ y DOT4 /11/. En las referencias mencionadas podrán hallarse mayores detalles.

a. Ecuación de transporte

Una forma habitual de la ecuación de transporte diferencial para el caso unidimensional y no multiplicativo, planteada para el grupo g, la dirección m, en aproximación Po para el núcleo de dispersión y considerando IGM grupos de energía y MM direcciones, es la siguiente:

$$\omega \mu (A_{i+1} N_{i+1} - A_i N_i) + \alpha_{m+\frac{1}{2}} N_{m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} N_{m-\frac{1}{2}} + \omega \Sigma_T V N = \omega V S$$

donde:

V = volúmen de la celda espacial $i+\frac{1}{2}$ (comprendida entre los radios r_i y r_{i+1}).

N = promedio del flujo angular del grupo g en la dirección m sobre la celda espacial $i+\frac{1}{2}$.

ω = ángulo sólido correspondiente a la dirección m.

μ = coseno director de la dirección m.

A_{i+1}, A_i = área en la posición r_{i+1} y r_i , respectivamente.

Σ_T = sección eficaz total macroscópica para el grupo g y la celda considerada.

$\alpha_{m\pm\frac{1}{2}}$ = coeficientes para tener en cuenta la redistribución angular de los neutrones en el caso de superficies curvas.

N_i = promedio del flujo angular sobre el área A_i y el ángulo sólido ω .

$N_{m \pm \frac{1}{2}}$ = promedio del flujo angular sobre la celda espacial y sobre la cara de la celda direccional.

$$S = Q + \sum_{h=1}^{IGM} \Sigma_{h \rightarrow g}^S \bar{N}_h = \text{término de fuente de esa celda espacial,}$$

donde:

Q = fuente externa o no dependiente del flujo.

$\Sigma_{h \rightarrow g}^S$ = sección eficaz de transferencia de neutrones del grupo h al grupo g .

$$\bar{N}_h = \sum_{m=1}^{MM} \omega_m N_h .$$

De esa ecuación puede obtenerse N . Las condiciones de contorno fijarán dos de los flujos; por ejemplo, calculando para μ negativo, orden decreciente de i y sentido creciente de m , proporcionarán los valores de N_{i+1} y $N_{m-1/2}$. Veremos ahora los modelos que permiten calcular los dos restantes, N_i y $N_{m+1/2}$.

b. Modelo lineal o diferencia diamante

Siendo N el flujo en el punto medio de la celda, supone una variación lineal en la misma (ver figura 1), es decir:

$$N_i = 2N - N_{i+1}$$

$$N_{m+1/2} = 2N - N_{m-1/2}$$

Reemplazando en la ecuación general resulta:

$$N = \frac{-\mu A N_{i+1} + \alpha N_{m-1/2} + VS}{-\mu A + \alpha + \Sigma_T V}$$

siendo: $A = A_{i+1} + A_i$
 $\alpha = (\alpha_{m+1/2} + \alpha_{m-1/2})/\omega$

Estas tres ecuaciones resuelven el problema.

c. Modelo escalón

Consiste en adjudicar a un contorno el flujo del centro de la celda (fig.1), o sea:

$$N_i = N$$

$$N_{m+1/2} = N$$

resultando:

$$N = \frac{-\mu A_{i+1} N_{i+1} + \frac{\alpha_{m-1/2}}{\omega} N_{m-1/2} + VS}{-\mu A_i + \frac{\alpha_{m+1/2}}{\omega} + \Sigma_T V}$$

d. Diferencias pesadas

Se basa en una extrapolación en la que N no se considera situado en el punto medio de la celda, sino que su posición depende del valor de los flujos en el contorno (ver fig.1).

Las expresiones correspondientes son:

$$N_i = a(N - N_{i+1}) + N_{i+1}$$

$$N_{m+\frac{1}{2}} = b(N - N_{m-\frac{1}{2}}) + N_{m-\frac{1}{2}}$$

Operando adecuadamente pueden hallarse los coeficientes a y b en función de los datos y de los flujos N_{i+1} y $N_{m-\frac{1}{2}}$ respectivamente.

Están comprendidos entre 1.0 y 2.0, con lo que se reduce en el primer caso al modelo escalón y en el segundo al modelo lineal. No obstante, suelen usarse, en general, valores estimados o de prueba. Como podría ocurrir que resultaran valores fuera de la celda, debe prevenirse esto en la programación.

Reemplazando como en los casos anteriores se obtiene la expresión de N .

e. Diferencias superpesadas

Se basa en el anterior; introduce dos nuevos multiplicadores arbitrarios con los cuales las expresiones de a y b dependen, ahora, de los dos flujos N_{i+1} y $N_{m-\frac{1}{2}}$ simultáneamente.

f. Exponencial

Asume la aproximación de que el flujo central de una celda en el espacio de las fases, en lugar de ser el promedio aritmético de los flujos en el contorno, como era en el modelo lineal, es el promedio geométrico, o sea una extrapolación de tipo exponencial /12/.

La elección de uno u otro modelo dependerá de las condiciones particulares del problema de que se trate. El modelo lineal, por ejemplo, es generalmente recomendado como

el más preciso, sin embargo, en ciertas condiciones, puede extrapolar a flujos negativos; en casos de ese tipo, entonces, se hará necesaria la utilización de alguno de los otros modelos, que asegure positividad aún si eso implica cierta disminución en la precisión de los resultados o la realización de un cálculo más costoso.

2. Prevención de flujos negativos

En programas de cálculo como los que se están considerando pueden encontrarse tres tipos de procedimientos para prevenir o evitar la aparición de flujos negativos:

i) Un método utilizado con cierta frecuencia es anular directamente el flujo que resulte negativo y recalcular los otros con el mismo modelo.

ii) Otra posibilidad es la utilización de modelos combinados. El método consiste en calcular los flujos con el modelo que se considere más preciso (por ejemplo lineal) y si alguno de ellos resulta negativo, repetir el cálculo con otro modelo que asegure extrapolación positiva si se parte de flujos positivos (escalón, diferencias pesadas o exponencial).

iii) También es posible fijar criterios para la elección de la red espacial.

Es claro que la generación de flujos negativos al aplicar los modelos, puede relacionarse con la magnitud de los intervalos espaciales; cuanto más anchos sean éstos, mayor es la probabilidad de que los valores extrapolados de flujo resulten negativos.

Por ello se suelen enunciar algunos criterios para definir las redes espaciales /9/, los cuales pueden derivarse de las ecuaciones básicas y que recomiendan, por ejemplo, para los intervalos radiales, que su ancho cumpla:

$$\Delta r \leq \frac{1 + \frac{\Sigma_{\text{self}}}{\Sigma_T}}{4\Sigma_T}$$

siendo: Σ_T el mayor valor de la sección eficaz total o de transporte en la región y Σ_{self} la sección eficaz de "selfscattering" correspondiente al mismo grupo.

En cuanto a intervalos axiales, debería ser:

$$\Delta z \leq \frac{2.0}{\Sigma_T}$$

Como se verá más adelante, el uso de estos criterios puede implicar redes demasiado densas para su aplicación práctica. Se recomienda, entonces, cumplir con los criterios cerca de los contornos y en zonas de fuerte gradiente, y no variar bruscamente el paso de la red (no cambiar el ancho de intervalos adyacentes en un factor 2 o más). Aún así, esta solución no asegura completamente la positividad del flujo.

3. Métodos de aceleración del cálculo

Como se dijo anteriormente, para acelerar la convergencia de los procesos iterativos, los programas incluyen diversos métodos de rebalance que permiten corregir o renormalizar los flujos entre iteraciones interiores o exteriores.

A continuación se describen brevemente los métodos principales y de uso más difundido, preferentemente para casos de medios no multiplicativos y con importante efecto de "upscattering".

a. "Selfscattering"

Luego de cada iteración interior, se cuenta con un nuevo valor del flujo para el grupo en cuestión; es posible entonces recalcular la fuente a utilizar en la próxima itera-

ción corrigiendo, a través de un factor de normalización, el término de "selfscattering" que se halla desbalanceado.

La ecuación con la que se calculó $\bar{N}^k$ para el grupo de que se trata y la iteración k , integrada en volumen es, según lo visto en 1.a

$$F + (\Sigma_r + \Sigma_{self}) \bar{N}^k V = \Sigma_{self} \bar{N}^{k-1} V + S'V$$

donde:

F = fuga neta, indicada simbólicamente.

$\Sigma_r = \Sigma_T - \Sigma_{self}$.

$\bar{N}^k$ = flujo de la iteración interior realizada (k) promediado en el volumen V .

$\bar{N}^{k-1}$ = idem para la iteración anterior ($k-1$).

$S'V = SV - \Sigma_{self} \bar{N}^{k-1} V$.

Como se quieren igualar los términos de "selfscattering", se busca un factor f tal que se cumpla:

$$f [F + (\Sigma_r + \Sigma_{self}) \bar{N}^k V] = f \Sigma_{self} \bar{N}^k V + S'V$$

donde f no interviene en S' porque multiplica sólo a los flujos del grupo en el que se trabaja.

Partiendo de la ecuación usada para el cálculo del flujo, multiplicando por f y sumando y restando términos convenientemente

$$\begin{aligned} f [F + (\Sigma_r + \Sigma_{self}) \bar{N}^k V] &= f \Sigma_{self} \bar{N}^{k-1} V + f S'V + S'V - S'V + \\ &+ f \Sigma_{self} \bar{N}^k V - f \Sigma_{self} \bar{N}^k V \end{aligned}$$

y como, según la definición de f, debe cumplirse que:

$$0 = f \sum_{self} \bar{N}^{k-1} V + f S'V - S'V - f \sum_{self} \bar{N}^k V$$

Resulta

$$f = \frac{S'V}{S'V + \sum_{self} (\bar{N}^{k-1} - \bar{N}^k) V}$$

con lo que se ha obtenido una expresión para el cálculo de f.

Obviamente, f tenderá a 1.0 a medida que el cálculo se aproxime a la convergencia; además, es seguramente positivo si $\bar{N}^{k-1} > \bar{N}^k$; pero, si ocurre lo inverso, puede ser negativo ante fuertes fluctuaciones de los flujos entre iteraciones.

b. Sobrerelajación

Este método también se aplica entre iteraciones interiores pero el factor de corrección no proviene de un balance sino de la forma de aproximación a la solución.

Una vez efectuada la iteración k, se adopta un flujo corregido:

$$\bar{N}'^k = \bar{N}^{k-1} + f(\bar{N}^k - \bar{N}^{k-1})$$

donde, el factor es:

$$f = \frac{\bar{N}^{k-1} - \bar{N}^{k-2}}{2\bar{N}^{k-1} - \bar{N}^k - \bar{N}^{k-2}}$$

En algunos casos no se utiliza esta expresión sino valores de f constantes debidamente probados.

c. "Upscattering"

En problemas con "upscattering", las convergencias de los ciclos interiores fueron obtenidas utilizando una fuente por grupo, que dependía de los flujos de la iteración exterior anterior para los grupos de mayores energías que el calculado.

Luego, completada una iteración exterior, puede aplicarse nuevamente la ecuación de balance para igualar los términos de "upscattering". Para ello, suele utilizarse la ecuación integrada en espacio y ángulo y, aún, en energía.

Dicha ecuación, para la iteración exterior k y el grupo g , considerando que los flujos que se fueron obteniendo en las iteraciones anteriores se incluyeron para el cálculo de la fuente del grupo siguiente, será:

$$\sum_g F_g^k + \sum_g \Sigma_g^a \bar{N}_g^k V + \sum_g \Sigma_g^{\text{self}} \bar{N}_g^k V + \sum_g \Sigma_g^{\text{down}} \bar{N}_g^k V + \sum_g \Sigma_g^{\text{up}} \bar{N}_g^k V =$$

$$= \sum_g Q_g V + \sum_g \Sigma_g^{\text{self}} \bar{N}_g^k V + \sum_g \sum_{g' < g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k V + \sum_g \sum_{g' > g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^{k-1} V$$

siendo:

$$Q_g = \text{fuente externa del grupo } g \text{ y } Q_T = \sum_g Q_g V$$

$$\Sigma_g^T = \Sigma_g^a + \Sigma_g^{\text{self}} + \Sigma_g^{\text{down}} + \Sigma_g^{\text{up}}$$

$$\Sigma_g^{\text{up}} = \sum_{g' < g} \Sigma_{g \rightarrow g'}$$

$$\Sigma_g^{\text{down}} = \sum_{g' > g} \Sigma_{g \rightarrow g'}$$

Allí puede observarse que:

$$\sum_g \sum_{g' < g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k = \sum_{g'} \sum_{g > g'} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k = \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{down}} \bar{N}_{g'}^k$$

$$\sum_g \sum_{g' > g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^{k-1} = \sum_{g'} \sum_{g < g'} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^{k-1} = \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^{k-1}$$

como además se reduce el término de "selfscattering" por corrección previa, resultará que:

$$\sum_g (F_g^k + \Sigma_g^a \bar{N}_g^k) + \sum_g \Sigma_g^{\text{up}} \bar{N}_g^k = Q_T + \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^{k-1}$$

Se busca, entonces, un factor f tal que esta ecuación esté balanceada si se utilizan los flujos de la misma iteración k , corregidos a través de él, o sea:

$$f \left[\sum_g (F_g^k + \Sigma_g^a \bar{N}_g^k) + \sum_g \Sigma_g^{\text{up}} \bar{N}_g^k \right] = Q_T + f \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^k$$

Operando en la ecuación:

$$\begin{aligned} f \sum_g (F_g^k + \Sigma_g^a \bar{N}_g^k) + f \sum_g \Sigma_g^{\text{up}} \bar{N}_g^k &= f Q_T + f \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^{k-1} + Q_T - Q_T + \\ &+ f \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^k - f \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} \bar{N}_{g'}^k \end{aligned}$$

y aplicando la definición de f , deberá cumplirse que:

$$f = \frac{Q_T}{Q_T - \sum_{g'} \Sigma_{g'}^{\text{up}} (\bar{N}_{g'}^k - \bar{N}_{g'}^{k-1})}$$

con este factor se corregirán los flujos y las corrientes antes de comenzar una nueva iteración exterior.

Para medios multiplicativos la expresión es la misma sólo que Q_T incluirá la fuente de fisión.

Este método será discutido en detalle más adelante, teniendo en cuenta los resultados obtenidos de su aplicación en este trabajo.

Baste decir que f puede adoptar valores negativos ante ciertas relaciones entre la fuente y las variaciones de los flujos entre iteraciones.

d. Fuente

En forma análoga, puede realizarse una corrección de la fuente de fisión entre iteraciones exteriores.

La expresión para el factor de corrección resulta ser:

$$EOI = \frac{Q_T}{Q_T - \sum_g \chi_g \sum_i v \Sigma_{g,i}^{fisión} V_i (N_{g,i}^k - N_{g,i}^{k-1})}$$

donde:

χ_g es el espectro de neutrones de fisión, normalizado a 1.0.

v es la cantidad de neutrones producidos por fisión.

Aquí nuevamente el denominador puede ser negativo, con lo cual al corregir, si no se previenen, se generarán flujos también negativos.

4. Convergencia

En problemas con fuente fija interesa especialmente la convergencia de los flujos. Si además hay efecto de "upscattering", como ya se dijo éste implica un doble ciclo de iteraciones, interiores y exteriores, por lo que deberán existir criterios de convergencia separados para cada uno de ellos. Dichos ciclos finalizan ante el cumplimiento del criterio correspondiente.

Para el caso de las iteraciones interiores, las expresiones más usuales se basan en comparar las diferencias relativas entre los flujos de dos iteraciones sucesivas ($N_2 = N_g^k$ y $P_2 = N_g^{k-1}$), con una cota de precisión dada (EPS, normalmente comprendida entre 0.00005 y 0.005).

Por ejemplo, si se aplican puntualmente, puede usarse alguna de las siguientes formas:

$$|N_2 - P_2| < EPS * N_{2\text{máx}}$$

$$\text{ó } \text{máx}\left\{\left|\frac{N_2 - P_2}{N_2}\right|\right\} < EPS$$

También se suele aplicar su forma integral que es:

$$\frac{1}{V} \int \left|\frac{N_2 - P_2}{N_2}\right| dV < EPS$$

Pero no en todos los cálculos es necesario exigir la convergencia de todos los flujos en todo el volumen; por ello, conviene que puedan seleccionarse la zona y los grupos de energía donde aplicar el criterio.

Para el seguimiento de la convergencia debe tenerse en cuenta que el valor de estas expresiones se relaciona con la forma de aproximación a la convergencia y no con el error del flujo, el cual puede ser mucho mayor. Por lo tanto, ante convergencias muy lentas deben utilizarse valores menores de EPS que cuando la convergencia es rápida.

La convergencia del ciclo de iteraciones interiores por grupo y punto espacial no implica la de la iteración exterior, ya que en ella han intervenido, para ciertos grupos, los flujos calculados en la iteración exterior anterior.

Luego, debe aplicarse otro criterio para éstas, que será el que gobierne la finalización del cálculo y está relacionado con la variación del término de "upscattering" entre dos iteraciones sucesivas.

En el caso del DTF-IV /10/, se considera dicha variación relativa a la fuente:

$$\sum_g \varepsilon_g^{up} (N2-P2) = UP2-UP1 < EPS \cdot Q_T$$

El DOT3.5 /8/, por otra parte, tiene en cuenta la forma de aproximarse a la convergencia:

$$\left| 1 - \frac{UP2}{UPI} \right| < EPS$$

lo cual, como sucedía en el caso de las iteraciones interiores, puede provocar convergencias ficticias en el caso de aproximaciones lentas.

Este tipo de problemas requiere, generalmente, una gran cantidad de iteraciones exteriores, por lo que la mayor parte de estos programas permiten realizar un cálculo completo en varias etapas, definidas por una cantidad fija de iteraciones exteriores comenzando cada una de ellas con los resultados (flujos) de las anteriores ("restart").

Dicho procedimiento fue utilizado extensamente en este trabajo debido a los tiempos involucrados en un cálculo completo como así también para poder observar detalladamente la evolución del mismo.

Los fundamentos del método de ordenadas discretas (Sn) y sus características generales han sido adecuadamente tratados en diversos trabajos /13/, /14/ y /15/ los cuales incluyen desde su enunciación teórica hasta ciertos detalles de programación y cuya consulta puede resultar conveniente para complementar el análisis anterior.

III. CÁLCULOS REALIZADOS Y RESULTADOS

1. Cálculos

El presente trabajo se originó como parte de los estudios y análisis realizados para seleccionar los elementos de cálculo a ser utilizados para investigar, en forma detallada, el comportamiento del campo neutrónico en sistemas con fuertes heterogeneidades, como por ejemplo configuraciones similares a celdas de reactores.

De allí la elección de un programa bidimensional como el DOT 3.5, con el cual se efectuaron una serie de cálculos que, finalmente, redundaron en un perfeccionamiento del mismo.

En todos ellos se utilizaron secciones eficaces provenientes de la biblioteca GGC-3 (condensada a 28 grupos para los problemas térmicos y 37 grupos para los problemas rápidos), 29 intervalos radiales y 25 intervalos axiales y aproximación S_8 .

a) Cálculos preliminares

El primer sistema en el que se intentó calcular el flujo neutrónico con el programa DOT 3.5 sin modificaciones ("aceleración normal") está compuesto por una barra central de Zry-IV de 2.4 cm de radio contenida en el centro de un cilindro de 17.8 cm de radio de agua liviana, o sea en sistema heterogéneo, con fuerte efecto de "upscattering" en una de sus zonas (sistema Zry-IV/H₂O).

Para el seguimiento de la convergencia se definió un parámetro directamente relacionado con el control de la misma (ver II.4) que es:

$$UP2UP1 = 1 - \left| \frac{UP2}{UP1} \right|$$

Se realizaron en este sistema distintos cálculos: en el rango térmico, usando fuente de moderación plana y fuente de moderación dependiente del espacio, y en todo el rango de energías (caso rápido), usando como fuente un espectro de neutrones de fisión ubicado en el primer intervalo axial.

En todos los casos calculados aparecieron flujos negativos y el parámetro de convergencia UP2UP1 mostró variaciones bruscas y una cierta tendencia a repetir ciclos.

Se juzga necesario entonces centrar el esfuerzo en detectar el origen de los flujos negativos, ya que su presencia invalida cualquier análisis de la forma de convergencia y los resultados.

Para disminuir el efecto de "upscattering", posible causante de los problemas, se invirtieron los materiales de las zonas y se repitieron los cálculos antes mencionados (cilindro de 2.4 cm de H₂O rodeado de Zry-IV, sistema H₂O/Zry-IV).

Observando el parámetro de convergencia en la figura 2, si bien la particular escala utilizada deforma algo las curvas, se ve que los casos térmicos están oscilando mientras que el rápido presenta una variación monótona.

En todos ellos, se alcanzó la convergencia con EPS = 0.001 (puntos 1 a 5), pero pudo verse observando los flujos que ello no significaba que el cálculo estuviera satisfactoriamente terminado.

Para analizar la evolución de los flujos se utilizó la relación entre flujo térmico y epitérmico, definida como

$$RTE = \frac{\max_E (E \cdot N(E))}{E_c \cdot N(E_c)}$$

con E_c = energía de corte del cálculo térmico.

Sus valores para este caso se dan en la tabla I y allí puede verse que no están estabilizados.

Como el valor de flujo de los grupos epitérmicos converge muy rápidamente, observar la evolución de RTE es equivalente a observar la del flujo térmico.

En síntesis, puede concluirse que la convergencia detectada por el programa a través de la utilización de su tests no implica la finalización del problema, y que puede ser conveniente contar con la evolución de un parámetro auxiliar, para advertir las convergencias al azar; además resultó de interés observar la variación de los flujos en los principales puntos ya que su error, tal como se ve en la tabla I, puede ser muy superior a la precisión de la convergencia.

En cuanto a la aparición de flujos negativos, en estos casos lograron prevenirse mediante la utilización de modelos mixtos. Utilizando esos mismos modelos no pudo lograrse la positividad de los flujos en el sistema Zry-IV/H₂O (primer caso), por lo que se decidió continuar la investigación detallada del problema.

b. Origen de flujos negativos

Para poder determinar el origen de los flujos negativos y ver la forma de prevenirlos fue necesario:

- Estudiar detalladamente los fundamentos teóricos utilizados en el programa DOT 3.5 y en otros similares.
- desarrollar una serie sistemática de pruebas, incluyendo todos los posibles orígenes de flujos negativos, en particular, para problemas del tipo de los que se desee considerar.
- desarrollar y ensayar distintos tipos de soluciones.

Para ello se definió un problema "ad-hoc", con fuerte efecto de "upscattering" y mayor simplicidad geométrica, cuyos resultados pudieran ser estimados mediante cálculos unidimensionales y aún medidos.

El sistema consistió en el cilindro ya citado de 17.8 cm de radio y 50 cm de largo, pero conteniendo agua liviana en todo su volumen (sistema H₂O).

Se realizó una serie de cálculos con distintas fuentes.

La evolución del parámetro de convergencia UP2UP1 puede verse en figura 3. Presenta bruscas variaciones y repetitividad.

En cuanto a otros resultados, hay gran cantidad de flujos negativos y la convergencia espacial no presentaría problemas; las distribuciones radiales y axiales ajustan bien a valores medidos si se hace abstracción del signo.

Cabe mencionar, que se analizó si se satisfacían los criterios expresados en II.2, los cuales, para los materiales que estamos considerando, implican:

	Zr-4	H ₂ O
$\Delta r \leq$	1.25 cm	0.03 cm
$\Delta z \leq$	5.26 cm	0.26 cm

notándose que no estaban satisfechos en todos los intervalos espaciales; de todas maneras, se decidió no efectuar en principio correcciones a la red antes de probar otros métodos, pues las mismas implicaban pasar de 29 a 593 intervalos radiales y de 25 a 192 axiales, lo cual hubiera complicado extraordinariamente la ejecución del cálculo por el aumento en la dimensión del problema. Por otro lado, se estaba utilizando el modelo mixto (lineal más escalón, II.2.ii) que debería asegurar flujos positivos.

Se comenzó entonces la serie sistemática de pruebas de modelos y métodos de aceleración.

i. Prueba de modelos:

Se repitió el cálculo térmico con fuente plana con distintas combinaciones de modelos, sin que pudiera evitarse la aparición de flujos negativos. Durante esta serie pudo observarse que al aplicarse el modelo mixto no se verifica el signo del flujo resultante con lo cual, si bien no genera valores negativos, no impediría su propa-

gación; lo mismo puede suceder al utilizar el de diferencias pesadas que, como caso particular, puede reducirse al lineal.

ii. Métodos de aceleración:

Se estudiaron las aceleraciones por fuente, sobrerrelación y de "selfscattering".

La primera, si bien no es aplicable a este caso, no permite valores negativos del factor de corrección ni tampoco mayores que 10.

La segunda no se efectúa si la corrección es negativa.

La tercera, no previene valores negativos pero se verificó que no era la responsable del problema en estos casos.

2. Aceleración de "upscattering": Método diferencial

Completando lo anterior, se consideró la aceleración de "upscattering"; de allí resultó que el factor de corrección (TEMP) que ésta calcula y aplica, es el responsable de los flujos negativos para los casos en cuestión.

En efecto, analizando más en detalle, el factor de corrección es (3.c):

$$f = \text{TEMP} = \frac{Q_T}{Q_T - (UP2 - UP1)}$$

Si se grafica TEMP vs $(UP2 - UP1)/Q_T$ (figura 10) puede verse que la función tiene un punto singular en $UP2 - UP1 = Q_T$, tomando valores negativos para abscisas mayores. Los valores obtenidos en el cálculo, con $Q_T = 0.647 \text{ E}+05$, son los que se indican en la Tabla II.

Allí se observa que en la iteración exterior número 7, una oscilación grande del flujo hace que TEMP sea menor que cero con lo cual se generan flujos negativos al corregir.

Por otro lado, la corrección muestra una cierta inercia (ver iteraciones 2 y 3). Considerando que, por estimaciones unidimensionales, $RTE \approx 32$ para éste caso, en la iteración 2 el flujo ya está deprimido y sin embargo el factor de corrección definido en la iteración 3 es mucho menor que uno.

En la figura 5 puede verse la evolución del flujo térmico y en la figura 4, el parámetro de convergencia UP2UP1 (curvas denominadas "aceleración normal").

a. Distintas aproximaciones a la solución

Se intentó primero realizar una simple acotación de los valores del factor, tal que no pudieran realizarse correcciones demasiado fuertes ni generarse valores negativos, permitiéndose sólo aquellos valores de TEMP que estuvieran comprendidos entre 10 y 0.01, haciéndolo igual a 1.0 en todos los demás. Los resultados no fueron satisfactorios.

Observando en la figura 5 la curva correspondiente a la aceleración doblemente acotada se ve que el flujo térmico oscila lejos del valor estimado; el parámetro de convergencia (figura 4) muestra fuertes oscilaciones y tres convergencias que no corresponden a la finalización del problema ($EPS = 0.001$).

Se optó entonces por una solución tipo DTF-IV, evitándose solamente los valores negativos de TEMP, igualándolo a uno en esos casos; el flujo térmico parece mostrar un valor "preferido" cercano al estimado, pero la solución no es estable ("acotado simple", figura 5); por su parte, el parámetro de convergencia ("acotado simple", figura 4) varía muy bruscamente en un amplio rango.

Estos comportamientos fueron confirmados repitiendo los cálculos con "acotación simple" para otros sistemas en los que los resultados podían ser comparados con valores medidos.

En resumen, puede concluirse que el método de aceleración por "upscattering" incluido en el programa DOT3.5, genera flujos negativos; simples acotaciones del valor del factor de

corrección así como la eliminación lisa y llana de sus valores negativos proporcionan soluciones inestables y no indican tendencias válidas de la convergencia; además, el uso de un factor integral desestabiliza a los grupos rápidos y corrige innecesariamente a los epitérmicos.

Por otra parte, se observó también que la convergencia espacial se alcanza rápidamente en estos casos y que la corrección presenta una cierta inercia; esta se debe a que el término UP1, usado para el cálculo de f corresponde a los flujos de la iteración anterior, mientras que UP2 se obtuvo a partir de éstos pero luego de corregirlos por "upscattering".

b. Nuevo método de aceleración

Ante las conclusiones citadas, se decidió desarrollar un nuevo método de aceleración por "upscattering" para ser agregado al programa al que denominaremos método diferencial. Este deberá:

- asegurar la prevención de flujos negativos.
- estabilizar las soluciones y evitar las oscilaciones de la convergencia.
- racionalizar su aplicación teniendo en cuenta el caso particular de cada grupo de energía.

Como la base de estos métodos es un rebalance, si se quiere calcular el factor de corrección a aplicar después de la iteración k, se debe partir de la ecuación general (II.3.c) para esa iteración: (nótese que el término de selfscattering podría haberse suprimido por un rebalance anterior; aquí se lo incluye por comodidad en la programación):

$$F_g^k + \Sigma_g^T \bar{N}_g^k = Q_g + \sum_{g' < g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k + \sum_{g' > g} \Sigma_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^{k-1}$$

donde $\bar{N}_{g'}^{k-1}$ es el flujo de la iteración anterior corregido por el factor de aceleración correspondiente, tal como se lo utilizó para el cálculo de los N_g^k .

Se definen ahora, factores de corrección dependientes del grupo de energía, f_g , tales que la ecuación resulte balanceada si en ella se utilizan los flujos de esta última iteración, multiplicados por estos factores de corrección, o sea:

$$f_g (F_g^k + \sum_g T_{g,g}^k \bar{N}_g^k) = Q_g + \sum_{g'} \epsilon_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k f_{g'}$$

Partiendo entonces de la ecuación general y considerando esta definición de los f_g , operando en forma similar a la vista en II.3. resulta:

$$f_g = \frac{Q_g + \sum_{g'} \epsilon_{g' \rightarrow g} f_{g'} \bar{N}_{g'}^k}{Q_g + \sum_{g' < g} \epsilon_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^k + \sum_{g' > g} \epsilon_{g' \rightarrow g} \bar{N}_{g'}^{k-1}}$$

de donde pueden calcularse los f_g en forma iterativa. Puede verificarse que, integrando en energías, se satisface la condición de balance total:

$$\sum_g f_g F_g^k + \sum_g \epsilon_{g,g}^a f_g \bar{N}_g^k = Q_T$$

Este nuevo método dependiente de la energía fue incluido en el programa DOT 3.5; con el mismo, se repitieron los cálculos exitosamente.

En la figura 6, se observa que el parámetro de convergencia varía ahora en forma suave aproximándose a cero. Las oscilaciones que se observan corresponden a las primeras iteraciones de cada etapa ("restart") del cálculo (al igual que en la figura 8) ya que el programa no corrige por "upscattering" hasta haber definido UP2 y UP1 (después de la segunda iteración) por lo que el primer UP2UP1 es muy pequeño y la primera corrección exagerada.

Estas oscilaciones pueden originar convergencias ficticias como las indicadas en la figura 6, que han sido elimi-

nadas por programación en la opción de corrección diferencial de "upscattering" implementada en nuestra versión del DOT3.5.

Confirmando la bondad del método, el flujo del grupo térmico converge en forma estable hacia un valor cercano al estimado por cálculos unidimensionales (figura 7).

Resultados similares se obtuvieron en el sistema H_2O , caso térmico utilizando fuente con dependencia axial y en el sistema Zry-IV/ H_2O que había sido el que presentó, inicialmente, el problema (figuras 8 y 9).

IV. CONCLUSIONES

Se han resumido y discutido las principales características de los modelos de cálculo utilizados normalmente, en relación con el método S_n , en especial en cuanto a lo concerniente a la generación de flujos negativos.

También se hizo lo propio con los métodos de aceleración del cálculo, concluyéndose que, en programas de uso muy difundido, no están totalmente prevenidas la generación ni la propagación de flujos negativos y que aquellos pueden originar soluciones inestables.

Se ha desarrollado un nuevo método para el caso de aceleración por "upscattering" denominado método diferencial que, además de evitar dichos valores negativos de flujo, estabiliza la solución y proporciona una corrección mucho más detallada por ser dependiente del grupo de energía.

El mismo fue probado exitosamente en varios casos con gran efecto de "upscattering" e incluido como opción en el programa DOT3.5.

Agradecimientos

El presente trabajo ha recibido el apoyo de la Secretaría de Ciencia y Tecnología a través del proyecto código 02020101-001-0754 "Termalización de Neutrones".

Los autores desean agradecer al Centro de Tecnología y Ciencia de Sistemas de la Universidad de Buenos Aires por haber facilitado su equipo de computación y brindado apoyo y asesoramiento a lo largo del trabajo; en especial al Ing. E. del Puerto y al personal del Centro de Cómputos.

BIBLIOGRAFIA

- /1/ W.A. Rhoades - W.W. Engle Jr., "A new weighted difference formulation for discrete ordinates calculations" Trans. Am. Nuc. Soc. 27 776 (1977).
- /2/ W.F. Miller Jr., "Generalized rebalance: A common framework for transport acceleration methods" Nucl. Sci. Eng. 65, 26-236 (1978).
- /3/ W.A. Roadhes - E.T. Tomlinson, "Effectiveness of three rebalance methods in deep penetration problems" Trans. Am. Soc. 33, 717-721 (1979),
- /4/ R.E. Alcouffe, "The diffusion synthetic acceleration method applied to two dimensional neutron transport problems", Trans. Am. Nuc. Soc. 27, 347-348 (1977).
- /5/ P. Barbucci - F. Di Pasquoantonio, "Computational efficiency of some numerical solution of stationary Boltzmann equation for neutrons and gamma rays in slab geometry", Nucl. Sci. Eng. 82, 448-475 (1982).
- /6/ J.E. Morel, "A synthetic acceleration method for discrete ordinates calculations with highly anisotropic scattering", Nucl. Sci. Eng. 82, 34-47 (1982).
- /7/ Gelbard-Khalil, "Alternative differencing technique for the synthetic method", Trans. Am. Nuc. Soc. 45, 323-324 (1983).
- /8/ W.A. Rhoades, "DOT3.5, two dimensional discrete ordinates radiation transport code", CCC-276 RSIC, ORNL, Oak Ridge, Tennessee (1976).
- /9/ W.W. Engle and F.R. Mynatt, "ANISN, a one dimensional discrete ordinates transport code", CCC-82 RSIC, ORNL, Oak kidge, Tennessee (1969).
- /10/ K.D. Lathrop, "DTF-IV, a FORTRAN IV program for solving the multigroup transport equation with anisotropic scattering", LA-3373, Los Alamos Scientific Laboratory (1965).

- /11/ W.A. Rhoades et al., "DOT IV, two dimensional discrete ordinates radiation transport code system", CCC-320, RSIC, ORNL, Oak Ridge, Tennessee (1979).
- /12/ F. Casali, "Modifiche al codice DOT3.5 e studi sul codice SDX", comunicación privada, 1983.
- /13/ Carlson and Lathrop, "Transport theory - The method of discrete ordinates", Chapter 3 in "Computing methods in reactor physics", Greenspan, Kelber and Okrent Editors, Gordon and Breach (1968).
- /14/ Bell and Glasstone, "Nuclear reactor theory", Van Nostrand Reinhold Company (1970).
- /15/ R.J.J. Stamm'ler - M.J. Abbate, "Methods of steady state reactor physics in nuclear design", Academic Press (1983).

Relación RTE en distintos casos para el sistema H₂O/Zr₂IV
(flujo angular a 0°)

Tabla 1

Radio		RTE Térmico con fuente plana			RTE Rápido		RTE Térmico con fuente dependiente de Z
N°	cm	1° convergencia (punto 1)	2° convergencia (punto 2)	3° convergencia (punto 3)	42 iteraciones exteriores	1° convergencia (punto 5)	1° convergencia (punto 4)
1	0.00	126.	84.	78.	8.75	8.80	46.7
2	0.30	202.	135.	125.	8.60	8.70	74.2
3	0.80	295.	199.	186.	8.20	8.30	112.
4	1.30	246.	171.	161.	7.50	7.60	105.
7	2.40	31.	23.	22.2	5.60	5.70	15.9
14	3.99	-	1.64	1.58	5.30	5.30	1.10
18	5.10	1.06	<1.00	<1.00	5.04	5.10	<1.00
24	10.00	<1.00	<1.00	<1.00	4.30	4.40	<1.00

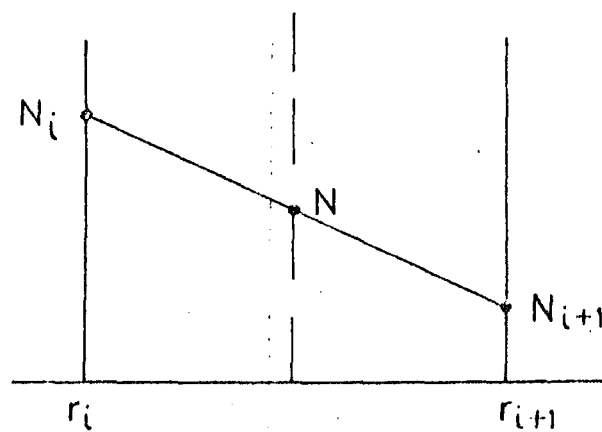
Tabla II

Generación de flujos negativos
(sistema H₂O con fuente plana)

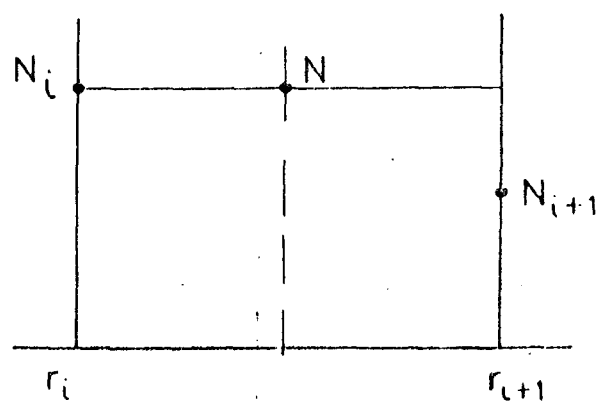
$$Q_T = 0.647E+05$$

It.Ext. N°	UP2UP1	(UP2-UP1)	TEMP	RTE
1	-	-	-	959.
2	0.04	-0.70E+08	0.994E-03	1181.
3	0.99	-0.17E+10	0.400E-04	1.76
4	-	-	-	0.70
5	Restart	-	-	1.34
6	-0.48	0.58E+05	0.882E+01	1.93
7	-7.93	0.17E+07	-0.480E-01	16.1
8	-	-	-	0.0

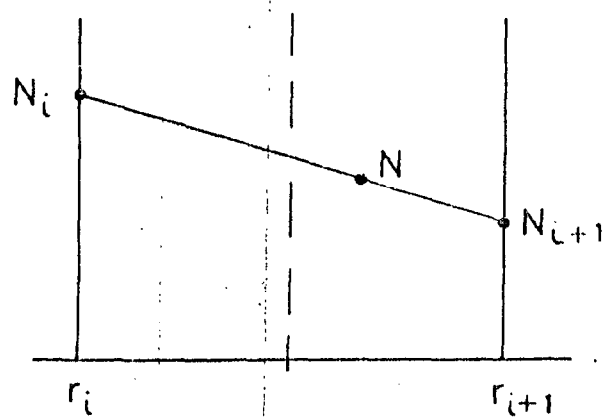
MODELOS DE CALCULO



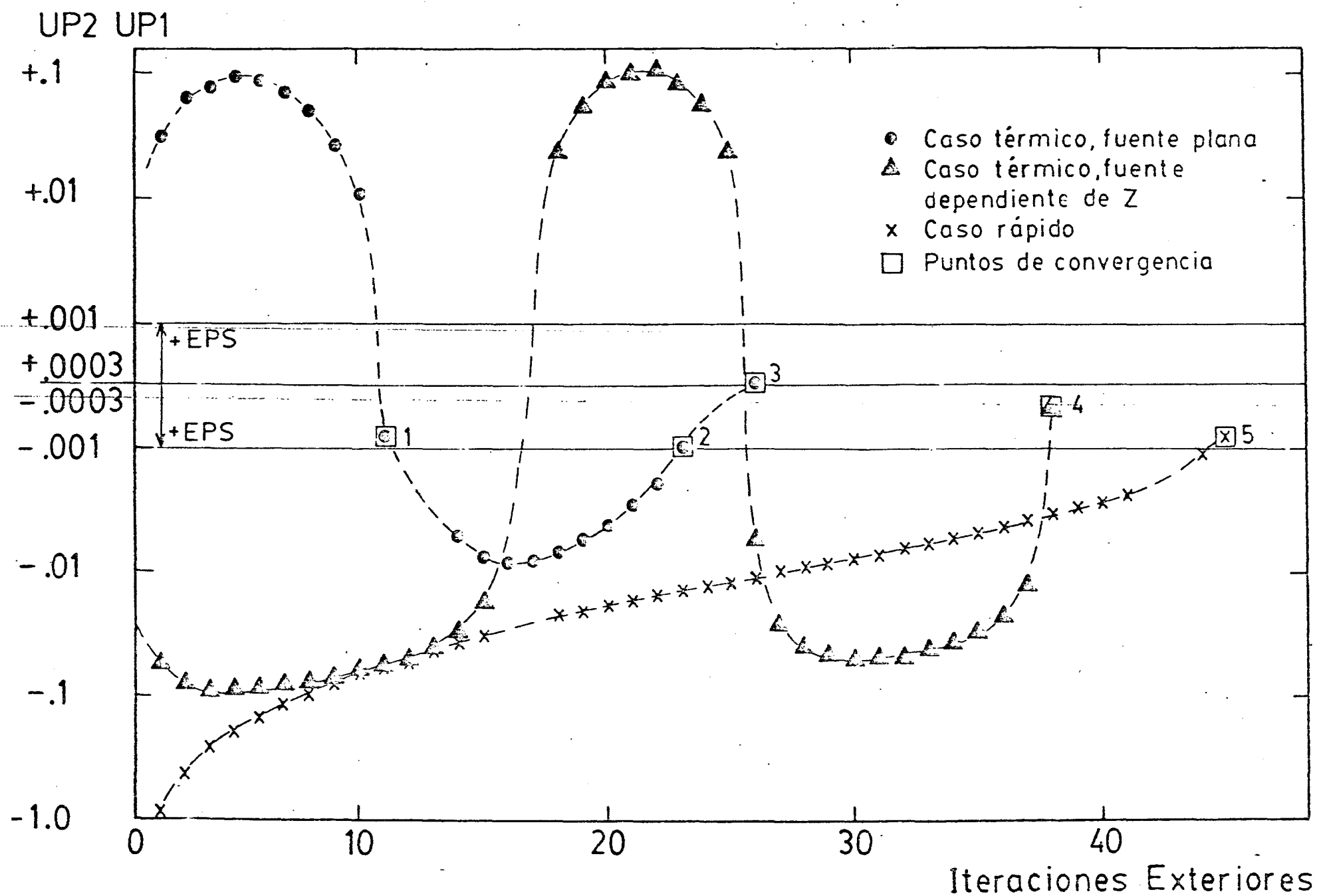
1.1 Modelo lineal



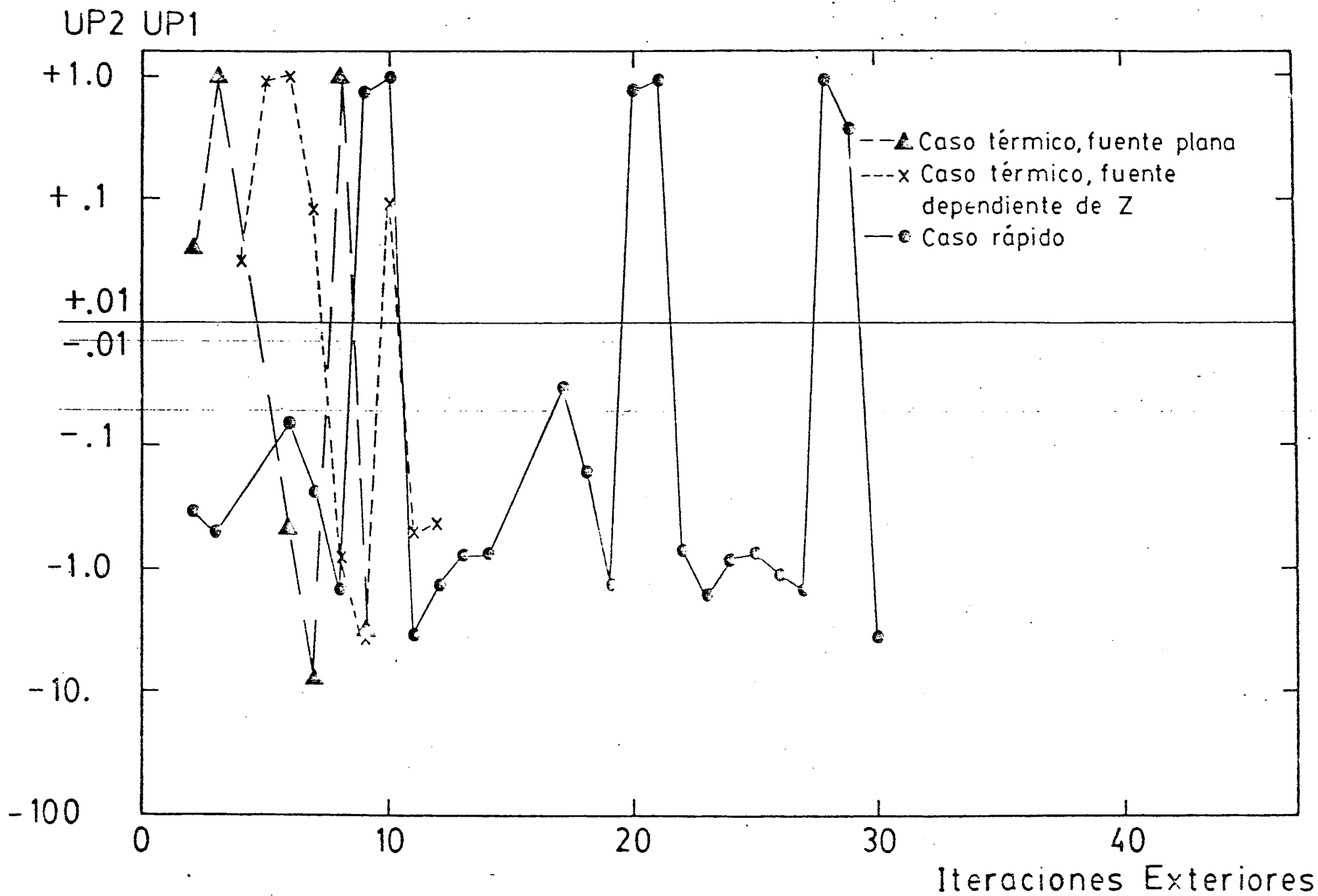
1.2 Modelo escalón



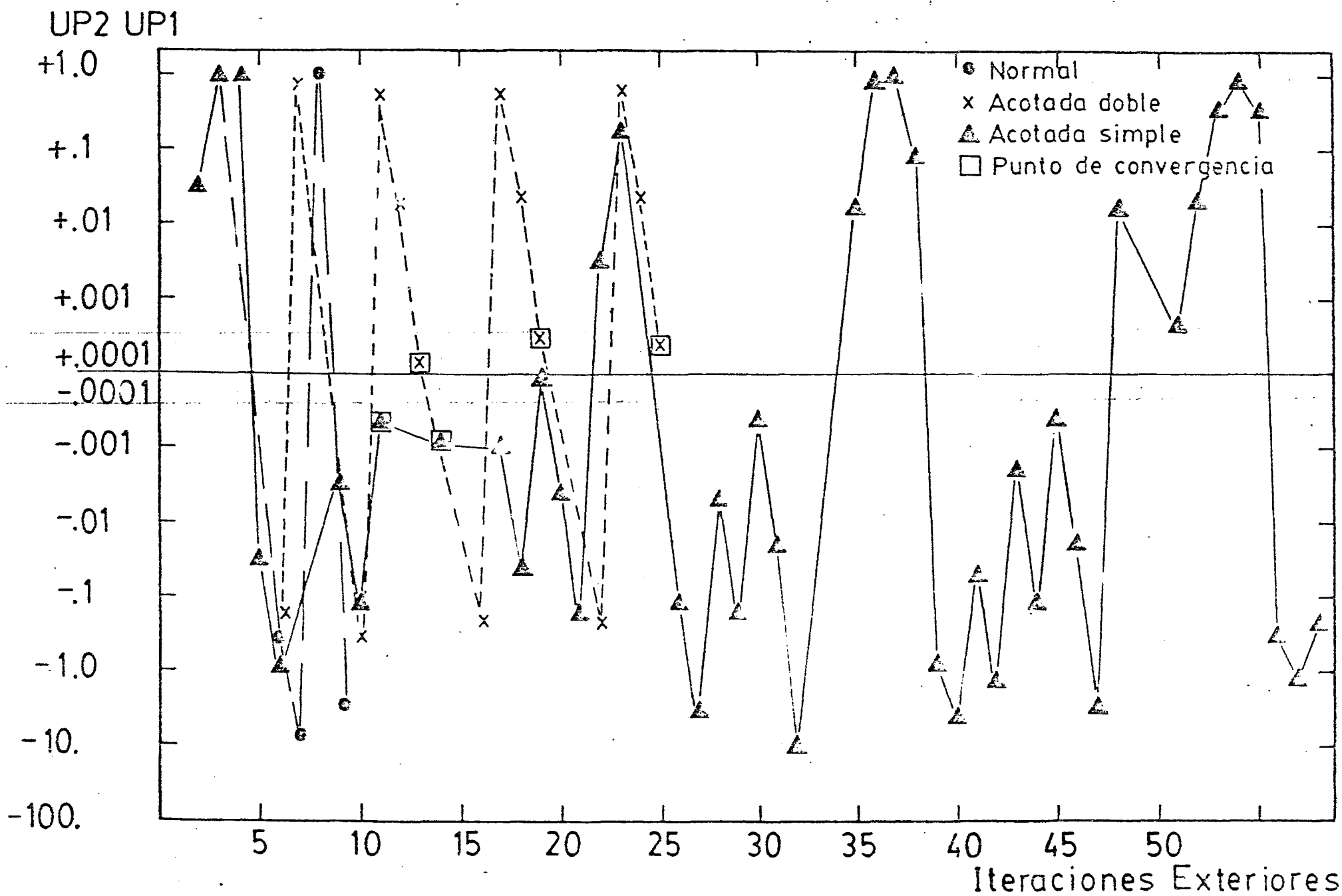
1.3 Modelo diferencias pesadas



CONVERGENCIA EN EL SISTEMA $H_2O/Zr-IV$ EN DISTINTOS CASOS
(ACCELERACIÓN NORMAL)



CONVERGENCIA EN EL SISTEMA H_2O EN DISTINTOS CASOS
(ACCELERACION NORMAL)

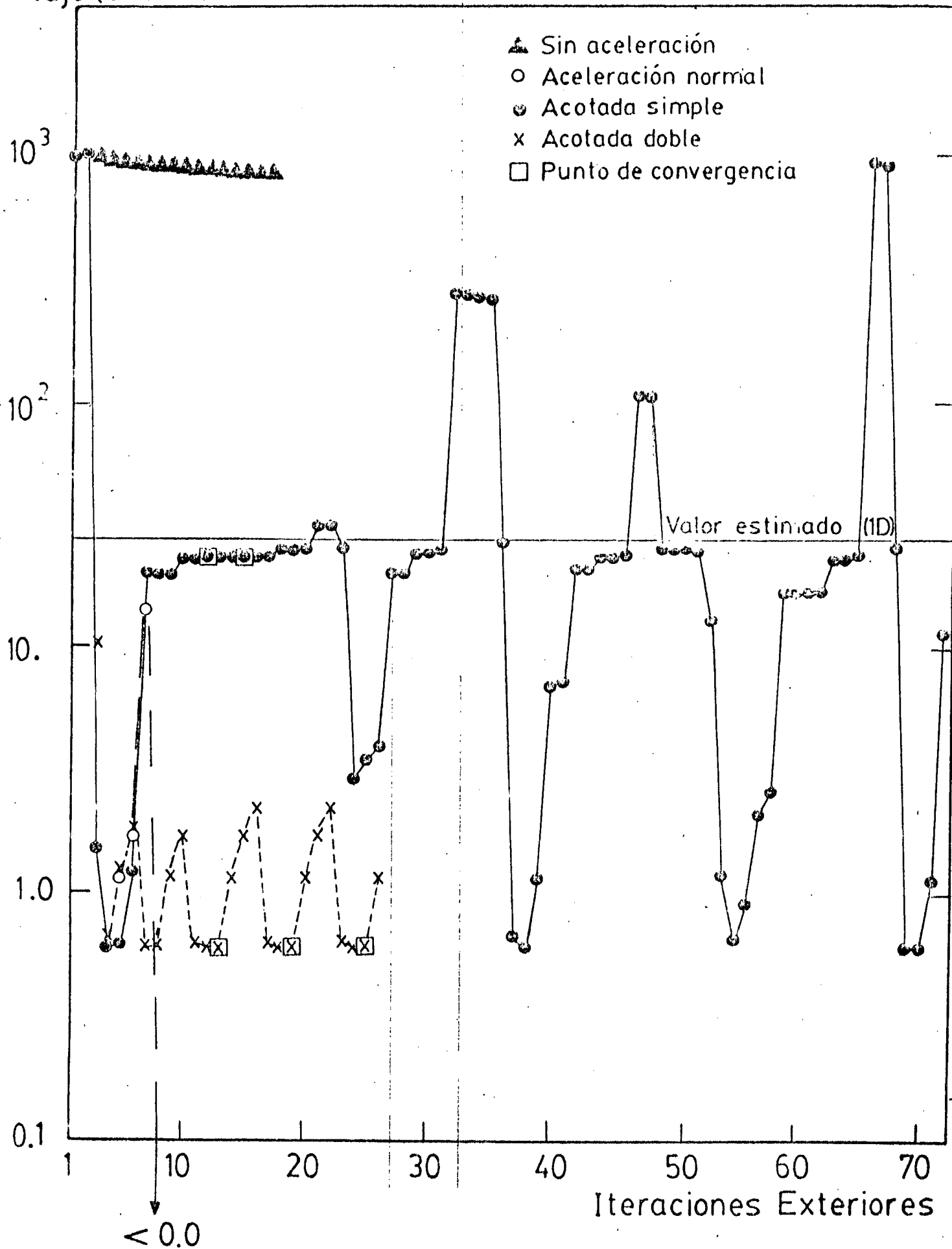


CONVERGENCIA CON DISCONTINUIDADES AGRIETACIONES:
(SISTEMA H_2O , CASO TÉRMICO, FUENTE PLANA)

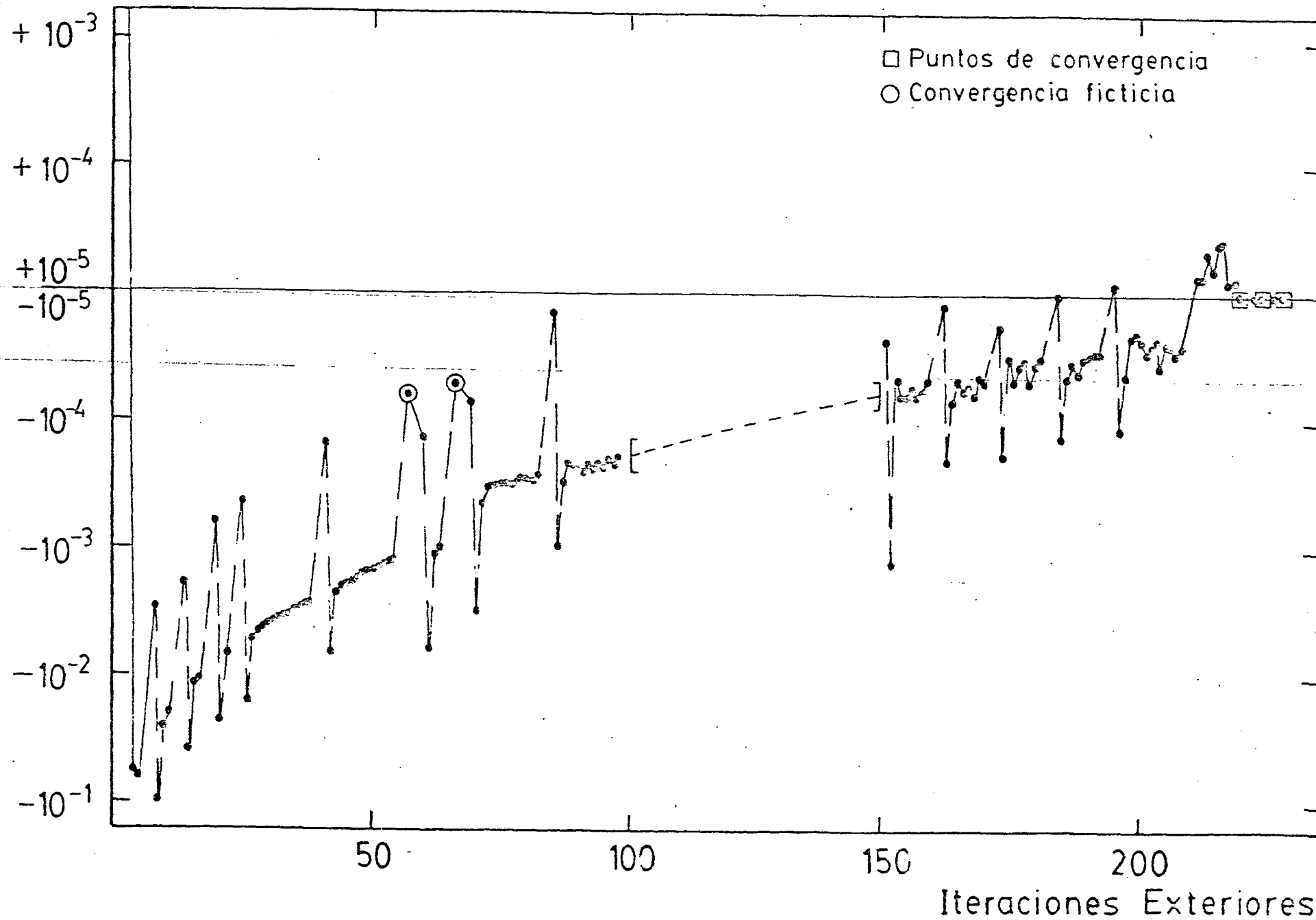
EVOLUCION DEL FLUJO TERMICO CON DISTINTAS ACELERACIONES

(SISTEMA H_2O , CASO TERMICO, FUENTE PLANA)

Flujo (u. arb.)



UP2 UP1

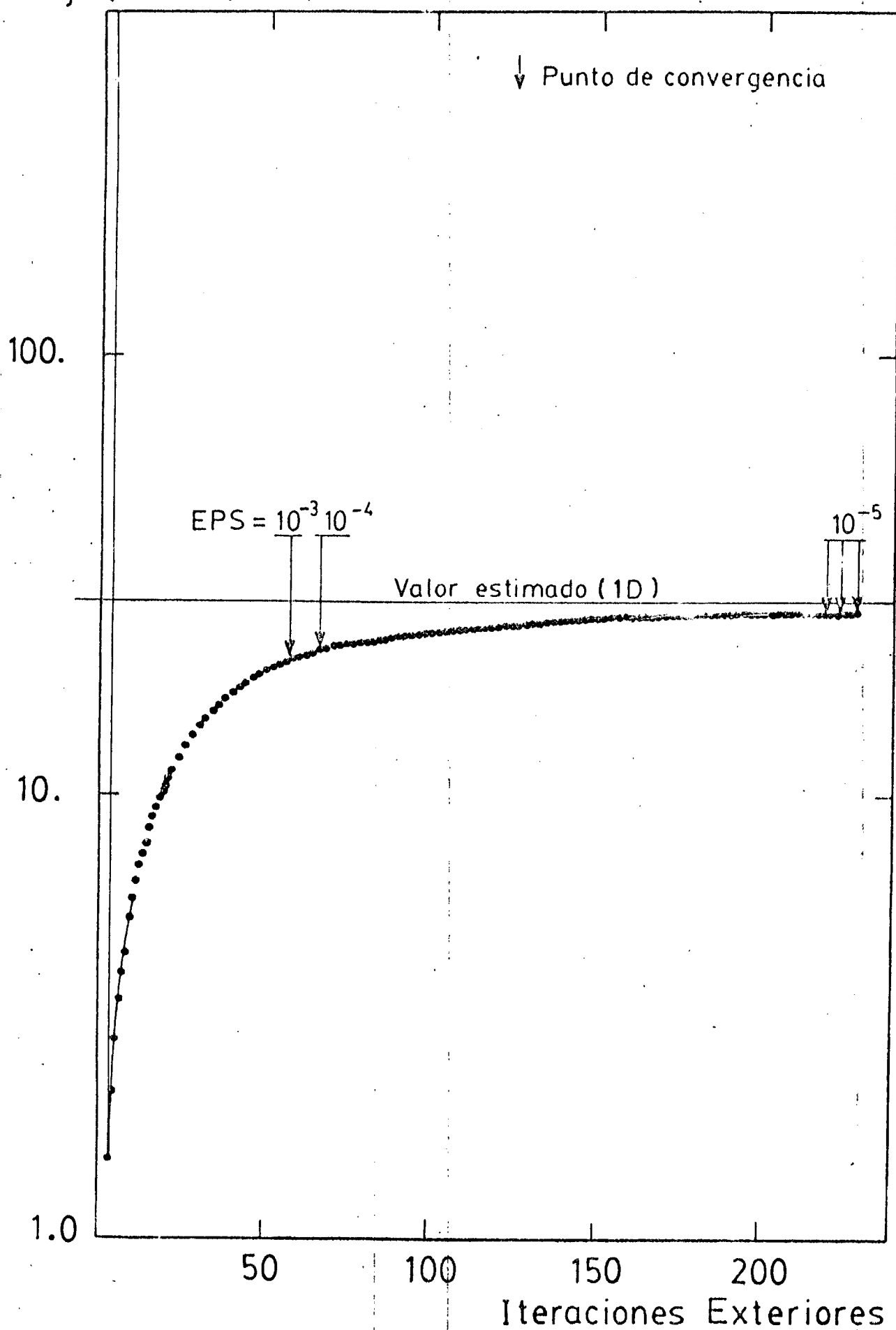


CONVERGENCIA CON ACCELERACION DIFERENCIAL
(SISTEMA H_2O , CASO TERMICO, FUENTE PLANA)

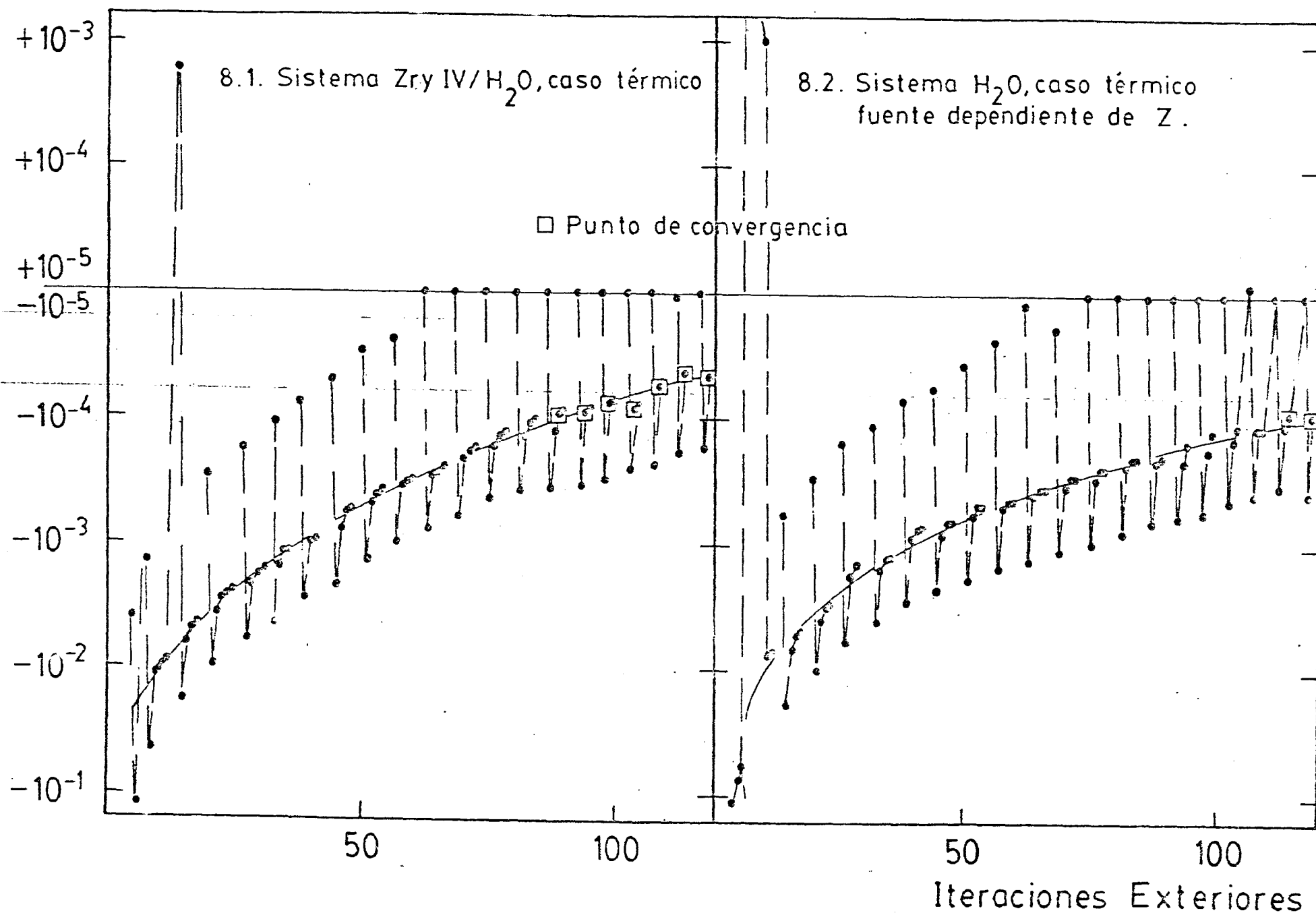
EVOLUCION DEL FLUJO TERMICO CON ACELERACION DIFERENCIAL

(SISTEMA H_2O , CASO TERMICO, FUENTE PLANA)

Flujo (u.arb.)

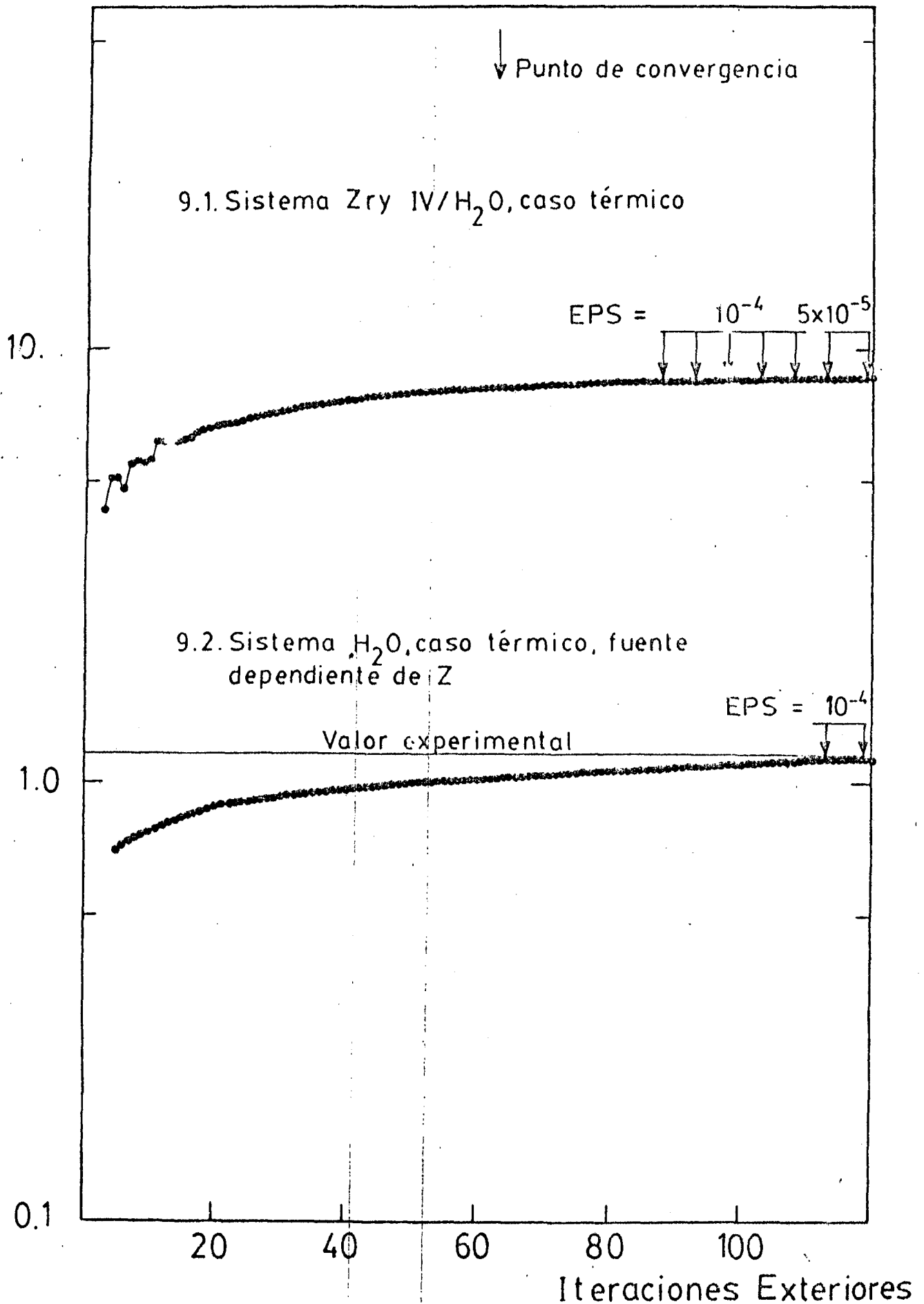


UP2 UP1



EVOLUCION DEL FLUJO TERMICO CON ACELERACION DIFERENCIAL

Flujo (u.arb.)



FACTOR DE CORRECCION POR UPSCATTERING
EN ACELERACION NORMAL (DOT 3.5)

