

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1981

02.81.12

11

CAB/7/1979

IMPLEMENTACION DE OPCIONES EN EL CALCULO DE CONSTANTES MULTIGRUPO

H. Boado - Carlos Gho.

Centro Atómico Bariloche
Instituto Balseiro
Comisión Nacional de Energía Atómica
Universidad Nacional de Cuyo
Bariloche -- Argentina

RESUMEN

Como parte de un programa de perfeccionamiento del sistema de cálculos neutrónicos ACNYR de la División Neutrónica y Reactores (NYR) del Centro Atómico Bariloche (CAE, se ha implementado en el programa generador de constantes multigrupo GRUCOM /1/ diversas opciones para permitir el cálculo en distintas aproximaciones antes no accesibles. Son ellas las así llamadas "Pn" y "Extendida de Transporte", junto con una similar a esta última pero con mayor sencillez en el manejo de datos.

Se ha implementado además un código de condensación de constantes multigrupo y desarrollado el método que permite el cálculo de autovalores en sistemas no multiplicativos, con códigos de iteración en la fuente.

I - Introducción.

La diversidad de cálculos neutrónicos que se realizan en la División Neutrónica y Reactores, requiere una adecuada versatilidad en la obtención de constantes multigrupos.

La comparación de resultados con los obtenidos en otros laboratorios o en NYR(CAB) por la vía experimental cuando ello es posible, se ve así facilitada. Es con ese criterio que se han implementado distintas opciones para los cálculos. La experiencia en su uso permitirá seleccionar la más adecuada para cada caso.

II- La ecuación de transporte: distintas aproximaciones para resolverla.

La ecuación de transporte independiente del tiempo en geometría plana es:

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu, E)}{\partial x} + \sigma(x, E) \phi(x, \mu, E) = \int \int \sigma(x, E') f(x, \vec{\Omega}' E' \rightarrow \Omega, E) \phi(x, \mu', E') d\Omega' dE' + Q(x, \mu, E) \quad (1)$$

Suponiendo que la función de dispersión $f(x, \vec{\Omega}' E' \rightarrow \vec{\Omega}, E)$ sólo depende del ángulo de dispersión (arcos μ_0) se tiene

$$\begin{aligned} \sigma(x, E') f(x, \vec{\Omega}' E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) &= \sigma(x, E') f(x, E' \rightarrow E, \mu_0) = \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sigma_{\ell}(x, E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu_0) \end{aligned} \quad (2)$$

donde

$$\mu_0 = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$$

y

$$\sigma_{\ell}(x, E' \rightarrow E) = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(x, E') f(x, E' \rightarrow E, \mu) P_{\ell}(\mu) d\mu \quad (3)$$

Finalmente, utilizando el teorema de adición de Polinomios de Legendre, resulta:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \phi}{\partial x}(x, \mu, E) + \sigma(x, E) \phi(x, \mu, E) &= Q(x, \mu, E) + \\ + \int \int \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} \sigma_{\ell}(x, E' \rightarrow E) P_{\ell}(\mu) P_{\ell}(\mu') \phi(x, \mu', E') d\Omega' dE' \end{aligned} \quad (4)$$

Esta expresión es exacta para geometría plana y se ha supuesto únicamente la (2). Normalmente se utilizan las constantes de grupo deducidas para geometría plana en cualquier tipo de geometría.

Dada la complejidad existente en la resolución de esta ecuación se utilizan métodos numéricos, dos de los cuales serán esbozados a continuación.

1 - El Método P_n

Someramente puede decirse que consiste en desarrollar el flujo angular de neutrones en series de polinomios de Legendre, mientras que las variables energía y posición son tratadas en forma discreta.

Se obtiene así un conjunto de ecuaciones acopladas de la forma

$$\begin{aligned} (n+1) \frac{\partial \phi_{n+1}(x, E)}{\partial x} + n \frac{\partial \phi_{n-1}(x, E)}{\partial x} + (2n+1)\sigma(x, E) \phi_n(x, E) = \\ = (2n+1) \int_0^{\infty} \sigma_n(x, E' \rightarrow E) \phi_n(x, E') dE' + (2n+1) Q_n(x, E) \end{aligned} \quad (5)$$

donde $n = 0, 1, 2, \dots$

Este conjunto de ecuaciones es equivalente a la ecuación original (1). La aproximación P_n se obtiene resolviendo las primeras (n+1) ecuaciones (5) imponiendo

$$\frac{\partial \phi_{n+1}(x, E)}{\partial x} = 0 \quad (6)$$

Si la resolución de este nuevo conjunto se realiza por métodos multigrupo, se divide el rango de energías de interés en una cantidad IGM de intervalos más pequeños. Se definen entonces las constantes de grupo

$$\phi_{n,g}(x) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi_n(x, E) dE \quad (7)$$

$$Q_{n,g}(x) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} Q_n(x, E) dE \quad (8)$$

$$\sigma_{n,g}(x) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(x, E) \phi_n(x, E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi_n(x, E) dE} \quad (9)$$

$$\sigma_{n,g \rightarrow g'}(x) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \sigma_n(x, E' \rightarrow E) \phi_n(x, E') dE' dE}{\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \phi_n(x, E') dE'} \quad (10)$$

Se obtiene de esta forma un nuevo conjunto de ecuaciones formalmente idéntico al (5)

$$\begin{aligned}
 (n+1) \frac{\partial \phi_{n+1,g}(x)}{\partial x} + n \frac{\partial \phi_{n-1,g}(x)}{\partial x} + (2n+1) \sigma_{n,g}(x) \phi_{n,g}(x) &= \quad n=0,1,2,\dots,N \\
 \text{IGM} & \\
 = (2n+1) \sum_{g'=1}^{\text{IGM}} \sigma_{n,g' \rightarrow g} \phi_{n,g'}(x) + (2n+1) Q_{n,g}(x) & \quad g=1,2,\dots,\text{IGM}
 \end{aligned} \tag{11}$$

2 - El Método Sn

Es el que utilizan dos de los programas de cálculo de ACNYR./1/ y /2/. Consiste en evaluar la distribución angular del flujo de neutrones en una cantidad de direcciones angulares discretas, en lugar del tratamiento continuo del método antes descrito, de los armónicos esféricos.

Es posible, por lo tanto, al menos teóricamente, obtener el grado de exactitud de la solución que se requiera con sólo variar la cantidad de direcciones de cálculo consideradas.

Partiendo de la (4) e integrando entre E_{g+1} y E_g para obtener las ecuaciones multigrupo se tiene

$$\begin{aligned}
 \mu \frac{\partial \phi_g(x,\mu)}{\partial x} + \int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(x,E) \phi(x,\mu,E) dE &= Q_g(x,\mu) + \\
 + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\mu) \sum_{g'=1}^{\text{IGM}} \int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \int_{E_{g+1}}^{E_g} dE \phi_\ell(x,E') \sigma_\ell(x,E' \rightarrow E) & \tag{12}
 \end{aligned}$$

o definiendo

$$\phi_g(x,\mu) = \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(x,\mu,E) dE \tag{13}$$

$$\sigma_g(x,\mu) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(x,E) \phi(x,\mu,E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi(x,\mu,E) dE} \tag{14}$$

$$\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} dE' \int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma_\ell(x,E' \rightarrow E) \phi_\ell(x,E') dE \tag{15}$$

$$\int_{E_{g'+1}}^{E_{g'}} \phi_\ell(x,E') dE'$$

resulta

$$\mu \frac{\partial \phi_g(x, \mu)}{\partial x} + \sigma_g(x, \mu) \phi_g(x, \mu) = Q_g(x, \mu) + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'} \sigma_{\ell, g' \rightarrow g}(x) \phi_{\ell, g'}(x) \quad (16)$$

con

$$\phi_{\ell, g}(x) = 2\pi \int_{-1}^1 \phi_g(x, \mu) P_{\ell}(\mu) d\mu$$

Si comparamos las ecuaciones (13), (14) y (15) con las correspondientes (7), (9) y (10) que se obtienen del método Pn se observa que si bien los elementos de las matrices de dispersión son iguales, no ocurre lo mismo con las secciones eficaces, que son dependientes del ángulo.

3 - Distintas aproximaciones en el cálculo de constantes multigrupo para el método Sn.-

El programa DTF-IV resuelve el sistema de ecuaciones acopladas

$$\mu \frac{\partial \psi_g}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_g(x) \psi_g(x, \mu) = Q_g(x, \mu) + \sum_{\ell=0}^{IGM} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \psi_{\ell, g'}(x) \sigma_{g' \rightarrow g}^{(\ell)}(x)$$

donde

$$\psi_{\ell, g}(x) = 2\pi \int_{-1}^1 \psi_g(x, \mu) P_{\ell}(\mu) d\mu \quad (17)$$

Y el problema reside en la adecuada elección de los parámetros

$$\sigma_g(x) \text{ y } \sigma_{g' \rightarrow g}^{(\ell)}(x)$$

de forma que la solución $\psi_g(x, \mu)$ sea lo más aproximada al flujo del grupo "g".

a) Flujo separable

$$\phi(x, \mu, E) = \phi_1(x, \mu) \phi_2(E) \quad (\text{lo importante es que } \mu \text{ y } E \text{ estén separadas})$$

En este caso la (14) queda

$$\sigma_g(x, \mu) = \frac{\phi_1(x, \mu) \int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(x, E) \phi_2(E) dE}{\phi_1(x, \mu) \int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi_2(E) dE} \rightarrow \sigma_g(x) = \frac{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \sigma(x, E) \phi_2(E) dE}{\int_{E_{g+1}}^{E_g} \phi_2(E) dE} \quad (19)$$

similar a la (9) correspondiente a la aproximación Pn

b) Otras aproximaciones.-

Definiendo

$$\phi(x, \mu, E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \phi_{\ell}(x, E) \quad (20)$$

y pasando a una estructura multigrupo, la (16) se transforma en

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \phi_g}{\partial x}(x, \mu) + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \phi_{\ell, g}(x) \sigma_{\ell, g}(x) &= Q_g(x, \mu) + \\ &+ \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{\ell, g'}(x) \sigma_{\ell, g'+g}(x) \end{aligned} \quad (21)$$

o bien, utilizando la "delta de Kröenecker"

$$\mu \frac{\partial \phi_g}{\partial x}(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{\ell, g'}(x) \left[\begin{array}{c} \sigma_{\ell, g'+g}(x) \\ -\sigma_{\ell, g}(x) \delta_{g'g} \end{array} \right] + Q_g(x, \mu) \quad (22)$$

y sumando a ambos miembros el término $\sigma_g(x) \phi_g(x, \mu)$ se obtiene

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x, \mu) + \sigma_g(x) \phi_g(x, \mu) &= \sigma_g(x) \phi_g(x, \mu) + \\ &+ \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{\ell, g'}(x) \left[\begin{array}{c} \sigma_{\ell, g'+g}(x) \\ -\sigma_{\ell, g}(x) \delta_{g'g} \end{array} \right] + Q_g(x, \mu) \end{aligned} \quad (23)$$

y desarrollando en polinomios de Legendre el primer término del segundo miembro y después de una reagrupación de términos se tiene:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x, \mu) + \sigma_g(x) \phi_g(x, \mu) &= \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_{\ell}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{\ell, g'}(x) \left[\begin{array}{c} \sigma_{\ell, g'+g}(x) \\ + \left[\begin{array}{c} \sigma_g(x) \\ -\sigma_{\ell, g}(x) \end{array} \right] \delta_{g'g} \end{array} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

Para esta expresión se conocen todos los parámetros a excepción de $\sigma_g(x)$ que debe determinarse..

Comparando la (24) con la (17) se puede ver que para que DTF-IV calcule los flujos correctos debe ser $\phi_g(x, \mu) = \psi_g(x, \mu)$ lo cual conduce a

$$\sigma_{g' \rightarrow g}^{(\ell)}(x) = \sigma_{\ell, g' \rightarrow g} \quad g \neq g' \quad (26)$$

$$\sigma_{g' \rightarrow g}^{(\ell)}(x) = \sigma_{\ell, g' \rightarrow g}^{(x)} + \sigma_g^{(x)} - \sigma_{\ell, g}^{(x)} \quad g = g' \quad (27)$$

La aproximación en el desarrollo en polinomios de Legendre se corta en algún término L , con lo que se tiene IGM $\times (L + 1)$ expresiones del tipo (27) faltando fijar IGM condiciones para la determinación de $\sigma_g^{(x)}$.

De las distintas formas en que se eligen estas condiciones, surgen las correspondientes aproximaciones.

1) - Consistente con P

Se elige:

$$\sigma_g^* = \sigma_{0, g} = \frac{\int_{E_{g+1}}^E \sigma(x, E) \phi_0(x, E) dE}{\int_{E_{g+1}}^E \phi_0(x, E) dE} \quad (28)$$

por lo cual los parámetros para calcular con el programa que usa el método S_N resultan:

$$\begin{aligned} \sigma_{g' \rightarrow g}^{(\ell)}(x) &= \sigma_{\ell, g' \rightarrow g}^{(x)} & g' \neq g \\ \sigma_{g \rightarrow g}^{(\ell)}(x) &= \sigma_{\ell, g \rightarrow g}^{(x)} + \sigma_{0, g}^{(x)} - \sigma_{\ell, g}^{(x)} & g' = g \end{aligned} \quad (29)$$

Para interpretar el significado de la expresión "consistente con P", es necesario integrar en la variable μ entre $(-1, 1)$; hecho esto y con la elección de parámetros realizada se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi_{1, g}^{(x)} + \sigma_g^{(x)} \phi_{0, g}^{(x)} = \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{0, g}^{(x)} \sigma_{0, g' \rightarrow g}^{(x)} + Q_{0, g}^{(x)}$$

expresión idéntica a la dada para la aproximación P_0 , con tal que se haga

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi_{1, g}^{(x)} = 0$$

2) - Aproximación extendida de transporte.-

A partir de la expresión (24), que se decide desarrollar hasta un $l = L$, esta aproximación impone anular el término siguiente del desarrollo, es decir:

$$\frac{2(L+1)+1}{4} P_{L+1}(\mu) \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{L+1,g}^{(x)} \left[\sigma_{L+1,g' \rightarrow g}^{(x)} + \left[\sigma_g^{(x)} - \sigma_{L+1,g}^{(x)} \right] \delta_{g'g} \right] = 0 \quad (30)$$

Considerando válido el principio de balance detallado es posible imponer la condición

$$\sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{L+1,g'}^{(x)} \sigma_{L+1,g' \rightarrow g}^{(x)} = \sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{L+1,g}^{(x)} \sigma_{L+1,g \rightarrow g'}^{(x)} \quad (31)$$

con lo cual la (30) queda:

$$\frac{2(L+1)+1}{4} P_{L+1}(\mu) \left[\sum_{g'=1}^{IGM} \phi_{L+1,g}^{(x)} + \sigma_{L+1,g \rightarrow g}^{(x)} + \phi_{L+1,g}^{(x)} \left[\sigma_g^{(x)} - \sigma_{L+1,g}^{(x)} \right] \right] = 0$$

de donde se obtiene

$$\sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{L+1,g \rightarrow g'}^{(x)} + \sigma_g^{(x)} - \sigma_{L+1,g}^{(x)} = 0$$

la que a su vez nos da la condición:

$$\sigma_g^{(x)} = \sigma_{L+1,g}^{(x)} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{L+1,g \rightarrow g'}^{(x)} \quad (32)$$

3) Aproximación "NYRETA"

Se deriva de la anterior y consiste en suponer que los distintos promedios de la sección eficaz total son iguales. Esto será tanto más ajustado a la realidad cuanto más densa y acertada sea la elección de la red de energías.

En el cuadro que sigue pueden verse las distintas formas que adoptan los parámetros S_N en las tres aproximaciones vistas.

4) Condensación de constantes multigrupos

Un sencillo programa permite utilizar el flujo salido del programa DTF-4 para reducir la cantidad de grupos con buenos resultados y reduciendo la cantidad de tiempo de cálculo.

Distintos valores de los parámetros S_N en las aproximaciones 1), 2) y 3).

Orden Scatt.	Parámetro S_N	Consistente con P	Ext. de transporte	MYRETA
P ₀	σ_g	$\sigma_{0,g}$	$\sigma_{1,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{1,g'+g'}$	$\sigma_{tr,g}$
	$\sigma_{g' \rightarrow g}^{(0)}$	$\sigma_{0,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$
	$\sigma_{g \rightarrow g}^{(0)}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g} + \sigma_{1,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$
P ₁	σ_g	$\sigma_{0,g}$	$\sigma_{2,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{2,g \rightarrow g'}$	$\sigma_{tot,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$
	$\sigma_{g' \rightarrow g}^{(0)}$	$\sigma_{0,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g' \rightarrow g}$
	$\sigma_{g \rightarrow g}^{(0)}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g} + \sigma_{2,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{2,g \rightarrow g'}$	$\sigma_{0,g \rightarrow g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{2,g \rightarrow g'}$
	$\sigma_{g' \rightarrow g}^{(1)}$	$\sigma_{1,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{1,g' \rightarrow g}$	$\sigma_{1,g' \rightarrow g}$
	$\sigma_{g \rightarrow g}^{(1)}$	$\sigma_{1,g \rightarrow g} + \sigma_{0,g} - \sigma_{1,g}$	$\sigma_{1,g \rightarrow g} + \sigma_{2,g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{2,g \rightarrow g'}$	$\sigma_{1,g \rightarrow g} - \sum_{g'=1}^{IGM} \sigma_{2,g \rightarrow g'}$

4 - Cálculos realizados y resultados.-

Se calculó la constante de multiplicación de una esfera desnuda de Pu-239 de 5,3 cm de radio y con una densidad de 0,0393 át/b.cm. El mismo cálculo fue realizado por Velarde /7/ a partir de la biblioteca ENDF/B III, a 26 grupos, 30 intervalos y aproximación S_8 .

En los cálculos del MYR se utilizó la biblioteca rápida de GGC-3 con una red de energías a 27 grupos semejante a la de /7/. En el cuadro que sigue se dan los resultados obtenidos.

Identif. Cálculo	S_N	P_N	Cantidad Interval.	Tiempo de Cálculo (m)	"k"	% (respecto de /7/)
600003 (IG:Fisión)	4	0	15	9	0,982	+ 13,4
600004 (IG:Fisión)	8	0	15	7	0,974	+ 12,5
600005 (IG:600004)	8	0	15	5	0,974	+ 12,5
600006 (IG:Fisión)	8	0	30	9,5	0,974	+ 12,5
600007 (IG:600006)	8	1	30	18	0,769	- 11,23
600008 (IG:600007)	8	2	30	28	0,794	- 8,4
600009 (IG:600006)	8	NYREXA L = 0	30	13	0,911	+ 5,25
600010 (IG:600006)	8	NYREXA L = 1	30	18	0,773	- 10,7
600011 (IG:600006)	8	"E.T.A." L = 0	30	20	0,911	+ 5,24

(IG = Input Guess)

Aquí puede verse que los mejores resultados fueron obtenidos con la aproximación extendida de transporte y "NYREXA". Aunque no debe interpretarse como un resultado general, no se obtuvieron mejoras sensibles por un aumento en la cantidad de intervalos o en la cantidad de direcciones.-

III - CALCULO DE AUTOVALORES EN MEDIOS NO MULTIPLICATIVOS.-

Quando se intenta el cálculo del autovalor "alfa" (asociado con el decaimiento temporal del sistema o cualquier otro, en un medio multiplicativo utilizando los programas DTF /4/ y/o ANISN /1/, /2/, se choca con una dificultad proveniente de sus diseños.

Los test de convergencia que ellos realizan se basan en evaluar el efecto que la modificación del autovalor a ser calculado produce sobre la fuente total (integral en todas las variables) de fisión. Esto impone que tanto el espectro de fisión como la sección eficaz de fisión multiplicada por ν (numero medio de neutrones por fisión) sean distintos de cero, al menos para uno de los grupos de energía.

Antos programas, como se ve, han sido desarrollados con miras a resolver problemas en medios multiplicativos, y no están capacitados para la resolución de ecuaciones de autovalores en medios que no cumplen ese requisito.

Con el fin de salvar esta dificultad se han estudiado algunos métodos alternativos, muchos de los cuales sin resultados positivos.

Sin embargo, uno de ellos probó ser de gran confiabilidad y se describe a continuación.

1 - Método de Cálculo.-

La modificación de la programación para posibilitar el cálculo puede resultar engorrosa y, por supuesto, larga y tediosa.

Una simple modificación de los datos de entrada posibilita la ejecución de tales problemas.

Se elige un par de grupos g y g' de energía, de forma tal que

$$\sigma_{g \rightarrow g'} \neq 0.0$$

Preferiblemente su valor debe ser pequeño frente a los de otras constantes relacionadas, a fin de evitar imprecisiones del cálculo en el mayor grado posible.

Se impone ahora $\sigma_{g \rightarrow g'} = 0.0$ pero se crea una $\nu \sigma_g^{\text{fis}}$ igual al valor de la anterior $\sigma_{g \rightarrow g'}$. Este valor es sumado a la σ_g^{abs} . Por último se crea un espectro de fisión ficticio de forma tal que $\chi_{g'} = 1.0$ y es nulo para cualquier otro grupo.

En resumen, se tiene lo siguiente:

	ANTES	DESPUES
$\sigma_{g \rightarrow g'}$	$A \neq 0.0$	0.0
σ_g^{fis}	0.0	A
σ_g^{abs}	B	B + A
$\chi_{g'}$	0.0	1.0

Con estos cambios la ecuación de transporte para el grupo g queda automáticamente balanceada, ya que los cambios introducidos implican la misma cantidad de remociones del grupo, sólo que transforma en absorción una desaparición por scattering.

Para el grupo g' ha desaparecido la fuente $\sigma_{g \rightarrow g'} \phi_g$ pero ha aparecido por otra parte la fuente de fisión $\chi_{g'} \sigma_g^{fis} \phi_g$, de magnitud igual a la anterior.

Por lo tanto los resultados calculados han de ser los mismos en ambos casos.

Para verificar este aserto se calculó un problema con fuente exterior (no requiere que el medio sea necesariamente multiplicativo), con dos conjuntos de datos, uno original y otro modificado en la forma antes expuesta, cuya característica se desarrollan a continuación.

2 - Cálculo verificadorio con fuente fija.-

El cálculo de prueba se realizó para una geometría tipo "slab" infinito, de 10.0 cm de espesor con el programa ANISN. Se definió un material, no real, de forma tal que se facilitara el control de los resultados obtenidos.

El siguiente cuadro consigna las constantes de grupo macoscópicas del material definido, destacándose que la aproximación sobre la dependencia angular del núcleo de dispersión ha sido fijada en P_0 , y la cantidad de grupos en tres.

Sección eficaz (cm^{-1})	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3
Absorción	0.7	0.7	0.1
$\nu \times$ fisión	0.0	0.0	0.0
total	2.0	3.0	0.6
Sent. del gr. 1 al	1.0	0.2	0.1
" " " 2 al	0.0	2.0	0.4
" " " 3 al	0.0	0.4	0.1

Otros datos:

Condiciones de contorno: negras

Cantidad de intervalos espaciales: 40 equiespaciados

Cuadratura: S_{11}

Fuente independiente fija: unitaria en el primer intervalo y primer grupo,
nula en toda otra especificación

Precisión requerida: 0,0001

A continuación se realizó un segundo cálculo aplicando lo expuesto en 1; con lo cual se modificaron algunos valores del conjunto de datos (los subrayados en la tabla) siendo los nuevos valores para ello:

Absorción grupo 1: 0.8

nu x fisión gr. 1: 0.1

Scat.del 1 al 3 : 0.0

Se introdujo además un espectro de fisión con 1.0 en el grupo 3 y ceros en los otros dos grupos.

Para comparar los resultados de ambos cálculos se hace el cociente entre los flujos obtenidos en el segundo sobre aquellos obtenidos en el primero, para cada grupo a intervalo, cuyo resultado es el siguiente:

Interv.	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3
1	1.00000	1.00000	0.99999
5	1.00001	0.99999	0.99998
10	1.00000	0.99995	0.99998
15	1.00000	0.99991	0.99997
20	0.99999	0.99994	0.99998
25	1.00000	1.00019	1.00002
30	1.00000	1.00077	1.00014
35	1.00000	1.00156	1.00030
40	1.00000	1.00190	1.00034

Como se ve, ambos cálculos coinciden dentro de la precisión requerida, para los grupos 1 y 3, salvo para intervalos muy alejados de la fuente, diferencia explicable debido al muy bajo valor de los flujos en esa zona frente al de los intervalos más cercanos a la fuente, haciendo que los dos test de convergencia se vean fuertemente influenciados por estos últimos antes que por aquellos.

Para el grupo 2, influenciado por los cambios después de doble scattering y seguramente más sensible que el grupo 3 a los cambios (comparar la transferencia del grupo 3 al 2 frente al selfscattering de 3), la situación es similar a la de los otros dos grupos, pero con la pérdida de aproximadamente un orden de magnitud en la precisión para intervalos alejados de la fuente.

3 - Cálculos de autovalores en sistemas reales.-

Con estos resultados se puede asegurar que en un problema real, si se elige un elemento de matriz convenientemente pequeño para realizar las modificaciones, la precisión final alcanzada estará próxima a la especificada, y será, seguramente, mejor que un orden de magnitud inferior a la misma.

Se debe calcular la constante de decaimiento temporal alfa para un recipiente de H₂O de 30x30x30 cm³.

Las fuentes de verificación de la bondad del cálculo son las siguientes:

a) Fórmula proveniente de la teoría de difusión

$$\alpha = - (\overline{\Sigma}_a + DB^2) v_0$$

Si los datos son extraídos de /3/ se obtiene el valor

$$\alpha = - (\overline{\Sigma}_a + \frac{B^2}{3 \overline{\Sigma}_r}) v_0 = - 5875 \text{ sec}^{-1}$$

b) Los resultados experimentales de Abbate /4/

$$\alpha = - 5880 \text{ sec}^{-1}$$

c) Un cálculo con el programa CAGE /5/ con constantes de grupo facilitadas por Lolich /6/. En este caso, el cálculo fue realizado con 30 grupos de energía, considerándose las dimensiones transversales finitas a través de un buckling de 0.0329 cm⁻² independiente de la energía y realizándose el análisis temporal en lapsos de 4.0 μsec.

El valor hallado para alfa resultó ser

$$\alpha = - 6344 \text{ seg}^{-1}$$

que, como se ve, está separado en un 10% de los consignados anteriormente, falla atribuible posiblemente al parámetro de fuga usado (se consideraron dimensiones reales y no las extrapoladas) y a algún desajuste en las constantes utilizadas.

Para el cálculo con DTF4, se reemplazó, en las constantes utilizadas para el cálculo ya efectuado con CAGE, la sección de transferencia del grupo 30 al grupo 1, cuyo valor 1.7613E-25 resultada despreciable frente a 1.2829E+00 de selfscattering del grupo 30. El espectro ficticio de fisión se fijó con 1.0 para el grupo 1.

El cálculo fue realizado en las aproximaciones S₆ y P₀ imponiendo un buckling transversal constante de 0.02193 cm⁻² en concordancia con el utilizado para el cálculo anteriormente efectuado con el programa CAGE. Las condi

ciones de contorno se fijaron negras a ambos lados, utilizando 60 intervalos espaciales uniformemente distribuidas en los 30 cm de cálculo, requiriéndose una precisión de cálculo de 0.001.

La constante de decaimiento hallada fue

$$\alpha = - 6277 \text{ seg}^{-1}$$

que, como puede verificarse resulta superior en sólo un 1% respecto de la en contrada con los mismos datos por medio del otro programa

Por otra parte, el espectro en la zona central (intervalo 30) fue nor malizado al valor 1.0 para el grupo 16, realizándose otro tanto con los espec tros calculados por CAGE a tiempos de 50.0, 98.0, 150.0, 198.0, 250.0 y 298.0 usec.

Los cocientes entre los valores correspondientes a CAGE y los del DTF4 (intervalo 30) en función del grupo de energía, se encuentran en la Tabla 1, consignándose en ella, también, el promedio de esta relación para todos los grupos.

Para comprobarse que las desviaciones standard de estos valores medios indicadoras de las discrepancias entre ambos cálculos, resultan respec tivamente 0.4%, 0.4%, 1.6%, 1.5% y 1.5%. Estos parámetros hablan a las claras de la la bondad del cálculo con DTF4, ya que con los parámetros de precisión utilizados y normalizaciones efectuadas, es de esperarse por lo menos un 0.4%.

CONCLUSIONES

Se han implementado una serie de opciones que mejoraron la capacidad de cálculo de la División Neutrones y Reactores.

Así las nuevas definiciones en las constantes multigrupos facilitarán el estudio y comparación de resultado en sistemas multiplicativos o no.

Por otro lado el método desarrollado para cálculos de autovalores en medios no multiplicativos permite realizar aquellos en sistemas de varias zonas, cosa que no era posible hasta el presente.

T A B L E 1

50 μ sec	98 μ sec	150 μ sec	198 μ sec	290 μ sec	298 μ sec
.9832	.9840	.9477	.9471	.9838	.9712
.9871	.9872	.9451	.9478	.9817	.9693
.9899	.9910	.9512	.9629	.9791	.9669
.9928	.9930	.9651	.9773	.9763	.9641
.9952	.9955	.9773	.9896	.9740	.9667
.9971	.9968	.9852	.9970	.9742	.9742
.9981	.9987	.9930	1.0048	.9822	.9829
.9990	.9994	.9974	1.0047	.9871	.9874
.9995	.9994	.9991	1.0041	.9889	.9892
1.0	.9994	1.0017	1.0036	.9909	.9909
1.0	1.0	1.0026	1.0028	.9933	.9933
1.0	.9994	1.0026	1.0019	.9949	.9948
1.0	1.0005	1.0026	1.0018	.9964	.9963
1.0	1.0006	1.0017	1.0009	.9979	.9981
1.0005	1.0	1.0009	1.0002	.9989	.9989
1.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
1.0	1.0	1.0	.9991	1.0007	1.0009
1.0	1.0	.9991	.9997	1.0024	1.0022
1.0	1.0	.9983	.9977	1.0042	1.0045
1.0005	1.0006	.9974	.9967	1.0073	1.0069
1.0005	1.0006	.9965	.9958	1.0095	1.0091
1.0005	1.0006	.9956	.9944	1.0119	1.0119
1.0005	1.0006	.9939	.9929	1.0145	1.0143
1.0	1.0	.9913	.9908	1.0175	1.0165
.9995	1.0	.9895	.9889	1.0197	1.0143
.9990	.9987	.9887	.9875	1.0209	1.0132
.9986	.9987	.9869	.9865	1.0220	1.0119
.9971	.9974	.9852	.9843	1.0224	1.0100
.9971	.9974	.9843	.9837	1.0215	1.0091
.9952	.9962	.9817	.9812	1.0189	1.0061
$\bar{x} = .9977$	$\bar{x} = .9979$.93905	.99084	.99977	.995503
$\sqrt{\sigma} = .0043$	$\sqrt{\sigma} = .0041$.0164	.01511	.01572	.01642

VI - REFERENCIAS

- /1/ - K.D. Lathrop, "DTF-IV, a FORTRAN-IV Program for solving the multigroup Transport Equation with Anisotropic Scattering", Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3373 (1965).
- /2/ - W.W. Engle, "A Users Manual for ANISN", Union Carbide Corporation Nuclear Division Report K-1693 (1967).
- /3/ - Reactor Physics Constants, ANL - 5800 Second Edition, (1963).
- /4/ - M.J. Abbate "Espectros de flujo angular de neutrones cerca de una interfase entre agua liviana y agua pesada" Tesis IB-UNC (1977).
- /5/ - M.J. Abbate - J.V. Lolich "NYR261 - CAGE 2, versión local del programa CAGE 2 GULF-RT-10195" ACNYR - CAB (1978).
- /6/ - J.L. Lolich "Constantes 1310016 para cálculo a 30 grupos", com. privada.
- /7/ - Velarde, et al. "J.E.N. 392, Madrid (1977).