

EXPERIENCIA EN LA PUESTA EN OPERACION DE PROGRAMAS DE CALCULO COMPLE-  
JOS DEFICIENTEMENTE DOCUMENTADOS

Héctor M. Antúnez -SeNID 782  
Adriana V. De Lorenzi -CNEA

C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº	AÑO
1	1984

INTRODUCCION

En una comunicación anterior (1) se subrayó la necesidad de una mejora sustancial en calidad, extensión y actualización del sistema de datos nucleares implementado localmente para cálculos neutrónicos. Asimismo, se discutió la implementación de esa mejora a través de ENDF/B (2) como archivo básico de datos nucleares evaluados; del sistema modular de programas de cálculo AMPX-II (3), que genera bibliotecas acopladas de secciones eficaces para neutrones y rayos gamma en grupos finos o gruesos de energía a partir de datos en formato ENDF; y de un conjunto de programas utilitarios.

En la tabla 1. se ha combinado información relativa a las características de ENDF y de las bibliotecas generadas, con esquemas abreviados de secuencias posibles para el cálculo de éstas últimas usando varios programas del sistema AMPX-II, y GIP de otro origen (4) (5). Téngase presente que NITAWL (acrónimo de Nordheim's Integral Treatment And Working Library production) organiza bibliotecas de trabajo a partir de cálculos de auto-blindaje en las resonancias efectuados, según varias opciones de complejidad y duración creciente, por:

- BONAMI, que usa el método de Bondarenko de factores de blindaje;
- el mismo NITAWL, que puede usar la aproximación de resonancia angosta, similar al método de Bondarenko, la de masa infinita o el tratamiento integral de Nordheim;
- o ROLAIDS, que calcula con una red densa de puntos de energía la distribución del flujo de moderación en cada zona de una geometría de varias regiones en una dimensión; y para ello usa la técnica de corrientes en las interfases con la ecuación integral de transporte.

En particular, la tabla 1. permite por un lado mostrar, a través de las opciones para el cálculo del autoblandaje en las resonancias, un ejemplo de la gran cantidad de decisiones que deben adoptarse en cada aplicación del sistema AMPX-II.

MODIFICACIONES EN XLACS-2 Y XLACS

Por otro lado, la tabla 1. ubica los programas XLACS-2 y XLACS, que comprenden aproximadamente 150 subrutinas cada uno. Durante la puesta en operación del sistema AMPX-II se encontraron errores de diversos orígenes en las bibliotecas maestras que estos programas generan al ejecutarse los problemas de prueba, en especial en las matrices para los diversos procesos de transferencia de neutrones de un grupo de energías a otro. Su diagnóstico no ha sido fácil por no estar publicada una descripción de los programas, que pueden calificarse de complejos. Más todavía, ha sido fortuito el que se encontraran los errores de esas matrices porque los autores proveen los problemas de prueba usando la opción para no imprimirlas, a pesar de que su cálculo insume más de la mitad del tiempo total de ejecución.

La primera etapa de los procedimientos necesarios para evitar esos errores ha originado un informe (6) que mereció el acuerdo de los autores de ambos programas e incluye los comentarios resultantes de su revisión.

Tabla 1. ENDF Y BIBLIOTECAS MAESTRA Y DE TRABAJO. CARACTERISTICAS Y SECUENCIAS DE CALCULO

	Composición	Grupos	Resonancias	Matrices	Contenido	Tipos espec.
ENDF	Independiente	Puntos	Parámetros	Algunos procesos	Amplio	
Biblioteca maestra	Pseudo-independiente (w)	Finos	Parámetros y por grupos	Para cada proceso	Neutrones Fotones Acopladas	
Biblioteca de trabajo	Dependiente	Finos o gruesos	Por grupos (w)	De transferencia (w)	Acopladas	De trabajo
<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block;"> <p>Clave:</p> <p style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">PROGRAMA</p>  <p style="border: 1px solid black; padding: 2px 10px; display: inline-block;">Biblioteca</p> </div>						<p>Ordenadas por grupos</p> <p style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">ICE-2</p> <p>Macroscópicas</p> <p style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px 10px; display: inline-block;">XSDRNP</p> <p>Pesadas espacialmente</p>

Una apreciable proporción de las modificaciones fue necesaria para poner en operación los programas en un sistema de computación IBM distinto, con un compilador FORTRAN IV G en lugar del H para el que AMPX-11 ha sido preparado. Debido a la complejidad de ambos programas esos cambios trajeron más dificultades que las que se esperan normalmente. Cada modificación fue introducida después de un cuidadoso estudio, y concebida para aumentar la compatibilidad del programa, debido al uso de AMPX-11 en numerosos laboratorios.

Los ejemplos de los primeros ajustes que hubieron de hacerse van desde aumentar el número de argumentos de un CALL que era menor que el de la subrutina, hasta eliminar sentencias remanentes de una opción para editar bibliotecas de datos que fue suprimida por los autores de XLACS-2 (las terminaciones prematuras que ocurrían antes de este último cambio se debían a que nuestro sistema no pone en cero cada nueva variable que se define).

Sobre esta base se dedicó creciente atención al análisis de los resultados del cálculo. Merece referirse entre otras cosas, que se observó contra lo que debía esperarse- que eran nulos los elementos (1,1) de las matrices de dispersión elástica (MT=2) e inelástica con excitación a nivel discreto (MT=51 a 90). Se encontró que ello se debía al uso, que está prohibido (7), de la variable I del D0 de la función MACK luego de completarse el D0. Con el compilador H, al cual estaba ajustada MACK, es  $I = N+1$ ; con el G,  $I = N$  (el valor de prueba del D0). Sobre la base del valor de I se determina a qué grupos se pueden transferir los neutrones que son dispersados. Este error se erradicó ajustándose a las normas de FORTRAN y asignando  $I = N+1$  inmediatamente después del fin del D0.

Hay otro error que se manifiesta en los valores de las contribuciones de resonancia a la dispersión en los grupos de la región de resonancias resueltas en la salida de NITAWL. Para confirmar la confiabilidad de los valores obtenidos con FORTRAN IV H por los autores de NITAWL se recalculó con BONAMI usando la biblioteca maestra VITAMIN-C (5), con resultados aparentemente negativos. Esto llevó a poner en operación ROLAIDS, calcular separadamente la fuente de moderación para el problema de prueba, y recalcular también con este programa. Los resultados llevan netamente a presumir que el error - que podría ser similar al de MACK- está en la citada ejecución de NITAWL compilado con FORTRAN IV H, y no en la nuestra con FORTRAN IV G. La investigación tendiente a aclarar este problema no ha llegado todavía a resultados concluyentes. Ver tabla 2.

#### INSUFICIENCIA DE LA SIMPLE PRECISION

En particular en XLACS-2 se han observado diversos casos en que la simple precisión del FORTRAN IV en IBM/370 para las variables reales (máximo 7,2 dígitos) es insuficiente. Corresponden a modificaciones recientes que aceleran apreciablemente la ejecución (8), y resultan en valores groseramente distorsionados:

- de intervalos de integración en energía en el cálculo de matrices de dispersión de neutrones, y
- de integrales sobre el ángulo sólido obtenidas usando la cuadratura de Lobatto.

En ambos tipos de situaciones, un esquema de cálculo complejo y que, al no haberse escrito un informe que describa el programa, no puede analizarse sino en un listado en FORTRAN, contiene una o varias veces la resta de números similares. Y esto se agrava porque la tabla de abscisas y coeficientes de peso de la cuadratura viene dada con seis cifras solamente. Ver tabla 3.

Tabla 2. RES SCAT = CONTRIBUCIONES DE RESONANCIA A LA DISPERSION

E(eV)	Laboratorio: ORNI,		CNEA - Rc - CA			E(eV)
	Programa:	NITAWL		ROLAIDS	BONAMI	
	Grupo	FORTRAN H	FORTRAN G			
82 ---	10	.262	.262	.489	.177	101.3
30 ---	11	.299	.254	.218	.201	29.023
10 --	12	-.160	-.220	-.273	-.297	10.677
3.05 -	13	.139	-.057	-.070	-.096	3.059
1.77 -	14	.503	.079	.068	.145	1.8554
1.3 -	15	.649	.215	.175	.017	1.445
1.13 -	16	.035	-.198	-.189	-.212	1.1254
1 -	Notas:	SP7	18/5 19/6	desde 100 eV	VITAMIN- C	0.8764

Tabla 3. INSUFICIENCIA DE LA SIMPLE PRECISION EN XLACS-2

Casos del problema de prueba SP3

Por diferencia de dos números similares	Por suma de un número pequeño a uno grande	Para cálculo de X5 por cuadratura
$0^{16}$ ; MT=58; M=4; 1→15	$0^{16}$ ; MT=59; M=4	$U^{235}$ ; MT=2; P3; 14→14
RR=A + A6 =	AA=1.2+XX	- .0523915
=A4* AA*(A5-AA*DD) +A6	E2I= K*AA+EPS=	- .740336
	$= (A8*AA-A7+RSGN*\sqrt{A4* AA* (A5-AA*DD)+A6})/PI$	- .111355
SP (simple precisión):		.204714
A6= 36062464.0		1.34114
A = -35767756.33		1.30524
RR= 294707.67		.200524
	$10^7 > E2 > 10^{-5}$	- .201131
	QQ = 10302344.	-1.38507
DP (doble precisión):		- .216593
A6= 36063448.75		.118275
A = -36039533.09		.795430
RR= 23915.66		.0565322
		X5 = -2.13 E-05 (Σ)
		X5 = -5.53206 E-06 (SP)
		X5 = 1.04979 E-05 (DP)

Tabla 4. AUTODBL=AUTOMATIC PRECISION INCREASE FACILITY

- 1) PROMOCION: Convierte cálculos en punto flotante SP→DP; DP→EP. Convierte constantes, variables y funciones, reales y complejas (lógicas y enteras no afectadas).
  - 2) PADDING(RELLENO): Duplica el espacio de almacenamiento de ítems no promovidos que lo comparten con otros promovidos (ej: por EQUIVALENCE).
  - 3) ALINEACION: de espacios de almacenamiento.
- Alcance de la Promoción, Padding y Alineación controlado por subparámetros de AUTODBL.

Se dió un primer paso para corregir estos aspectos completando a diez cifras esa tabla, e identificando y declarando de doble precisión una veintena de variables y funciones básicas en cinco subrutinas, que comprobadamente afectaban los resultados. Pero subsistieron errores que requerían ampliar en varias áreas, incluso el cálculo de variables a partir de datos de entrada, el uso de la doble precisión. Como la reprogramación de la integración sobre el ángulo sólido implicaba (con alto riesgo de cometer errores) modificar el vector maestro de dimensión ajustable del programa, que abarca unas 60 variables, y realinear un COMMON de casi 200, se decidió emplear la opción AUTODBL (Tabla 4.) (9) del compilador FORTRAN IV H que fue obtenido recientemente. Ya se han superado varias dificultades en esta tarea, debidas a la existencia en XLACS-2 de inconsistencias en la programación en cuanto al tipo de las variables (enteras o reales) y a su asociación con datos literales, y se van concretando mejoras apreciables en los resultados.

Finalmente, no debe dejar de mencionarse que la recompilación en FORTRAN IV H requirió un especial esfuerzo porque no había experiencia con ese compilador, porque no tiene como el G la opción DEBUG (7) y porque IBM proveyó en primera instancia una versión antigua con numerosas limitaciones. En el proceso se confirmó que numerosas de las dificultades con que se tropezó en etapas anteriores se debían al uso del compilador G, en programas preparados para el H.

#### RECONOCIMIENTO

Este trabajo no hubiera sido una realidad sin el valioso apoyo inicial de T.C. de Schilman, E. Pepe, E.R. Pezzoni y J.E. Volkis. Se agradecen especialmente las útiles sugerencias de H. Schilman.

#### REFERENCIAS

- 1.- H.M. Antúnez, "Hacia una capacitación para evaluar conceptos nuevos de re-actores", AATN, IX Reunión Científica (1980).
- 2.- R. Kinsey, rev., "ENDF-102, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File", BNL-NCS-50496, 2nd Edition (ENDF/B-V) (Oct. 1979).
- 3.- "AMPX-II, Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma-Ray Cross-Section Libraries from Data in ENDF Format", PSR-63, RSIC, ORNL (1978).
- 4.- "AXMIX, ANISN Cross Section Code", PSR-75, RSIC, ORNL (1976).
- 5.- "VITAMIN-C, 171 Neutron, 36 Gamma-Ray Group Cross Sections in AMPX and CCCC Interface Formats for Fusion and LMFBR Neutronics", DLC-41, RSIC, ORNL (1978).
- 6.- H.M. Antúnez, T.C. de Schilman, A. De Lorenzi, E. Pepe, E.R. Pezzoni y J.E. Volkis, "1980 CNEA Adjustments to XLACS-2 and XLACS", CNEA-Re-CA 81-3 (Feb. 1981).
- 7.- "IBM System/360 and System/370 FORTRAN IV Language", GC28-6515-10, 11th Edition, IBM Corporation (May. 1974).
- 8.- N.M. Greene, comunicación privada, 11 Mar. 1981.
- 9.- "IBM System/360 OS FORTRAN IV (H Extended) Compiler Programmer 's Guide", SC28-6852-0, 1st Edition. IBM Corporation.