

Informe de registro	
id	23-Biblioteca-Bibliografia
Tipo	Tesina
Titulo	Desarrollo de un programa para el cálculo de secciones eficaces para centrales nucleares tipo Atucha, en los formatos requeridos por el código de reactor puma, a a partir del código de celda Wims
Autor	Romero Luis Dario
Ubicacion	IDB-CAC
Editorial	IDB
Ano	07-2009
ISBN	0
Observaciones	Director: Ing. Grant Carlos// Ing. Tarazaga Ariel El objetivo es servir de nexo entre ambos programas, WIMS (4) Y PUMA, particularmente para reactores de tipo Atucha, y facilitar así ampliamente el trabajo del usuario, al tiempo que se colabora en la uniformidad de las condiciones de cálculo de los distintos usuarios. El programa pretende ser una herramienta versátil y compacta que permita obtener cualquiera de los dos formatos de secciones eficaces o derivadas requeridos por PUMA. ESPECIALIZACIÓN EN REACTORES Y CICLO DE COMBUSTIBLE NUCLEAR

“DESARROLLO DE UN PROGRAMA PARA EL CÁLCULO DE SECCIONES EFICACES PARA CENTRALES NUCLEARES TIPO ATUCHA, EN LOS FORMATOS REQUERIDOS POR EL CÓDIGO DE REACTOR PUMA, A PARTIR DEL CÓDIGO DE CELDA WIMS”

ESPECIALIZACIÓN EN REACTORES NUCLEARES Y SU CICLO DE COMBUSTIBLE

Alumno: Ing. Luis Darío Romero
Director de Trabajo Final: Ing. Carlos Grant
Ing. Ariel E. Tarazaga



UNSAM
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE
SAN MARTÍN

“DESARROLLO DE UN PROGRAMA PARA EL CÁLCULO DE SECCIONES EFICACES PARA CENTRALES NUCLEARES TIPO ATUCHA, EN LOS FORMATOS REQUERIDOS POR EL CÓDIGO DE REACTOR PUMA, A PARTIR DEL CÓDIGO DE CELDA WIMS”

Trabajo final presentado para optar al título de
“Especialista en Reactores Nucleares y su Ciclo de Combustible”

Alumno: Ing. Luis Darío Romero
Director de Trabajo Final: Ing. Carlos Grant
Ing. Ariel E. Tarazaga

Abril - 2009

Agradecimiento

Deseo agradecer por todo el apoyo que me han brindado a:

Mis directores de tesina: Ing. Carlos Grant e Ing. Ariel E. Tarazaga.

La decana Lic. Carla Notari, la Dra. Ana María Lerner, el Prof. Adrián Daoud y todo el personal y el plantel docente del Instituto de Tecnología Nuclear Dan Beninson.

A los compañeros con quienes cursé esta especialización.

Asimismo deseo expresar mi agradecimiento:

A la CNEA por brindarme la posibilidad de realizar esta especialización, en especial al Gerente de Área de Energía Nuclear Ing. Eduardo Porro y a la Mgr. Lucía Ramilo.

Al Ing. Abelardo Yunes, al Lic. Oscar Serra, del Centro Atómico Bariloche, por la transferencia de información y asistencia técnica, y al Lic. José Fink de NASA.

RESUMEN

El código de reactor PUMA [1] admite actualmente como entrada de secciones eficaces dos formatos completamente diferentes.

Uno es el formato clásico utilizado como única opción hasta las versiones previas a la 5.00 de PUMA, correspondiente a los valores de las derivadas de las secciones eficaces con respecto a los parámetros globales del reactor (temperaturas, densidades, concentraciones de Xenón y Boro, etc.), dados ciertos valores de referencia en cada parámetro [2]. Dadas estas derivadas (discretas) PUMA calcula el valor de las secciones eficaces para cualquier conjunto de valores de los parámetros, recurriendo a una aproximación lineal de la variación de las secciones eficaces con todos y cada uno de los parámetros.

El otro formato es el que incorpora la versión 5.00 de PUMA, en donde para cada valor de quemado existen varios conjuntos previamente calculados de secciones eficaces, y en donde cada uno de estos conjuntos corresponde a diferentes combinaciones de valores de los parámetros globales del reactor [3].

La confección de tablas de secciones eficaces en cualquiera de los dos formatos es tarea tediosa y complicada de realizar sin recurrir a una sistematización por medio de programas auxiliares; y aún disponiendo de programas auxiliares, configura las etapas previas a los cálculos de reactor que requieren de mucho tiempo. Normalmente cada usuario de una cadena de cálculo tal como WIMS-PUMA desarrolla previamente sus propios programas auxiliares, pero esto muchas veces da lugar a que existan diferencias de cálculo entre diferentes usuarios de dicha cadena.

El objeto principal del programa que aquí se desarrolla, es servir de nexo entre ambos programas, WIMS [4] y PUMA, particularmente para reactores de tipo Atucha, y facilitar así ampliamente el trabajo del usuario, al tiempo que se colabora en la uniformidad de las condiciones de cálculo de los distintos usuarios. El programa pretende ser una herramienta versátil y compacta que permita obtener cualquiera de los dos formatos de secciones eficaces o derivadas requeridos por PUMA.

Índice

CAPITULO 1	5
1. DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA	5
1.1. Introducción	5
1.2. Antecedentes	5
1.3. Objetivo	6
1.4. Propuesta	6
1.5. Alcance	6
CAPÍTULO 2	8
2. DESCRIPCIÓN DE LOS MÉTODOS PARA EL TRATAMIENTO DE SECCIONES EFICACES EN PUMA Y SU OBTENCIÓN A PARTIR DE WIMS	8
2.1. Introducción	8
2.2. Generación de perturbaciones alrededor de un caso nominal en WIMS	8
2.3. Método de las derivadas parciales	9
2.3.1. Bloque de parámetros termohidráulicos	9
2.3.2. Bloque de Xenón y secciones eficaces	11
2.3.2.1. Derivadas de las secciones eficaces macroscópicas con respecto al Xenón	11
2.3.2.2. Cálculo de los rendimientos efectivos por fisión del Iodo y del Xenón	13
2.3.2.3. Sección eficaz microscópica efectiva del Xenón	14
2.4. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada (TMPE)	14
2.4.1. Consideración con respecto a la concentración de Xenón	16
2.4.2. Extracción de secciones eficaces	17
CAPÍTULO 3	19
3. DESCRIPCIÓN DEL FUNCIONAMIENTO DEL PROGRAMA	19
3.1. Introducción	19
3.2. Descripción	19
3.3. Funcionamiento	19
3.3.1. Elección del método de cálculo	19
3.3.2. Ingreso del directorio de trabajo, ubicación y nombre del ejecutable de WIMS, y entrada del caso nominal	20
3.3.3. Ingreso de valores para la tarjeta <i>POWER</i> de WIMS	21
3.4. Archivos de entrada	23
3.4.1. Entrada principal de WIMS	23
3.4.2. Método de las derivadas parciales	25
3.4.3. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada	27
3.5. Archivos de salida	30
3.5.1. Método de las derivadas parciales	30
3.5.1.1. Archivos de salidas auxiliares	30
3.5.1.2. Archivo de salida <i>DerSecEfec.txt</i>	32
3.5.2. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada	34
3.5.2.1. Archivos de salidas auxiliares	34
3.5.2.2. Archivo de salida <i>XSMultientrada.txt</i>	34
3.6. Descripción del procedimiento de cálculo según el método elegido para el tratamiento de secciones eficaces en PUMA	36
3.6.1. Método de las derivadas parciales	38
3.6.2. Método de la Tabla de Múltiples Parámetros de Entrada	39
CAPÍTULO 4	41
4. Resultados	41
4.1. Introducción	41
4.2. Casos propuestos para la verificación	41
CONCLUSIONES	46
REFERENCIAS	47

CAPITULO 1

1. DESCRIPCION DEL PROBLEMA

1.1. Introducción

Para obtener las secciones eficaces que caracterizan a un reactor en las diferentes condiciones de funcionamiento en que se lo quiere estudiar, se utiliza una cadena de cálculo formada por un código de celda y un código de reactor, cada uno cumpliendo diferentes funciones.

El código de celda WIMS se encarga de preprocesar datos básicos evaluados y contenidos en bibliotecas de secciones eficaces muy detalladas en términos de energía e isótopos, para hacer una reducción del número de grupos de energía y lograr finalmente una primera aproximación y adaptación de estos datos al problema particular que se está tratando (geometría, materiales, temperaturas, etc.). A continuación, reduciendo los datos del paso anterior a una cantidad que permita realizar los cálculos finales de núcleo, calcula con todo el detalle geométrico posible la distribución espacial y energética del flujo en la celda, tratando de tener en cuenta los efectos del medio que la circunda, así como la dependencia de las secciones eficaces del quemado. De esos cálculos de celda surge información importante no solo para los posteriores cálculos de núcleo, sino para el diseño de los elementos combustibles y del reactor, y para conocer el comportamiento de los elementos combustibles y otros dispositivos desde el punto de vista de la interacción de los materiales con neutrones.

El segundo paso en esta cadena de cálculo consiste en la utilización de un código de reactor. En el presente trabajo se hará uso del código PUMA. Este código permite la modelización tridimensional de un reactor usando difusión multigrupo, en geometría X-Y-Z (cartesiana), R- ϕ -Z (cilíndrica) o triangular-Z. Permite la simulación del funcionamiento de reactores de cualquier tipo, en tanto se pueda aplicar la teoría de difusión multigrupo, en cálculos para la gestión de combustible, ciclos de potencia, transitorios largos o cortos en general. En la práctica el uso de ambos tipos de códigos requiere compatibilizar datos, ya que la información a extraer de uno para incorporar en el otro no está dada en un mismo formato. Además debe tenerse en cuenta que al momento de hacer cálculos se ha de manipular un gran volumen de datos. Por todo ello resulta importante contar con una interfase que permita articular la operación de ambos códigos y que a su vez economice el tiempo de los cálculos.

En este capítulo se describen los antecedentes en el uso de la cadena de cálculo WIMS-PUMA, el objetivo, la propuesta y el alcance del presente trabajo.

1.2. Antecedentes

La cadena de cálculo WIMS-PUMA ha sido utilizada en proyectos nacionales importantes tales como Atucha I y Atucha II.

La continua utilización de ésta cadena hace necesaria la utilización de programas auxiliares que faciliten y economicen el tiempo para realizar mayor número de cálculos y, poder obtener mejores conclusiones.

1.3. Objetivo

Desarrollar un programa para el cálculo de las secciones eficaces y derivadas de las mismas en los formatos requeridos por el código de reactor PUMA, a partir del código de celda WIMS. La salida de este programa será un bloque de derivadas de secciones eficaces con respecto a los parámetros del reactor en caso de requerirse el formato clásico de PUMA, o una tabla de múltiples parámetros de entrada (en adelante "TMPE") en caso de requerirse este último formato.

1.4. Propuesta

Con el fin de facilitar el procesamiento de los cálculos de celda y la posterior confección de la entrada adecuada de secciones eficaces o derivadas de las mismas para el código de reactor PUMA, se propone en el presente trabajo el desarrollo de un programa utilitario escrito en FORTRAN 90, que permita realizar todos los procedimientos necesarios para obtener las tablas adecuadas, constituyéndose así en una herramienta indispensable para la optimización del cálculo, en cuanto al ahorro de tiempo de cálculo y la ganancia en legibilidad y estandarización de los cálculos de celda en la cadena WIMS-PUMA.

1.5. Alcance

El presente trabajo se aboca al desarrollo de un programa que, manipulando una gran cantidad de archivos de entrada del código de celda WIMS, y ejecutando éste último con dichas entradas, obtiene las secciones eficaces y sus derivadas correspondientes a la celda representativa del reactor. Luego, según el método para el tratamiento de secciones eficaces que se adopte en PUMA para el cálculo de reactor, este programa extrae las secciones eficaces y sus derivadas de las salidas del código WIMS y las ordena, transcribiendo la información a un formato tal que pueda ser interpretado por PUMA según el método elegido. La versión de WIMS para la cual se desarrolla el programa es la incluida en la versión 3.0 del macro-programa MTR_PC.

Los parámetros que se podrán involucrar en los cálculos son los siguientes: temperatura de combustible, temperatura y densidad de refrigerante, temperatura y densidad de moderador, concentraciones de Xenón (Xe) y de Boro (B). Queda a cargo del usuario el rango de valores de estos parámetros que deseará utilizar para los cálculos de las secciones eficaces.

El programa supone que WIMS utiliza la biblioteca de datos neutrónicos WIMSD-IAEA 69 grupos, wlp. Una posible ampliación a futuro consistiría en hacer las modificaciones necesarias al programa para que el usuario pueda elegir deliberadamente una biblioteca de datos que se ajuste mejor a sus requerimientos y criterios.

Originalmente surgió la idea de lograr un programa capaz de aplicarse a cualquier tipo de reactor. Pero debido a la gran cantidad de variables a tener en cuenta y la gran cantidad de detalles que describen distintamente a cada reactor, se observó que ello no era posible dentro del lapso de tiempo disponible para el desarrollo del programa. Se ha trabajado entonces de un modo más específico haciendo uso de la experiencia adquirida en aplicaciones de esta naturaleza en los reactores Argentinos Atucha I y Atucha II, y de algunos procedimientos optimizados para dichos reactores en WIMS. El programa se ha desarrollado para reactores que en términos generales, utilizan agua pesada como

refrigerante y moderador, uranio natural como combustible, y donde los elementos combustibles son de geometría primordialmente cilíndrica con una representación en simetría uno. No obstante estas limitaciones necesarias, queda formada la base para lograr esa "estandarización" en datos y en procedimientos de la que se hizo mención al comienzo para cálculos WIMS-PUMA en Atucha I y Atucha II, y para las subsiguientes ampliaciones al programa en adaptaciones a casos cada vez más generales de reactor.

CAPÍTULO 2

2. DESCRIPCIÓN DE LOS MÉTODOS PARA EL TRATAMIENTO DE SECCIONES EFICACES EN PUMA Y SU OBTENCIÓN A PARTIR DE WIMS

2.1. Introducción

En este capítulo se describirán los distintos métodos para el tratamiento de secciones eficaces en PUMA por los cuales el usuario puede optar para realizar sus cálculos, como así también, las consideraciones que se hacen para el cálculo de las secciones eficaces y sus derivadas en cada caso. Se debe tener en cuenta que las aproximaciones se realizan con el fin de simplificar el análisis y economizar los tiempos de cálculo, procurando que, de acuerdo al criterio del usuario que entiende sobre el asunto, ello no signifique un detrimento relevante en los resultados obtenidos.

La utilización del método de las derivadas en PUMA (Sección 2.3) supondrá que las secciones eficaces y los coeficientes de difusión dependen linealmente, dentro de los rangos determinados por el usuario, de los parámetros globales del reactor, esto es, de los parámetros termohidráulicos, la temperatura del combustible y las concentraciones de B y de Xe según se mencionan en la Sección 1.5; y se supone además que todos los parámetros están mutuamente desacoplados en sus variaciones respectivas. Éste método estará disponible para cualquier versión de PUMA. En cambio, para la utilización del método TMPE en PUMA (Sección 2.4) éste programa calculará secciones eficaces correspondientes a nodos constituidos por valores de los parámetros globales del reactor elegidos por el usuario. A partir de las secciones eficaces "nodales" PUMA calculará por interpolación cuadrática en el quemado y lineal en el resto de los parámetros, el valor de las secciones eficaces inter-nodos. La gran diferencia y a la vez ventaja de este último método con respecto al de las derivadas, es que los nodos pueden recorrer un espacio multidimensional en cuanto a los parámetros globales, con todo el grado de detalle que se necesite, y en donde cada nodo puede estar constituido por valores de los parámetros que pueden corresponder a situaciones transitorias de un reactor, es decir, donde los parámetros globales pueden estar completamente no correlacionados a priori. Éste método se puede utilizar a partir de la versión de PUMA 5.00.

Cabe recordar que aún cuando se utilice el método de la *TMPE*, PUMA requerirá también del uso de las tablas de derivadas. Siendo este caso, el programa también realiza el cálculo de las derivadas cuando se opta por el método de la *TMPE*.

2.2. Generación de perturbaciones alrededor de un caso nominal en WIMS

Al comenzar el proceso del cálculo de las secciones eficaces a nivel de la celda, se toma como caso base o de referencia, el caso nominal con la descripción completa de la celda. Esto es, con los parámetros habituales para el reactor funcionando en condiciones nominales. Ello puede implicar plena potencia o un valor menor de la misma, pero en cualquier caso el reactor se encuentra funcionando en forma estable en el tiempo. Sobre este caso nominal se procede a efectuar en WIMS la evolución en el quemado, según los valores elegidos por el usuario. Ello da en primera instancia la dependencia de las secciones eficaces del quemado. Pero hasta aquí los parámetros globales han sido los del funcionamiento nominal del reactor. Para obtener las secciones eficaces de cada caso en particular, la incidencia de los diferentes valores de los parámetros globales es

incorporada por medio de “perturbaciones” alrededor del caso nominal, es decir, variando los diferentes parámetros en la entrada WIMS de cada quemado en la evolución del caso nominal.

En mayor detalle: Para comenzar el cálculo se utilizan dos valores de *buckling* genéricos (radial y axial). Posteriormente, para cada quemado siempre dentro del caso nominal, se buscan los valores de *buckling* que hagan crítica la celda (valor de k_{ef} igual a 1 con una tolerancia de 10 pcm en reactividad). Esto se lleva a cabo mediante iteraciones en WIMS, formando en cada iteración una nueva entrada para un mismo quemado, a partir de los valores de *buckling* de la entrada inmediata anterior, hasta llegar a la convergencia. El proceso se repite para todos los valores de quemado. De este modo la dependencia de las secciones eficaces del quemado estará fundamentalmente determinada por la evolución del quemado del caso nominal. La evolución del quemado se va almacenando a través de las concentraciones isotópicas de cada material en las sucesivas entradas de WIMS de cada quemado.

Luego de alcanzada la convergencia del k_{ef} para todos los valores de quemado en el caso nominal, se comienzan a generar los casos particulares por medio de perturbaciones alrededor del caso nominal, es decir, se comienzan a variar los valores de los parámetros, de acuerdo a los datos ingresados por el usuario en las entradas de WIMS (concentración de Xe, temperatura del combustible, parámetros termohidráulicos, concentración de B). En cada caso nuevamente se buscan los valores de *buckling* que hagan crítica la celda, tal como se describió en el proceso nominal. De esta manera se obtienen las secciones eficaces correspondientes a cada caso particular.

2.3. Método de las derivadas parciales

2.3.1. Bloque de parámetros termohidráulicos

El cálculo con reacoplamiento termohidráulico en PUMA, contempla el uso de las derivadas de las secciones eficaces a dos grupos de energía, con respecto a las temperaturas y densidades de los diferentes materiales (por ejemplo temperatura del combustible, temperatura y densidad del refrigerante, entre otras). Estas derivadas se calculan como la derivada media en un determinado intervalo en el que se prevé fluctuará la variable durante la operación normal del reactor. Dentro de estos intervalos, se asume que las derivadas se mantienen aproximadamente constantes y son prácticamente independientes de la variación de las otras variables; es decir, se supone que las secciones eficaces dependen linealmente de estos parámetros, y además que los parámetros son independientes los unos de los otros, de modo que las derivadas parciales de las secciones eficaces con respecto a cada parámetro, coinciden con las derivadas totales respecto a los mismos parámetros. Esto supone implícitamente, que el usuario sabe de antemano que es una aproximación aceptable desde el punto de vista físico. De esta manera la dependencia de las secciones eficaces sobre cada variable o parámetro puede analizarse por separado y por medio de una aproximación lineal. La forma en que se calculan las derivadas se muestra en la ecuación (1).

$$\left. \frac{\partial \Sigma}{\partial T} \right|_{(T^-, T^+)} \equiv \frac{\Sigma|_{T^+} - \Sigma|_{T^-}}{T^+ - T^-} ; T^+ \equiv T^0 + \Delta T ; T^- \equiv T^0 - \Delta T \therefore T^+ - T^- = 2\Delta T \quad (1)$$

donde T es la variable (en este caso T es el símbolo que corresponde a la variable tal como la temperatura del combustible, temperatura y densidad del refrigerante, temperatura y densidad del moderador), Σ representa genéricamente una sección eficaz macroscópica y los superíndices "+", "-" y "0" indican respectivamente si el valor de T se encuentra un ΔT por encima, un ΔT por debajo, o si coincide con el valor central elegido como referencia de la variable en cuestión. La elección de estos valores recae en las características particulares del reactor en estudio y en lo que de este quiera conocerse por medio de cálculos de reactor, y en última instancia recae en la experiencia del calculista.

Según la ecuación (1) la derivada puede calcularse a partir del cociente entre la diferencia en las secciones eficaces obtenidas modificando el valor del parámetro T hacia valores superiores e inferiores del valor central, y la diferencia entre los respectivos valores extremos de T .

La estructura del bloque de derivadas de las secciones eficaces a 2 grupos de energía que deberá ingresarse en PUMA, se detalla en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia. 1.**

$\left. \frac{\partial \Sigma_r^1}{\partial T} \right _{T^0}$ (Transporte grupo 1)	$\left. \frac{\partial \Sigma_r^2}{\partial T} \right _{T^0}$ (Transporte grupo 2)
$\left. \frac{\partial \Sigma_a^1}{\partial T} \right _{T^0}$ (Absorción grupo 1)	$\left. \frac{\partial \Sigma_s^{1 \rightarrow 2}}{\partial T} \right _{T^0}$ (Downscattering)
$\left. \frac{\partial \Sigma_s^{2 \rightarrow 1}}{\partial T} \right _{T^0}$ (Upscattering)	$\left. \frac{\partial \Sigma_a^2}{\partial T} \right _{T^0}$ (Absorción grupo 2)
$\left. \frac{\partial \nu \Sigma_f^1}{\partial T} \right _{T^0}$ (Nu * fisión grupo 1)	$\left. \frac{\partial \nu \Sigma_f^2}{\partial T} \right _{T^0}$ (Nu * fisión grupo 2)
$\left. \frac{\partial \Sigma_f^1}{\partial T} \right _{T^0}$ (Fisión grupo 1)	$\left. \frac{\partial \Sigma_f^2}{\partial T} \right _{T^0}$ (Fisión grupo 1)

Tabla 1. Estructura del bloque de derivadas de las secciones eficaces para PUMA.

Para hallar las constantes especificadas en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia. 1** y de acuerdo a la ecuación (1), es necesario realizar primero un cálculo de celda modificando las variables elegidas en cada paso de quemado, a partir de la evolución del quemado del caso nominal (ver Sección 2.2); estos valores de secciones eficaces corresponden así a los bordes de cada intervalo $[T^0 - \Delta T, T^0 + \Delta T]$ alrededor de T . Luego se aplica la ecuación (1) para obtener el bloque de derivadas detallado en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia. 1** para cada una de las variables representadas por T . La sección eficaz de transporte Σ_r , se aproxima a partir del coeficiente de difusión, según la ecuación (2).

$$\Sigma_{r_g} = \frac{1}{3D_g} \quad (2)$$

Los valores necesarios para el cálculo de las derivadas de acuerdo a la ecuación (1) y a la Tabla 1, se extraen una vez que se generaron los distintos casos, como se detalla a continuación:

Las diez secciones eficaces necesarias, tanto para $\Sigma|_{T^+}$ como para $\Sigma|_{T^-}$ (como se explicó anteriormente en la ecuación (1)) para el cálculo de las derivadas, se extraen de los archivos auxiliares generados por WIMS (ver Sección 3.5). En la Sección 2.4.2 se encuentra detallado en qué cadena y en qué orden se encuentran estos valores, y se muestra además la ecuación (19) que se utiliza para el cálculo de las secciones eficaces de fisión.

El cálculo del valor $T^+ - T^- = 2\Delta T$ requerido por la ecuación (1), es simplemente dos veces la cantidad ΔT (apartamiento alrededor de los valores centrales para cada parámetro T) ingresada por el usuario en el archivo *Derivada.txt* (ver Sección 3.4.2); el programa conoce así el valor $2\Delta T$.

Por último, las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la concentración de B, en caso de ser requeridas, reciben el mismo tratamiento que los parámetros termohidráulicos, siguiendo la ecuación (1) en la definición de las derivadas propiamente dichas, y con un intervalo y valor central que dependerá del caso particular en estudio, y cuyo establecimiento, como en los casos anteriores, recae en la experiencia del calculista y del caso en estudio. La dependencia sobre la concentración de Xe, ligada a la presencia de Iodo, recibe diferente tratamiento y por ello se expone en mayor detalle en la Sección 2.3.2.

2.3.2. Bloque de Xenón y secciones eficaces

Para los cálculos con reacoplamiento el tratamiento de la concentración de Xe puede dividirse en tres instancias:

- Las derivadas de las secciones eficaces macroscópicas.
- El cálculo de los rendimientos efectivos por fisión del Iodo y el Xe.
- La sección eficaz microscópica efectiva del Xe para cada grupo de energía.

2.3.2.1. Derivadas de las secciones eficaces macroscópicas con respecto al Xenón

Se realiza un primer cálculo de celda con una evolución a potencia efectiva del reactor. Esta potencia efectiva corresponde al segundo elemento a ingresar en la tarjeta *POWER* de WIMS [ver referencia 4], y en pocas palabras corresponde a un promedio pesado con el flujo del reactor, partiendo de la potencia total del mismo. En este cálculo la concentración de todos los isótopos para cada material quemable en cada instancia de quemado, depende de la historia de potencia seguida hasta aquí. Surge así, para cada valor de quemado, un conjunto de secciones eficaces a dos grupos correspondientes al

valor de Xenón en equilibrio. Luego se realiza una segunda serie de cálculos sin evolución temporal. En esta instancia de cálculo, para cada valor de quemado, se incluyen como materiales del combustible los isótopos y las concentraciones correspondientes que resultan, para este quemado en particular, de la primer corrida, y se anula la presencia de ^{135}Xe , es decir, su concentración se da como nula en todo el material combustible. El *buckling* del nuevo cálculo de celda se modifica iterativamente hasta llevar el factor de multiplicación efectivo a 1. A partir de los resultados de ambas series de cálculos se obtienen los parámetros que se indican en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**

D_{1Xe1}	D_{2Xe1}	Σ_{a1Xe1}	Σ_{S12Xe1}	Σ_{S21Xe1}	Σ_{a2Xe1}	Σ_{f1Xe1}	Σ_{f2Xe1}	$\nu\Sigma_{f1Xe1}$	$\nu\Sigma_{f2Xe1}$
D_{1Xe0}	D_{2Xe0}	Σ_{a1Xe0}	Σ_{S12Xe0}	Σ_{S21Xe0}	Σ_{a2Xe0}	Σ_{f1Xe0}	Σ_{f2Xe0}	$\nu\Sigma_{f1Xe0}$	$\nu\Sigma_{f2Xe0}$

Tabla 2. Parámetros obtenidos de la salida de WIMS para el cálculo de las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la concentración de Xenón.

La notación Xe1 y Xe0 se refiere a los casos con y sin Xe respectivamente.

D_{1Xe1} y D_{2Xe1} son los coeficientes de difusión para los dos grupos de energía luego de la condensación, para el caso con Xe; D_{1Xe0} y D_{2Xe0} son los mismos coeficientes para el caso sin Xe.

Σ_{a1Xe1} y Σ_{a2Xe1} son respectivamente las secciones eficaces macroscópicas efectivas de absorción, para los grupos uno y dos considerando la presencia de Xe; Σ_{a1Xe0} y Σ_{a2Xe0} son las equivalentes para la celda sin Xe.

De la misma manera Σ_s representa la sección eficaz macroscópica de scattering, Σ_f la sección eficaz macroscópica de fisión y $\nu\Sigma_f$ el número promedio de neutrones producidos por fisión multiplicado por la sección eficaz macroscópica de fisión.

Con los parámetros anteriores se determinan las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la concentración de Xe, para cada quemado y para ambos grupos de energía, como se muestra en las ecuaciones (3) y (4).

$$\frac{\partial \Sigma_{xg}}{\partial N_{Xe}} = \frac{1}{N_{Xe}} (\Sigma_{xg Xe1} - \Sigma_{xg Xe0}) \quad (3)$$

$$\frac{\partial \Sigma_{trg}}{\partial N_{Xe}} = \frac{1}{3N_{Xe}} \left(\frac{1}{D_{g Xe1}} - \frac{1}{D_{g Xe0}} \right) \quad (4)$$

En estas ecuaciones x representa las diferentes secciones eficaces de la Tabla 2, Σ_{tr} es la sección eficaz de transporte, g es el grupo de energía, y $\overline{N_{Xe}}$ representa la concentración media de Xe para cada instancia de quemado, referida a la celda (para el caso con Xe). Esta normalización se calcula a partir de las concentraciones obtenidas de la salida de WIMS (N_{Xe_i}), en relación al volumen de la celda mediante la ecuación (5).

$$\overline{N_{Xe}} = \sum_{i \in FM} \left(\frac{N_{Xe_i} V_i}{V^C} \right) \quad (5)$$

En esta ecuación FM representa el total de coronas de combustible presentes en la celda, V_i es el volumen de la corona i , N_{Xe_i} es la concentración de Xe presente en la corona i , y V^C es el volumen total de la celda, que resulta de la suma de los volúmenes de cada región, como se muestra en la ecuación (6).

$$V^C = \sum_{i \in C} V_i \quad (6)$$

2.3.2.2. Cálculo de los rendimientos efectivos por fisión del Iodo y del Xenón

El cálculo del rendimiento por fisión del Iodo y del Xe efectivos, se hace en base a las ecuaciones (7).

$$SI_g = \sum_{x \in FI} YI_x N_x^C \sigma_{fg_x}^C ; SXe_g = \sum_{x \in FI} YXe_x N_x^C \sigma_{fg_x}^C \quad (7)$$

En estas ecuaciones, SI y SXe son respectivamente los rendimientos efectivos del Iodo y del Xe, YI_x y YXe_x son las contribuciones ("yields") del isótopo x para el Iodo y el Xe, N_x es la concentración del isótopo x y σ_{fg} es la sección eficaz microscópica de fisión para el grupo de energía g . En la ecuación (7) FI representa el total de isótopos fisiles que contribuyen a estos rendimientos listados en la Tabla 3, y C alude a la celda.

Las contribuciones del Iodo y del Xe para los distintos isótopos fisiles, correspondientes a la biblioteca de datos neutrónicos WIMSD-IAEA 69 grupos, wluop, se muestran en la Tabla 3.

Isótopo	U-235	U-238	Pu-239	Pu-240	Pu-241	Pu-242
Xe	2.5761E-03	2.6864E-04	1.0763E-02	5.3067E-03	2.2690E-03	1.4391E-03
I	6.2900E-02	7.0147E-02	6.5354E-02	6.8468E-02	6.9543E-02	6.9520E-02

Tabla 1. Contribuciones (yields) del Iodo y del Xenón para fisiones en diferentes isótopos fisiles.

Considerando que la tasa de fisión para cada isótopo fisil es la misma para la celda homogeneizada que para la celda original, se obtiene la ecuación (8).

$$V^C N_x^C \sigma_{fg_x}^C \phi^C = V^{FM} N_x^{FM} \sigma_{fg_x}^{FM} \phi^{FM} \quad (8)$$

Donde ϕ^C y ϕ^{FM} son el flujo de celda y el flujo neutrónico medio en cada material fisil respectivamente. Estos se obtienen a partir de las ecuaciones (9).

$$\phi_g^C = \frac{\sum_{i \in C} V_i \phi_{ig}}{V^C} ; \phi_g^{FM} = \frac{\sum_{i \in FM} V_i \phi_{ig}}{V^{FM}} \quad (9)$$

Cuando un material fisil se encuentra inmerso en un flujo constante, las tasas de reacción obtenidas por WIMS (tasa de reacción por unidad de concentración y por unidad de volumen), están dadas por la ecuación (10).

$$RR_{xi_g} = \phi_{ig} \sigma_{xi_g} \quad (10)$$

Donde RR_{xi} es la tasa de reacción del isótopo fisil x en el material i , obtenido de la salida de WIMS, y el flujo integrado en cada volumen se obtiene de la tasa de absorción del isótopo ficticio 3000 (isótopo de sección eficaz constante e igual a 1).

A partir de las ecuaciones (7), (8), (9) y (10) se obtienen las ecuaciones (11), donde se expresa la forma de encontrar las contribuciones efectivas para cada grupo g .

$$SI_g = \frac{\sum_{x \in FI} Yx_i \left(\sum_{j \in FM} Nx_j V_j RRx_{jg} \right)}{V^C \phi_g^C} ; \quad SXe_g = \frac{\sum_{x \in FI} Yx_{Xe} \left(\sum_{j \in FM} Nx_j V_j RRx_{jg} \right)}{V^C \phi_g^C} \quad (11)$$

2.3.2.3. Sección eficaz microscópica efectiva del Xenón

Las ecuaciones (12) y (13) establecen la conservación de la masa de Xe y las absorciones producidas por ese isótopo.

$$N_{Xe}^C V^C = \sum_{i \in FM} N_{Xe_i} V_i \quad (12)$$

$$\phi_g^C V^C N_{Xe}^C \sigma_{Xe_g}^C = \sum_{i \in FM} \phi_{i_g} V_i N_{Xe_i} \sigma_{Xe_i_g} \quad (13)$$

Donde C y FM tienen el mismo significado que en las secciones 2.3.2.1 y 2.3.2.2, N_{Xe} es la concentración de Xe, σ_{Xe_g} es la sección eficaz de absorción microscópica del Xe y $\sigma_{Xe_g}^C$ es la sección eficaz microscópica efectiva. A partir de las ecuaciones (10), (12) y (13) se obtiene la sección eficaz microscópica efectiva del Xe, $\sigma_{Xe_g}^C$, como se muestra en la ecuación (14).

$$\sigma_{Xe_g}^C = \frac{\sum_{i \in FM} N_{Xe_i} RR_{Xe_i_g} V_i}{\phi_g^C \sum_{i \in FM} N_{Xe_i} V_i} \quad (14)$$

Por último, y válido tanto para los parámetros termohidráulicos como para la temperatura del combustible y la concentración de B, ha de tenerse en cuenta que los valores que de dichos parámetros el usuario habrá de consignar en el caso nominal en WIMS, deberán ser aquellos que usará como valores centrales de la tabla de derivadas en la entrada de PUMA. El valor central de Xe es siempre cero si se solicitan las derivadas con respecto a la concentración de Xe, y es el valor de equilibrio en cada quemado si no se solicitan derivadas con respecto al Xe. Como posible ampliación del programa a futuro, puede agregarse que el usuario pueda ingresar deliberadamente un valor constante de concentración de Xe para todo valor de quemado.

2.4. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada (TMPE)

Las secciones eficaces y coeficientes de difusión a dos grupos se obtenían, con las versiones 4.028 y anteriores del código PUMA, mediante aproximación lineal local, usando las derivadas parciales, como función de varios parámetros independientes tales

como temperatura del combustible, temperatura del refrigerante, densidad del refrigerante, y concentración de Xe.

Resulta de interés la obtención de secciones eficaces a partir de la interpolación en una Tabla de Múltiples Parámetros de Entrada (TMPE).

A tal efecto se implementó en el código PUMA, versión 5.00, un algoritmo para el cálculo de secciones eficaces por interpolación a partir de una TMPE. Los parámetros independientes incluidos en dicha tabla, para el presente trabajo, son: quemado, concentración de Xe, temperatura del combustible, densidad del refrigerante, temperatura del refrigerante, temperatura del moderador, y concentración de B. Este método es opcional en PUMA 5.00, siendo posible el cálculo de secciones eficaces mediante el método clásico de las derivadas.

Se supone que un algoritmo que obtenga las secciones eficaces directamente a partir de la interpolación en una tabla de interpolación múltiple con varios parámetros de entrada, contribuirá a una mejor evaluación de las mismas.

La principal ventaja de la implementación de la TMPE es que con un juego de tablas se pueden abarcar en forma confiable rangos muy amplios para los parámetros, especialmente para aquellos valores que están muy alejados de los de funcionamiento en régimen nominal.

El nuevo procedimiento permite realizar el cálculo de las secciones eficaces directamente a partir de esta tabla por medio de interpolaciones que en lugar de utilizar una única aproximación por serie de Taylor de primer orden, para cada sección eficaz en función de cada parámetro, haciendo uso de las derivadas parciales discretas de dicha sección eficaz respecto a cada uno de los parámetros de interés, y haciendo valer esta aproximación en todo el rango de interés de cada parámetro, lo hace en una división de intervalos tan pequeños como se desee de todo ese mismo intervalo de interés en cada uno de los parámetros. No obstante ambos métodos son opciones en PUMA 5.00. PUMA puede obtener libremente secciones eficaces de este banco de datos representado por una TMPE, en donde los distintos parámetros estén aparentemente no correlacionados, cuestión que es útil para la simulación de transitorios como LOCAs y demás.

La tabla generada forma también parte de los datos de entrada de PUMA del mismo modo que las tablas basadas en las derivadas parciales, las cuales también se deben dar pues es necesario que se tomen de ellas los datos de las secciones eficaces de los reflectores, materiales estructurales y las fracciones de los neutrones retardados. Es decir, las tablas según derivadas parciales deben darse como entrada en PUMA aunque se opte por el método de interpolación para las secciones eficaces de algunos materiales.

Por el momento el sistema en PUMA está implementado para contener hasta 7 parámetros, siendo el primero el quemado y otros 6 parámetros acoplados. Está previsto en el futuro ampliar este número hasta 10 parámetros.

Es importante señalar que la incorporación de esta TMPE no elimina la posibilidad de seguir utilizando las tablas de derivadas de secciones eficaces de la forma implementada en las anteriores versiones de PUMA.

En el caso particular de las secciones eficaces en función de la concentración de Xe, se usarán simultáneamente ambos tipos de tablas, pues las contribuciones de Xe y Iodo y las secciones eficaces microscópicas del Xe se toman de la tabla de las derivadas. Es por eso que en la tabla de formato anterior (también denominada “clásica” o “canónica”), deben figurar los valores de los rendimientos del Xe y del Iodo, así como las secciones eficaces microscópicas para todo el rango del quemado y energía correspondiente.

Para consultar el uso de una TMPE o más de una en PUMA, puede consultarse la referencia [3]

El utilitario desarrollado en este trabajo genera los distintos archivos de entradas del código de celda WIMS, necesarios para la generación de la tabla, a partir del caso nominal representativo de las condiciones normales de funcionamiento del reactor a una potencia dada. Cada archivo creado representa cada uno de los casos particulares posibles que se pueden combinar de los distintos parámetros ingresados en el archivo de entrada, es decir representan las perturbaciones alrededor del caso nominal. El utilitario ejecuta en forma secuencial los distintos casos para obtener las correspondientes salidas, a partir de las cuales se extraen las secciones eficaces de referencia que conforman la TMPE. Estos valores de referencia son denominados “valores nodales” de la tabla. El procedimiento es tal que permite la obtención de una tabla genérica, es decir, es aplicable para obtener una tabla que utilice cualquier conjunto de valores requerido por el usuario, para un determinado número de parámetros básicos. Para una mejor visualización de la tabla de TMPE puede dirigirse a la Sección 3.5.2.2.

2.4.1. Consideración con respecto a la concentración de Xenón

El programa considera la distribución espacial de Xe, manteniendo la proporción adecuada en las coronas combustibles, y transformando a las unidades que se requieren para la entrada en WIMS.

El usuario puede elegir varias concentraciones de Xe en celda [átomos/cm³]. Luego, cada una de esas concentraciones representa el número total de átomos de Xe por volumen de celda (cm³). Cada uno de estos valores totales es distribuido por el utilitario en cada corona del combustible en la celda. En el archivo de entrada de WIMS para cada caso particular, cuando se definen los materiales de la celda se usan los “Number Densities” o “Densidades Atómicas” [átomos/(barn cm)] correspondientes a cada corona del combustible en la celda, asociados a la concentración de celda ingresada. En WIMS se debe ingresar la concentración expresada en esta última unidad; el utilitario realiza la correspondiente conversión. La distribución del Xe en coronas según cada material del combustible, depende además del valor del quemado.

En cada corona, y para cada quemado, la fracción de Xe está calculada de acuerdo a la salida WIMS del caso nominal. Es decir, para una dada concentración de Xe la fracción en cada corona se corresponde con la calculada a partir de la salida del caso nominal. La nueva concentración de Xe debe ser distribuido entre las coronas tomando por referencia o normalización lo que resulta del caso nominal para el mismo quemado.

Primero se calcula el factor de relación de volumen *FV*:

$$FV = \frac{V_{comb} \cdot 1 \times 10^{24}}{V_{celda}} \quad (15)$$

Luego se calcula $FF_i(Q)$, que es el factor de distribución de Xe en cada material, en función del quemado, del siguiente modo:

$$FF_i(Q) = \frac{N_i}{\bar{N}} \quad (16)$$

donde N_i es el "Number Density o densidades atómicas" del caso nominal, de la corona combustible que se quiere calcular y \bar{N} es el valor medio del "Number Density" o "Densidad Atómica" del caso nominal, siendo:

$$\bar{N} = \frac{\sum V_i \cdot N_i}{\sum V_i} \quad (17)$$

Y siendo V_i es el volumen de cada corona de material combustible.

Por lo tanto, el N_{if} para el caso de la concentración de Xe elegida por el usuario es:

$$N_{if} = CXe \cdot \frac{FF_i(Q)}{FV} \quad (18)$$

donde N_{if} representa la concentración de Xe corregida, cuya concentración CXe el usuario ingresa en el archivo de entrada *TMPE.txt*.

2.4.2. Extracción de secciones eficaces

La tabla de múltiples parámetros de entrada, se arma con los datos obtenidos de los archivos auxiliares generados.

Las diez secciones eficaces se extraen de los archivos auxiliares generados por WIMS (ver Sección 3.5). Ocho de dichas secciones eficaces corresponden a la siguiente enumeración: coeficientes de difusión axial, secciones eficaces de absorción, de remoción y de fisión multiplicadas por el correspondiente valor ν , para ambos grupos de energía; estos datos se encuentran en la cadena 14 del archivo de salida de WIMS (ver Sección 3.5.2.1), que agrupados en el formato PUMA y haciendo uso de la ecuación (2), corresponden a los ocho primeros valores Σ_{T1} , Σ_{T2} , Σ_{a1} , Σ_{12} , Σ_{21} , Σ_{a2} , $(\nu\Sigma_f)_1$, $(\nu\Sigma_f)_2$. Los otros 2 valores restantes, es decir Σ_{f1} , Σ_{f2} , se obtienen según la siguiente ecuación:

$$\Sigma_{f_g} = \frac{\sum_{x \in X} \left[\sum_{i \in FM} (V_i \cdot RR(fis)_{ixg} \cdot N_i) \right]}{\sum_{k \in C} V_k \cdot (RR3000_{abs_g})_k} \cdot EF \quad (19)$$

donde los $RR(fis)$ ("Reaction Rates" de fisión, ver Sección 3.5.2.1) corresponden a los nucleidos 2235, 8238, 6239, 1240, 1241, 1242 que arman el conjunto simbolizado por X en la fórmula, FM alude al conjunto de volúmenes con material combustible, y C alude a volúmenes del total de la celda. La tasas de reacción anteriores, así como las del isótopo hipotético 3000, $RR3000_{abs}$ ("Reaction Rates" de absorción), se obtienen de los archivos auxiliares de salida generados por WIMS y corresponden a la información contenida en la

cadena 15 (ver Sección 3.5.2.1). En la ecuación (19) EF representa la energía liberada por fisión en [MeV/fis]. El isótopo hipotético 3000 se considera como un producto de fisión ficticio y es un absorbente con $\sigma_s=1.0$ en todos los grupos.

Cabe aclarar que a partir de este punto, para el método de TMPE y a diferencia de las cuentas subsiguientes que se requieren para armar las tablas canónicas de derivadas en el otro método, la extracción de las secciones eficaces es directa. Se toman sus valores de las salidas auxiliares de WIMS y se vuelcan en el archivo de salida generado para tal fin (*XSMultientrada.txt* ver Sección 3.5.2.2).

CAPÍTULO 3

3. DESCRIPCIÓN DEL FUNCIONAMIENTO DEL PROGRAMA

3.1. Introducción

El programa objeto de este trabajo está desarrollado para su aplicación en el cálculo de reactores de agua pesada. La finalidad del mismo es la de lograr unificar en un solo programa el cálculo de las secciones eficaces y sus derivadas en WIMS, y el ordenamiento de los datos según se ingresan en la entrada de PUMA, ya que esto facilita la compatibilidad de procedimientos y de resultados entre usuarios, y a su vez contribuye al ahorro de tiempo en la preparación y cálculo de una gran cantidad de casos a estudiar.

En las siguientes secciones se detalla la información que se necesita para la correcta ejecución de este programa, y se hace además una breve descripción de las entradas que se necesitan y de los archivos de salida que se generan, como así también de los respectivos formatos.

3.2. Descripción

El programa está escrito en lenguaje FORTRAN 90 y consta de un archivo ejecutable llamado *DTSec.exe* y de 6 módulos llamados *bucklings.mod*, *cargardatosprincipal.mod*, *creaentrada.mod*, *creaentrada_deriv.mod*, *analizasalida.mod* y *analizasalida_deriv.mod*. Los 7 archivos que conforman el utilitario pueden ubicarse en la carpeta de trabajo que el usuario elija a tal efecto.

3.3. Funcionamiento

El programa se pone en funcionamiento una vez que el usuario ejecuta el archivo *DTSec.exe*. Como ha sido programado en modo ventana, no será necesario ejecutarlo desde línea de comando.

3.3.1. Elección del método de cálculo

El programa solicita que se elija cual de los 2 métodos, *derivadas parciales* o *tabla de múltiple parámetros de entrada*, se utilizará en PUMA para manipular las secciones eficaces. La Fig. 1 muestra la pantalla donde el usuario especifica el método.

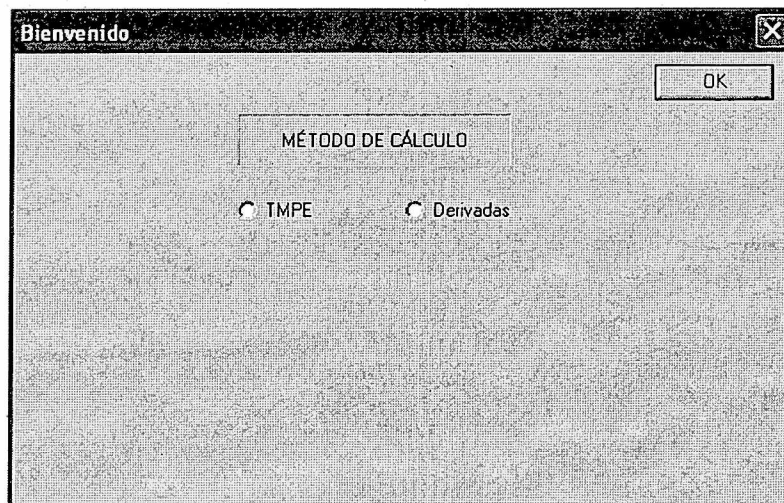


Figura 1. Elección del método para el tratamiento de secciones eficaces en PUMA.

3.3.2. Ingreso del directorio de trabajo, ubicación y nombre del ejecutable de WIMS, y entrada del caso nominal

A continuación de la elección del método de cálculo el programa requiere que el usuario ingrese la siguiente información: directorio completo de trabajo, nombre y extensión del archivo del caso nominal para WIMS, directorio donde se encuentra la biblioteca de secciones eficaces a utilizar, nombre, extensión y ubicación del ejecutable de WIMS. En caso de elegirse el método de TMPE se solicita además el ingreso de la cantidad de parámetros a utilizar como variables independientes de las secciones eficaces, donde se debe incluir necesariamente como parámetro el quemado. En las Figs. 2 y 3 se muestran las pantallas que exhibe el programa en esta instancia, para cada método respectivamente.

A screenshot of a software dialog box titled "Derivadas". The dialog has a standard Windows-style title bar with a close button (X) in the top right corner. Inside the dialog, there is a button labeled "Siguiente" in the top right. The main content area contains five text input fields, each with a label above it: "Directorio completo de trabajo", "Nombre y extensión del archivo del caso nominal", "Directorio donde se encuentra la biblioteca de secciones eficaces", "Nombre y extensión del ejecutable de WIMS", and "Directorio del ejecutable de WIMS". All input fields are currently empty.

Figura 2. Ingreso del directorio de trabajo, ejecutables y entrada principal de WIMS para el método de las derivadas parciales en PUMA.

The image shows a window titled "TMPE" with a standard Windows-style title bar (minimize, maximize, close buttons). The window contains several input fields and a button:

- Field 1: "Directorio completo de trabajo" (Complete work directory) with a "Siguiete" button to its right.
- Field 2: "Nombre y extensión del archivo del caso nominal" (Name and extension of the nominal case file).
- Field 3: "Directorio donde se encuentra la biblioteca de secciones eficaces" (Directory where the effective section library is located).
- Field 4: "Nombre y extensión del ejecutable de WIMS" (Name and extension of the WIMS executable).
- Field 5: "Directorio del ejecutable de WIMS" (Directory of the WIMS executable).
- Field 6: "Cantidad de parámetros (incluyendo el quemado)" (Number of parameters including the burn).

Figura 3. Ingreso del directorio de trabajo, ejecutables y entrada principal de WIMS para el método de TMPE en PUMA.

3.3.3. Ingreso de valores para la tarjeta *POWER* de WIMS

Por último, el usuario debe ingresar información que se utiliza para la evolución del quemado de la celda.

Como puede observarse en la Fig. 4, los valores que se solicitan son los siguientes:

- *RQ*. Expresa la densidad corregida de potencia para la celda.
- *INDB*. Es el número de pasos *rtau* (donde *rtau* expresa el paso del tiempo entre dos cálculos de criticidad sucesivos) entre 2 cálculos de red completos. Se ha programado la posibilidad de ingresar 2 valores diferentes de *INDB*. Para distinguir cuál es el valor de *INDB* que corresponde ingresar en la tarjeta *POWER* a lo largo de la evolución en quemado, se ha agregado un espacio en la ventana en la que el usuario puede ingresar un paso de quemado particular que marca un límite. Éste paso de quemado indica que hasta ese paso se debe utilizar el primer valor de *INDB* ingresado, y cuando se iguale o se supere ese límite se utilizará el segundo valor de *INDB*. A modo de ejemplo: supóngase que el usuario ingresa los dos valores $indb_1$ e $indb_2$, y un paso de quemado límite de 300 [MWd/TonU]. Ahora supóngase que el paso entre quemados es menor a 300 [MWd/TonU], cuando el programa adiciona al caso nominal los pasos de quemado utiliza el valor de $indb_1$, tanto para la tarjeta *POWER* como para el cálculo de *rtau* (ver Sección 3.4.1). Cuando el paso entre quemados es mayor o igual a 300 [MWd/TonU] se utiliza el valor de $indb_2$. También existe la

posibilidad de que el usuario ingrese sólo un valor de $INDB$ (en $INDB_1$), en cuyo caso no es necesario ingresar ningún valor en $INDB_2$ ni en el paso de quemado. En este caso se utiliza este único valor para todos los quemados.

- $RMAXDT$. Es el máximo cambio fraccional de densidad por paso de integración cuando el valor es positivo; y es una longitud de paso de integración constante, en días, si el valor es negativo.
- $BUCKLING$ RADIAL " Br " y $BUCKLING$ AXIAL " Bz ". Se refieren a los bucklings genéricos radial y axial. Estos valores iniciales se encuentran en la tarjeta BUCKLING del archivo del caso nominal. Posteriormente, para cada quemado, se emplean los valores de buckling: que hagan crítica la celda, esto es, k_{ef} igual a uno. Estos valores se obtienen de la salida de WIMS previa (ver Sección 2.2). La evolución del quemado corresponde entonces al caso nominal. En la Sección 3.4.1 se ha hecho una descripción de la utilización de los datos antes mencionados. En la misma sección se ha incluido una tabla (ver Tabla 5) que muestra la ubicación de los mismos en la tarjeta POWER.

The image shows a graphical user interface window titled "POWER". In the top right corner, there is a standard window control icon and an "OK" button. The main area is divided into two sections. The first section, titled "VALORES TARJETA POWER", contains several input fields: "RQ" with a single text box; "INDB" with two stacked text boxes; "Paso de quemado <" with a text box; "Paso de quemado >=" with a text box; and "RMAXDT" with a text box. The second section, titled "BUCKLING", contains two input fields: "Radial" with a text box and "Axial" with a text box.

Figura 4. Ingreso de valores a utilizar en la tarjeta POWER de WIMS.

La elección de cada uno de los valores que se ingresan para la tarjeta POWER, más específicamente la relación entre los pasos de quemado, y los valores r_q , r_{tau} e $indb$, es intrínseca de cada núcleo. Como fue anticipado al comienzo de este trabajo, se ha desarrollado este programa para una celda de reactor tipo Atucha y por lo tanto la relación

que se utiliza internamente para la selección del valor de r_{tau} según los valores de r_q , de quemado y de $indb$, está optimizada para un reactor de estas características.

3.4. Archivos de entrada

El programa necesita, además de los datos que se describen en la sección anterior, los archivos que se describen a continuación, en un formato adecuado. De estos archivos, aquellos directamente relacionados con el programa y no directamente relacionados con WIMS, variarán en su formato de acuerdo al método elegido, esto es, derivadas o TMPE.

3.4.1. Entrada principal de WIMS

La entrada que se usa como caso nominal contiene la definición de la celda para el reactor del cuál se quiere realizar el cálculo. En esta entrada, inicialmente, no está incluida la evolución del quemado de la celda. Este archivo podrá tener el nombre que el usuario desee. Para este programa se eligió la versión de WIMS correspondiente a MTR_PC 3.0, por lo tanto, la extensión será fija (entrada con extensión '*wii*').

Para un correcto funcionamiento del programa, es necesario tener en cuenta que en la entrada de WIMS del caso nominal, deben estar presentes ciertas tarjetas que se detallan a continuación; las mismas se deben encontrar en letras mayúsculas. Y es preciso además considerar que en la entrada no se haga comentarios que utilicen en su texto los mismos nombres de estas tarjetas. Las tarjetas en cuestión son las siguientes:

- *NMATERIAL* $i j$
- *MATERIAL* $m d T n$ lista, donde m y d deberán ser diferentes a "-1"

Se puede especificar que un *MATERIAL* asuma las características de otro *MATERIAL* anteriormente definido en la entrada nominal, como se muestra en el ejemplo siguiente:

```
MATERIAL 3 1 293 3 2001 11.11 16 88.89
```

```
MATERIAL 4 3
```

donde *MATERIAL* 4 posee los mismos atributos que el *MATERIAL* 3.

Sin embargo, a los efectos de un correcto funcionamiento del programa se debe evitar utilizar éste tipo de simplificación, y en su lugar repetir explícitamente toda la definición del nuevo material aunque sea la misma que la del anterior.

- *POWER*

Los valores utilizados en esta tarjeta corresponden al quemado 0; el valor introducido en esta tarjeta será luego utilizado como quemado 0 cuando posteriormente se agreguen los pasos de quemados.

- *BUCKLING* $B_r^2 B_z^2$

- *REACTION lista*

Para los datos que requiere PUMA se necesita hacer cuentas internamente que usan las tasas de reacción de los nucleidos especificados en *lista*. Estos son: 4135, 2235, 8238, 6239, 1240, 1241, 1242 y 3000.

El formato que se debe utilizar para declarar los diferentes nucleidos para un correcto funcionamiento del programa, es el siguiente:

```
REACTION  $i_1$   $T_{i_1}$  $
 $i_2$   $T_{i_2}$  $
 $i_3$   $T_{i_3}$  $
...
 $i_n$   $T_{i_n}$ 
```

Tabla 4. Descripción del formato a utilizar en la tarjeta REACTION, del programa WIMS.

donde i corresponde al número de identificación del nucleido y T_i su temperatura expresada en K.

- *PRINTC i j k l*

Donde los valores que se requieren necesariamente son los siguientes: $i=1$, $j=0$, $k=0$, $l=1$.

La información previamente ingresada en la Fig. 4 descrita en la Sección 3.3.3, se utiliza para agregar pasos de quemado al archivo original de la entrada del caso nominal, en el siguiente formato:

```
POWER  $i$   $r_q$   $r_{tau}$   $indb$   $r_{maxdt}$ 
BUCKLING  $Br$   $Bz$ 
BEGINC
BUCKLING  $Br$   $Bz$ 
BEGINC
```

Tabla 5. Descripción de la ubicación de los valores ingresados previamente en las subsiguientes entradas de WIMS para cada paso de quemado.

En la Tabla 5 se tiene:

- i : especifica la unidad de r_q ; en particular $i=1$ corresponde a MW/TonU iniciales.
- r_{tau} : como se mencionó en la Sección 3.3.3 es el paso del tiempo entre dos cálculos de criticidad sucesivos cuyo valor lo calcula internamente el programa de la siguiente forma: $(Q_{i+1} - Q_i)/(indb \cdot r_q)$
- El resto de los valores, r_q , $indb$, r_{maxdt} , Br y Bz se describieron en la Sección 3.3.3.

Cabe destacar que cada vez que se ejecuta el programa, el archivo principal de entrada debe estar en el estado original, es decir, la definición de la celda del reactor sin evolución de quemado.

A partir del archivo original y habiéndose incorporado los pasos de quemado al mismo, se comienza a buscar la criticidad ($k_{eff}=1$) para cada paso de quemado, dentro de las 10 pcm de tolerancia en el error de la reactividad.

Una vez evolucionado en el quemado y habiéndose obtenido la convergencia deseada en cada paso, el programa necesita extraer la información contenida en una cadena de datos que muestra una impresión de resultados característicos. Esta cadena es la número 12 en los archivos de salida de WIMS y los datos que interesan aquí son: grado de quemado [MWd/TonU], energía de fisión [MeV/fis], concentraciones isotópicas para cada material que se queme o '*punched materials*', y los "*bucklings críticos*".

El procedimiento antes descrito se realiza cualquiera sea el método elegido, esto es, ya sea que se esté solicitando como salida una tabla de derivadas de secciones eficaces o una TMPE. Este paso inicial de evolución del quemado es necesario en cualquiera de los casos ya que representa la referencia física del fenómeno alrededor de la cual se obtiene cada caso particular, como aproximaciones mediante perturbaciones en WIMS alrededor de dicho caso. La evolución del quemado en el caso nominal representa la acumulación histórica de los diferentes isótopos en juego.

Dentro de éste punto se debe mencionar que el programa contempla la posibilidad de modificar el valor de la temperatura de la tarjeta *REACTION*; para ello sólo se debe ingresar la palabra clave como se explica en el punto siguiente (ver Sección 3.4.2). Para el caso de la tarjeta *DNB* no se ha implementado en este trabajo, ningún algoritmo que lo modifique de acuerdo a la variación de parámetros del refrigerante y/o moderador. Por lo tanto, en los casos particulares que se generan, se utiliza esta tarjeta con los mismos valores que se encuentra en el caso nominal.

3.4.2. Método de las derivadas parciales

Cada vez que se utilice el método de las derivadas parciales, el programa requerirá que el usuario ingrese información a través de un archivo de texto llamado *Derivada.txt*, dentro de la carpeta de trabajo previamente definida, donde se van a detallar ciertos valores de la siguiente manera:

- Cantidad de valores de quemado y línea de valores de quemado con formato libre; todos los valores de quemado se expresan en [MWd/TonU]. Esta línea debe ser siempre la primera en el archivo *Derivada.txt*. Cabe mencionar que en caso de utilizar el método de la TMPE, y como el utilitario igualmente realiza el cálculo de las derivadas en este caso, ésta línea no se debe incluir en el archivo *Derivada.txt*, aunque sí debe incluirse en el archivo *TMPE.txt* según se muestra en la Sección 3.4.3.
- Palabras clave que indicarán respecto a qué parámetros se desea calcular las derivadas, el valor central de dichos parámetros, el apartamiento alrededor de los valores centrales (ΔT en la ecuación (1)), y una lista de los números de materiales para los cuáles se aplican los datos anteriores. Respecto a esta última lista de valores, a los únicos parámetros a los cuales no se aplica, es decir, parámetros

para los cuáles no es necesario indicarle al programa cuáles son los materiales a los que afecta, son la temperatura del combustible y la concentración de Xe. Ello es debido a que el programa está desarrollado de tal manera que modifica automáticamente los valores de todas las coronas de combustible en la celda, y las concentraciones de Xe las toma directamente de la salidas generadas.

- Palabra clave *reaction*: otra palabra clave que se puede utilizar es la que se refiere a la tarjeta *REACTION*. A través de la utilización de la misma se podrá modificar el valor de la temperatura de los nucleidos que se encuentran en la lista dada en la tarjeta *REACTION*. Se solicita la modificación de la temperatura ingresando la palabra *reaction* en el archivo *Derivada.txt*; todos los nucleidos correspondientes adoptan el valor de la temperatura de combustible del caso particular generado, Por omisión el valor de la temperatura se mantiene fijo según el caso nominal.

A continuación se detallan las palabras clave para cada parámetro y las unidades que le corresponden al valor central y su apartamiento:

- Concentración de Xe:
 - Palabra clave: *xe*
- Temperatura de combustible:
 - Palabra clave: *vctc*
 - Unidad del valor central [°C]
 - Unidad del apartamiento del valor central [K]
- Temperatura del refrigerante:
 - Palabra clave: *vctr*
 - Unidad del valor central [°C]
 - Unidad del apartamiento del valor central [K]
- Densidad del refrigerante:
 - Palabra clave: *vcdr*
 - Unidad del valor central [kg/m³]
 - Unidad del apartamiento del valor central [%]
- Temperatura del moderador:
 - Palabra clave: *vctm*
 - Unidad del valor central [°C]
 - Unidad del apartamiento del valor central [K]
- Densidad del moderador:
 - Palabra clave: *vcdm*
 - Unidad del valor central [kg/m³]
 - Unidad del apartamiento del valor central [%]
- Concentración de B:
 - Palabra clave: *Cb*

- Unidad del valor central [g/g(%)], donde, por ejemplo, para 2 ppm el valor a introducir será 2.0E-04.
- Unidad del apartamiento del valor central [g/g(%)]
- Modificación de la temperatura en la tarjeta REACTION:
 - Palabra clave: reaction

En la Tabla 6 puede observarse un ejemplo de entrada para el archivo *Derivada.txt*.

```

1 10 0 50 100 150 200 250 300 400 450 550
2 xe
3 vctc 637.0 136.52
4 vctr 295.8 14.22 6
5 vcdr 801.9 5 6
6 vctm 295.8 14.22 6
7 vcdm 900 10 8 9
8 cb 1.0E-4 1.0E-5 7 8
9 reaction

```

Tabla 6. Descripción del archivo de entrada (*Derivada.txt*) para el método de las derivadas parciales.

El programa permite que el usuario elija deliberadamente los parámetros sobre los que desea calcular derivadas de secciones eficaces, y para ello sólo debe ingresar las palabras clave correspondientes y los valores centrales y de desplazamientos en el archivo *Derivada.txt*.

Si el usuario solicita derivadas con respecto al Xe deberá tener en cuenta que se considera como valor central de Xe para PUMA una concentración nula. Mientras que si el usuario no solicita derivadas respecto al Xe las secciones eficaces que encabezarán la entrada de PUMA, tendrán por valor central la concentración de Xe en equilibrio para cada quemado.

3.4.3. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada

Para especificar los parámetros que variarán en el cálculo, y la lista de valores correspondientes a cada uno, se debe crear un archivo de texto llamado *TMPE.txt*, dentro del directorio de trabajo que el usuario haya especificado como tal.

Los valores de los parámetros se ingresan en las unidades descritas más adelante y el programa se encarga de realizar la conversión a las unidades requeridas en WIMS. Vale decir que en principio podrían ingresarse las listas de valores de los diferentes parámetros en cualquier orden, es decir, el orden a considerar para los parámetros en la salida construida por el programa para entrada de PUMA sería arbitrario mientras fuera consistente con el orden que se da a los parámetros en PUMA en la tarjeta "SECCIONES EFICACES" [1]. Se asume particularmente en este trabajo y por una cuestión de costumbre del uso en PUMA, un orden específico que se detalla a continuación, de modo que pueda ilustrarse la idea y se eviten confusiones.

Se debe ingresar tantas líneas como parámetros se deseen incluir en la TMPE; la línea referente a la cantidad de valores de quemado y los valores propiamente dichos, debe darse necesariamente, aún cuando conste de un solo valor de quemado. A continuación se describen las palabras clave y los valores que las acompañan para una correcta identificación y funcionamiento:

- Concentraciones: la palabra clave *concentración* afecta a las concentraciones de Xe y B. Al ingresarla debe colocarse a continuación a qué elemento corresponde. En este trabajo el programa que se ha desarrollado permite identificar los isótopos 4135 y 1011 solamente. Finalmente la forma de la línea consta de los siguientes datos: *concentración* (palabra clave), *isótopo*, lista de números de material a los que afecta (ídem a lo establecido para el cálculo de derivadas; ver Sección 3.4.2). Debe existir una línea como esta por cada elemento esto es, una línea para el 4135 (Xe) y otra para el 1011 (B) en caso de requerir variación de concentración de ambos (ver Tabla 7).
- Densidades: se debe ingresar la palabra clave *densidad* y una lista de números de materiales a los que afecta (ídem al caso de las derivadas; ver Sección 3.4.2). Deberá darse además, una línea como esta para el refrigerante y otra para el moderador en caso de que en ninguno de ellos exista correlación entre temperatura y densidad (ver punto siguiente). Si la temperatura y la densidad del refrigerante van correlacionadas, pero las del moderador no, entonces va sólo una línea con la palabra clave *densidad* para el moderador; y viceversa. Y si ambos, refrigerante y moderador, tuvieran correlacionadas sus temperaturas y densidades, no se requiere ingresar líneas con la palabra clave *densidad*.
- Temperaturas: palabra clave *temperatura*. La línea completa que se debe ingresar aquí tiene los siguientes elementos: *temperatura* (palabra clave), lista de números de materiales a los que afecta en la entrada de WIMS, *correlación* (palabra clave que se debe dar si se desea correlacionar la temperatura con la densidad; por omisión no se correlacionan los datos). La opción de correlacionar temperaturas con densidades puede aplicarse tanto para el refrigerante como para el moderador. Como se verá en breve, una vez dadas las palabras clave y a continuación de las mismas, deben ingresarse en sucesivas líneas, las listas que contienen los valores a considerar para cada parámetro; una línea por cada uno, siendo la primera de todas la de los quemados, cuya posición es inamovible. Deberán existir siempre una línea de temperaturas y otra de densidades, tanto para el refrigerante como para el moderador, y exista o no correlación de por medio en alguno o en ambos. Dadas las siguientes líneas a modo de ejemplo: línea de temperatura (refrigerante o moderador) $\{t1, t2, t3\}$; línea de densidad (refrigerante o moderador) $\{d1, d2, d3\}$; donde los datos se combinan del siguiente modo: $\{d1-t1, d2-t2, d3-t3\}$. Claro está que si se solicita correlación debe existir la misma cantidad de valores de temperaturas que de densidades, y ambas líneas quedan a consideración del usuario quien las extraerá de tablas estándar de referencia confiable. Puede no darse correlación y para ese caso se da el siguiente ejemplo: línea de temperatura (refrigerante o moderador) $\{t1, t2\}$; línea de densidad (refrigerante o moderador) $\{d1, d2, d3\}$; donde los datos se combinan del siguiente modo: $\{d1-t1, d1-t2, d2-t1, d2-t2, d3-t1, d3-t2\}$

Las líneas de palabras claves asociadas a combustible, refrigerante y moderador deben corresponderse con las líneas de datos que se dan a continuación de la

línea de quemados cuya posición es fija y es a continuación de las palabras clave. Si hay correlación de temperaturas y densidades, no se encontrarán las palabras claves *densidad* para el refrigerante y/o moderador, pero sí existirá una línea adicional de densidades a continuación de la línea de temperaturas correspondiente.

En el caso que no se desee ingresar un parámetro en la TMPE, el programa realizará los cálculos utilizando el valor que se encuentra en el caso nominal.

A continuación de las palabras clave antes descriptas, se deben dar las listas de valores con los que se realizará el cálculo; a continuación se detallan junto a las unidades requeridas en su ingreso:

- Cantidad de valores de pasos de quemados, línea de valores de quemado con formato libre. Valores expresados en [MWd/TonU]. Se debe mencionar que esta línea debe estar siempre a continuación de las líneas con las palabras clave.
- Cantidad de valores de concentración de Xe; línea de valores de concentración con formato libre. Valor expresado en [átomos/cm³].
- Cantidad de valores de temperatura del combustible; línea de valores de temperatura con formato libre. Valor expresado en [°C].
- Cantidad de valores de densidad de moderador; línea de valores de temperatura con formato libre. Valor expresado en [kg/m³].
- Cantidad de valores de temperatura del refrigerante; línea de valores de temperatura con formato libre. Valor expresado en [°C].
- Cantidad de valores de temperatura de moderador; línea de valores de temperatura con formato libre. Valor expresado en [°C].
- Cantidad de valores de densidad de moderador; línea de valores de temperatura con formato libre. Valor expresado en [kg/m³].
- Cantidad de valores de concentración de B; línea de valores de concentración con formato libre. Los valores de las concentraciones de B son ingresados de la misma forma que la empleada en la entrada de WIMS para el caso nominal [(g/g)%]; por ejemplo, para 1 ppm el valor a introducir será 1.0E-04.

A continuación se muestra un ejemplo de entrada completa para la obtención de una TMPE:

```

1 concentración 4135 1 2 3
2 temperatura 1 2 3
3 densidad 5
4 temperatura 5
5 temperatura 7 8 correlación
6 concentración 1011 7 8
7 10 0 50 100 150 200 250 300 400 450 550
8 1 1.111e+013
9 2 222 333
10 1 444
11 2 555 666
12 1 777
13 1 888
14 1 0.888e-3

```

Tabla 7. Descripción del archivo de entrada (*TMPE.txt*) para el método de la tabla de múltiple parámetros de entrada.

Aún cuando el usuario sólo desee obtener la TMPE, deberá crear el archivo *Derivada.txt* ya que de otra manera el programa no funcionará.

En caso de requerirse solamente la TMPE se debe dar el archivo *Derivada.txt*, vacío. Lo que implica que además de crear la TMPE se calculan las contribuciones de I y Xe y las secciones eficaces microscópicas del Xe (archivo *DerSecEfec.txt*), pues para el uso de la TMPE en PUMA, se requiere de ambas tablas.

3.5. Archivos de salida

Los archivos de salida generados corresponden a los pasos intermedios y final de la ejecución del programa. El archivo final respeta el formato que utiliza PUMA, ya sea para derivadas de secciones eficaces o para TMPE.

A continuación se describen los archivos generados para cada uno de los métodos utilizados en PUMA.

3.5.1. Método de las derivadas parciales

3.5.1.1. Archivos de salidas auxiliares

Luego de realizado el procedimiento hasta lograr la convergencia en cada paso de quemado del caso nominal, el utilitario continúa con cada uno de los casos particulares que conformarán la tabla de salida final. A partir del caso nominal y con la información suministrada por el usuario en el archivo *Derivada.txt*, para cada caso particular se generan dos archivos de WIMS: uno corresponde a la entrada de dicho caso, y el otro surge de su ejecución en WIMS, ejecución que queda a cargo del programa objeto de este trabajo; las extensiones de dichos archivos son "*wii*" y "*wio*" respectivamente. También se van a crear archivos con extensión "*wip*", que contienen información sobre las

secciones eficaces y densidades atómicas; pero para el presente trabajo no resulta necesario. Estos archivos se alojan en la carpeta de trabajo previamente definida. Por medio de la recopilación de los datos de los archivos de salida generados se crea un archivo de salida final que sirve de entrada para PUMA. Este archivo final se describe a continuación en la Sección 3.5.1.2.

La información a extraer de los archivos de salida de los casos particulares (extensión 'wio') y que siempre deberá estar disponible es la siguiente:

- Cadena 7: número del material por región y volúmenes de cada región.
- Cadena 12: energía de fisión [MeV/fis].
- Cadena 14: coeficientes de difusión axial, secciones eficaces de absorción, de remoción y las de fisión multiplicadas por ν , a 2 grupos.
- Cadena 15: tasas de reacción de fisión de los nucleidos 2235, 8238, 6239, 1240, 1241 y 1242; tasa de reacción de absorción de los nucleidos 3000 y 4135.

Los nombres de todos los archivos que se generan en pasos intermedios y sus contenidos son los siguientes:

Para el tratamiento del Xe: los archivos *SXe(valor de quemado).wii* y *SXe(valor de quemado).wio* relacionados con el caso sin Xe, y los archivos *Xe(valor de quemado).wii* y *Xe(valor de quemado).wio* relacionados con el cálculo con Xe en equilibrio (ver Sección 2.3.2).

Para el resto de los parámetros los archivos se han definido como: *(nombre del parámetro)D(valor de quemado).wii* y *(nombre del parámetro)D(valor de quemado).wio* para el caso en que el valor del parámetro se encuentra por debajo del valor central de la variable en la cantidad ΔT de la ecuación (1); y *(nombre del parámetro)U(valor de quemado).wii* y *(nombre del parámetro)U(valor de quemado).wio* para el caso en que se encuentre el valor del parámetro por encima del valor central en la cantidad ΔT . Mientras que los nombres que pueden tomar según estos parámetros son los siguientes:

- TempC: temperatura del combustible.
- TempR: temperatura del refrigerante.
- DensR: densidad del refrigerante.
- TempM: temperatura del moderador.
- DensM: densidad del moderador.
- B: concentración de B.

3.5.1.2. Archivo de salida *DerSecEfec.txt*

Una vez concluida toda la ejecución del programa se genera un archivo final en formato texto con la extracción de todas las secciones eficaces y derivadas listadas en filas, según se requiere en PUMA. El nombre utilizado para el archivo conteniendo todas las derivadas es *DerSecEfec.txt*.

Esta salida no contendrá el encabezado en el cual se especifica, entre otras cosas, los valores centrales o de referencia de cada parámetro para todo el reactor, y las constantes de tabla para PUMA; el usuario debe agregar todos estos datos una vez finalizado el cálculo y previo a utilizar PUMA.

El formato de salida del archivo *DerSecEfec.txt* puede observarse en la Tabla 8. Sólo se han reproducido, a modo de ejemplo, las primeras 16 líneas, de un caso ficticio donde se calcularon las secciones eficaces y contribuciones de lodo y Xe correspondientes a los valores tomados como centrales en la entrada en PUMA (filas 2, 3 y 4), y las derivadas respecto a: Xe, temperatura del combustible, temperatura y densidad del refrigerante (filas 5 a 12). Todos estos datos a su vez, correspondientes al valor de quemado que se muestra en la fila 1.

```
1 100
2 1.1111E+00 2.2222E-01 3.3333E-03 4.4444E-03 5.5555E-05
3 1.1111E-03 2.2222E-04 3.3333E-03 4.4444E-02 5.5555E-01
4 1.1111E-05 2.2222E-04 3.3333E-07 4.4444E-06 5.5555E+02 6.6666E+06
5 -1.1111E-19 2.2222E-19 3.3333E-20 4.4444E-19 -5.5555E-22
6 1.1111E-19 -2.2222E-20 -3.3333E-19 -4.4444E-19 -5.5555E-17
7 -1.1111E-07 -2.2222E-07 3.3333E-07 -4.4444E-08 5.5555E-08
8 -1.1111E-07 -2.2222E-09 -3.3333E-07 -4.4444E-07 -5.5555E-05
9 1.1111E-08 -2.2222E-06 3.3333E-09 4.4444E-08 5.5555E-09
10 -1.1111E-07 -2.2222E-09 -3.3333E-06 -4.4444E-08 -5.5555E-04
11 1.1111E-05 2.2222E-05 3.3333E-07 4.4444E-07 -5.5555E-09
12 -1.1111E-08 2.2222E-09 -3.3333E-07 4.4444E-07 -5.5555E-05
```

Tabla 8. Descripción de la forma del archivo *DerSecEfec.txt* que contiene las derivadas de secciones eficaces.

- Fila 1: Quemado correspondiente.
- Filas 2 y 3: estas filas constan de cinco datos cada una que, dados en una variación del formato requerido en PUMA, corresponden a las secciones eficaces. Esto es, los dos primeros son $\Sigma_{T1}=1/(3D_1)$, $\Sigma_{T2}=1/(3D_2)$, y le siguen Σ_{11} , Σ_{12} , Σ_{21} , Σ_{22} , $v\Sigma_{F1}$, $v\Sigma_{F2}$, Σ_{F1} , Σ_{F2} , y corresponden a los parámetros que coinciden con los valores tomados por "centrales" en la entrada en PUMA. Nótese aquí, que los valores de los parámetros termohidráulicos, temperatura del combustible y concentración de B que el usuario tendrá que considerar en el caso nominal en WIMS, deberán ser aquellos que usará como valores centrales de tabla en la entrada de PUMA; el valor central de Xe es cero o la concentración de equilibrio, según se haya solicitado o no el cálculo de las derivadas de Xe (ver Sección 3.4.2).

- Fila 4: se especifican los rendimientos por fisión de Iodo (SI_1, SI_2) y de Xe (SX_1, SX_2), y las secciones eficaces microscópicas del Xe (σ_1, σ_2).
- Filas 5 y 6: derivadas respecto a la concentración de Xenón en el siguiente orden: $\partial\Sigma_{T1}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{T2}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{11}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{12}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{21}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{22}/\partial[Xe], \partial v\Sigma_{F1}/\partial[Xe], \partial v\Sigma_{F2}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{F1}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{F2}/\partial[Xe]$, donde $\Sigma_{T1}=1/(3D_1)$ y $\Sigma_{T2}=1/(3D_2)$.
- Filas 7 y 8: Estos valores corresponden a las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la temperatura del combustible. El orden es el siguiente: $\partial\Sigma_{T1}/\partial Tc, \partial\Sigma_{T2}/\partial Tc, \partial\Sigma_{11}/\partial Tc, \partial\Sigma_{12}/\partial Tc, \partial\Sigma_{21}/\partial Tc, \partial\Sigma_{22}/\partial Tc, \partial v\Sigma_{F1}/\partial Tc, \partial v\Sigma_{F2}/\partial Tc, \partial\Sigma_{F1}/\partial Tc, \partial\Sigma_{F2}/\partial Tc$.
- Filas 9 y 10: ídem anterior, pero estos valores corresponden a las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la temperatura del refrigerante. El orden es el siguiente: $\partial\Sigma_{T1}/\partial Tr, \partial\Sigma_{T2}/\partial Tr, \partial\Sigma_{11}/\partial Tr, \partial\Sigma_{12}/\partial Tr, \partial\Sigma_{21}/\partial Tr, \partial\Sigma_{22}/\partial Tr, \partial v\Sigma_{F1}/\partial Tr, \partial v\Sigma_{F2}/\partial Tr, \partial\Sigma_{F1}/\partial Tr, \partial\Sigma_{F2}/\partial Tr$.
- Filas 11 y 12: ídem anterior, pero estos valores corresponden a las derivadas de las secciones eficaces con respecto a la densidad del refrigerante. El orden es el siguiente: $\partial\Sigma_{T1}/\partial pr, \partial\Sigma_{T2}/\partial pr, \partial\Sigma_{11}/\partial pr, \partial\Sigma_{12}/\partial pr, \partial\Sigma_{21}/\partial pr, \partial\Sigma_{22}/\partial pr, \partial v\Sigma_{F1}/\partial pr, \partial v\Sigma_{F2}/\partial pr, \partial\Sigma_{F1}/\partial pr, \partial\Sigma_{F2}/\partial pr$.

En cualquier caso, en su forma más amplia y general, el archivo *DerSecEfec.txt* tendrá la siguiente forma:

- Quemado correspondiente.
- Coeficientes de difusión y secciones eficaces para el caso calculado según los valores tomados por "centrales" en la entrada en PUMA.
- Rendimientos por fisión de Iodo y Xe, y las secciones eficaces microscópicas del Xe.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la concentración de Xe.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la temperatura del combustible.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la temperatura del refrigerante.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la densidad del refrigerante.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la temperatura del moderador.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la densidad del moderador.
- Derivadas de secciones eficaces respecto a la concentración de B.

3.5.2. Método de la tabla de múltiples parámetros de entrada

3.5.2.1. Archivos de salidas auxiliares

Una vez realizado los procesos hasta lograr la convergencia en cada paso de quemado del caso nominal, el programa se encarga de generar un paquete de archivos que contienen las soluciones de los casos particulares alrededor del caso de referencia o nominal. Se generan dos archivos para cada caso particular (uno de entrada y uno de salida, con extensiones "wii" y "wio" respectivamente), es decir, por cada variación en el valor de uno de los parámetros; todos estos archivos se crean en la carpeta de trabajo elegida anteriormente. También se crean archivos con extensión "wip" que contienen información acerca de las secciones eficaces y densidades atómicas, pero que para el presente trabajo no será necesaria. El programa extrae información de todos estos archivos y forma una tabla final de secciones eficaces que contiene toda la información requerida por el código de reactor PUMA cuando utiliza este método. La tabla (TMPE) corresponde al archivo de salida *XSMultientrada.txt* que se describe en la Sección 3.5.2.2.

La información que se extrae de los archivos de salida de los casos particulares (extensión 'wio') y que debe estar disponible es la siguiente:

- Cadena 7: número del material por región y volúmenes de cada región.
- Cadena 12: energía de fisión [MeV/fis].
- Cadena 14: coeficientes de difusión axial, secciones eficaces de absorción, de remoción y las de fisión multiplicadas por v a 2 grupos.
- Cadena 15: tasas de reacción de fisión de los nucleidos 2235, 8238, 6239, 1240, 1241 y 1242; tasa de reacción de absorción de los nucleidos 3000 y 4135.

Los nombres con que estos archivos son generados poseen un formato especial para una rápida y fácil comprensión del caso generado. A modo de ejemplo se muestran los nombres de los archivos de entrada y salida auxiliares generados en un caso hipotético: *Q100_1_2_2_1_3_1.wii* y *Q100_1_2_2_1_3_1.wio*, donde el formato utilizado es el siguiente: *Q(valor de quemado)* y luego una serie de índices donde cada uno indica qué valor de cada parámetro se está utilizando, valor relacionado con el orden en que estos parámetros han sido dados en el archivo *TMPE.txt*.

Suponiendo que el orden en que se definieron los parámetros fue el siguiente: concentración de Xe, temperatura del combustible, temperatura y densidad del refrigerante, temperatura del moderador, concentración de B: el primer índice indica que se está utilizando el primer valor de la concentración de Xe, el segundo índice indica que se está utilizando el segundo valor de la temperatura del combustible, el tercero indica que se está utilizando el segundo valor de la densidad del refrigerante y así sucesivamente con los demás parámetros.

3.5.2.2. Archivo de salida *XSMultientrada.txt*

A partir de las salidas de WIMS auxiliares se genera un archivo final en formato texto con la extracción de todas las secciones eficaces listadas en filas. El nombre

Los valores incluidos en las filas 2 a 8 corresponden a los de referencia o nodales con que se ha confeccionado la tabla a utilizarse en PUMA, utilizando el modelo de celda que el usuario haya elegido.

Siguiendo el orden de los parámetros según las filas 2 a 8, las filas 9 y siguientes corresponden a las secciones eficaces en el formato antes descrito, para todas las combinaciones posibles de todos los valores de parámetros, variando desde el último al primero.

Para mayor claridad supongamos como ejemplo siete parámetros (a,b,c,d,e,f,g) y sus valores $(a_i,b_j,c_k,d_l,e_m,f_n,g_o)$, y que sus valores son explícitamente $\{a1,a2\}$, $\{b1\}$, $\{c1,c2\}$, $\{d1\}$, $\{e1\}$, $\{f1\}$, $\{g1,g2\}$, siendo el orden alfabético de los parámetros indicativo del orden de las filas 2 a 8. Entonces a las filas 9 y siguientes les corresponderían las siguientes combinaciones:

$(a1,b1,c1,d1,e1,f1,g1)$
 $(a1,b1,c1,d1,e1,f1,g2)$
 $(a1,b1,c2,d1,e1,f1,g1)$
 $(a1,b1,c2,d1,e1,f1,g2)$
 $(a2,b1,c1,d1,e1,f1,g1)$
 $(a2,b1,c1,d1,e1,f1,g2)$
 $(a2,b1,c2,d1,e1,f1,g1)$
 $(a2,b1,c2,d1,e1,f1,g2)$

En el orden de presentación de los parámetros, el quemado va siempre primero. Luego vienen todos los demás, cuyo orden debe coincidir al dado en el título "SECCIONES EFICACES" del procesamiento de PUMA.

3.6. Descripción del procedimiento de cálculo según el método elegido para el tratamiento de secciones eficaces en PUMA

A continuación se describirá el procedimiento que sigue el programa hasta obtener la información final. Ambos métodos siguen, a grandes rasgos, procedimientos muy semejantes. Esta característica común se muestra en diagrama de flujo de la Fig. 5.

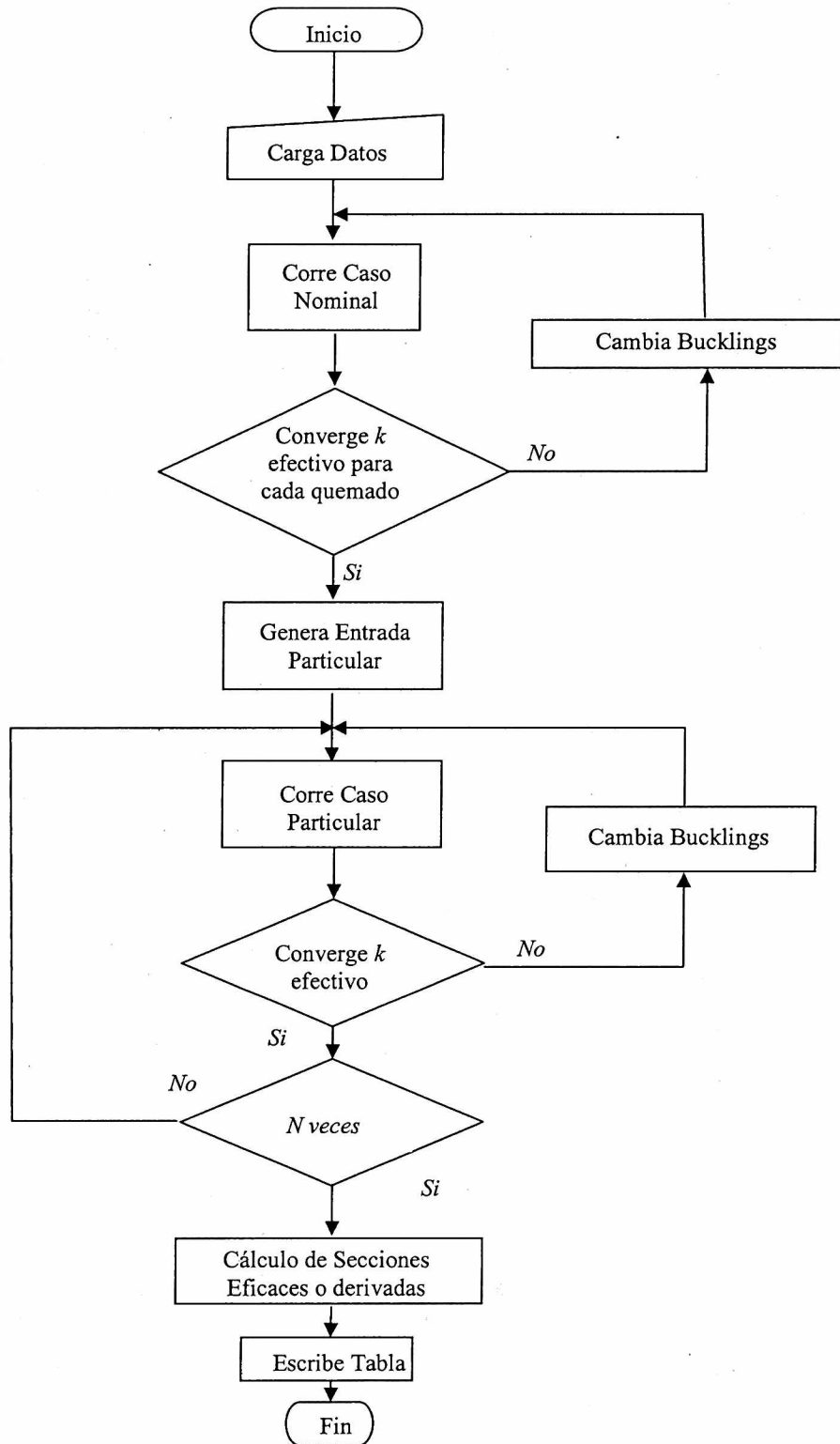


Figura 5. Diagrama de flujo que muestra los procedimientos comunes que sigue el programa para ambos métodos de tratamiento de secciones eficaces en PUMA. En el diagrama N corresponde al producto de la cantidad de valores de todos los parámetros.

3.6.1. Método de las derivadas parciales

- Se ingresan los datos:

- Elección del método a utilizar; en este caso derivadas parciales (ver Fig. 1).
- Ingreso del directorio de trabajo (ver Fig. 2).
- Ingreso de la entrada nominal con su correspondiente extensión ("*wii*") (ver Fig. 2).
- Ingreso de la ubicación de la biblioteca (*wlup-69.bib*) de datos nucleares. (ver Fig. 2).
- Ingreso del nombre y su extensión del ejecutable de WIMS (ver Fig. 2).
- Ingreso de la ubicación del ejecutable de WIMS (ver Fig. 2).
- Ingreso de valores para la tarjeta *POWER* ("*rq*", "*indb₁*", "*indb₂*", "*rmaxd_r*", "*paso de quemado*", "*Buckling radial*", "*Buckling axial*") (ver Fig. 4)
- Carga archivo de entrada para WIMS (caso nominal).
- Ingreso de parámetros a través del archivo *Derivada.txt* (quemados, valores centrales de temperaturas del combustible, densidades del refrigerante, temperaturas del refrigerante, temperaturas y densidades del moderador, concentraciones de B, desplazamientos respecto a valores centrales).

- Se corre el caso nominal:

- Convergencia de k_{ef} a la unidad para cada paso de quemado (10 pcm de tolerancia en reactividad).
- De la salida de WIMS para el caso nominal se extraen como datos los "*Number Densities o densidades atómicas*" para los materiales del combustible, los "*bucklings críticos*" y las energías de fisión, para cada quemado.

- Se generan las entradas WIMS para cada caso con los datos ingresados por el usuario, y con los extraídos del caso nominal, en el paso anterior (ver Sección 3.5.1.1).

- Se corren sucesivamente todos los casos particulares hasta la convergencia del k_{ef} a la unidad en cada paso de quemado.

- De todos los archivos de salida correspondientes se extraen los siguientes datos:

- Coeficientes de difusión, para calcular las secciones eficaces de transporte ($1/3D$).
- Secciones eficaces de absorción.
- Secciones eficaces de remoción.
- Secciones eficaces de fisión y los productos de las mismas por los correspondientes

valores de v.

– Se calculan las derivadas y el resto de los datos según las ecuaciones (1) a (14).

• Se escriben todas las secciones eficaces de valores centrales de tabla, las contribuciones de lodo y Xe, las secciones eficaces microscópicas efectivas del Xe, y las derivadas de las secciones eficaces macroscópicas en el archivo *DerSecEfec.txt* en el orden que se detalla en la Tabla 10.

<p>Quemado</p> $\Sigma_{T1}, \Sigma_{T2}, \Sigma_{11}, \Sigma_{12}, \Sigma_{21}$ $\Sigma_{22}, v\Sigma_{F1}, v\Sigma_{F2}, E_F \Sigma_{F1}, E_F \Sigma_{F2}$ $Sl_1, Sl_2, SXe_1, SXe_2, \sigma_1, \sigma_2$ $\partial\Sigma_{T1}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{T2}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{11}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{12}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{21}/\partial[Xe]$ $\partial\Sigma_{22}/\partial[Xe], \partial v\Sigma_{F1}/\partial[Xe], \partial v\Sigma_{F2}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{F1}/\partial[Xe], \partial\Sigma_{F2}/\partial[Xe]$ $\partial\Sigma_{T1}/\partial Tc, \partial\Sigma_{T2}/\partial Tc, \partial\Sigma_{11}/\partial Tc, \partial\Sigma_{12}/\partial Tc, \partial\Sigma_{21}/\partial Tc$ $\partial\Sigma_{22}/\partial Tc, \partial v\Sigma_{F1}/\partial Tc, \partial v\Sigma_{F2}/\partial Tc, \partial\Sigma_{F1}/\partial Tc, \partial\Sigma_{F2}/\partial Tc$ $\partial\Sigma_{T1}/\partial Tr, \partial\Sigma_{T2}/\partial Tr, \partial\Sigma_{11}/\partial Tr, \partial\Sigma_{12}/\partial Tr, \partial\Sigma_{21}/\partial Tr$ $\partial\Sigma_{22}/\partial Tr, \partial v\Sigma_{F1}/\partial Tr, \partial v\Sigma_{F2}/\partial Tr, \partial\Sigma_{F1}/\partial Tr, \partial\Sigma_{F2}/\partial Tr$ $\partial\Sigma_{T1}/\partial pr, \partial\Sigma_{T2}/\partial pr, \partial\Sigma_{11}/\partial pr, \partial\Sigma_{12}/\partial pr, \partial\Sigma_{21}/\partial pr$ $\partial\Sigma_{22}/\partial pr, \partial v\Sigma_{F1}/\partial pr, \partial v\Sigma_{F2}/\partial pr, \partial\Sigma_{F1}/\partial pr, \partial\Sigma_{F2}/\partial pr$

Tabla 10. Secciones eficaces y derivadas en el archivo *DerSecEfec.txt*.

El archivo *DerSecEfec.txt* tendrá una serie de bloques semejantes al mostrado en la Tabla 10, con tantos bloques como valores de quemado se soliciten (ver Sección 3.5.1.2). Si el programa se interrumpe antes de la obtención del archivo, hay que reiniciar su ejecución por completo. *DerSecEfec.txt*,

3.6.2. Método de la Tabla de Múltiples Parámetros de Entrada

• Se ingresan los datos:

- Elección del método a utilizar; en este caso derivadas parciales (ver Fig. 1).
- Ingreso del directorio de trabajo (ver Fig. 3).
- Ingreso de la entrada nominal con su correspondiente extensión ("wii") (ver Fig. 3).
- Ingreso de la ubicación de la biblioteca (wlup-69.bib) de datos nucleares.
- Ingreso del nombre y su extensión del ejecutable de WIMS (ver Fig. 3).
- Ingreso de la ubicación del ejecutable de WIMS (ver Fig. 3).
- Ingreso de la cantidad de parámetros a utilizar (incluyendo el quemado) (ver Fig. 3).
- Ingreso de valores para la tarjeta *POWER* ("rq", "indb₁", "indb₂", "rmaxdt", "paso de quemado", "Buckling radial", "Buckling axial") (ver Fig. 4)
- Carga archivo de entrada para WIMS (caso nominal).

– Ingreso de parámetros a través del archivo *TMPE.txt* (quemados, concentraciones de Xe, temperaturas del combustible, densidades del refrigerante, temperaturas del refrigerante, temperaturas del moderador, concentraciones de B).

• Se corre el caso nominal:

– Convergencia de k_{ef} a la unidad para cada paso de quemado (10 pcm de tolerancia en reactividad).

– De la salida de WIMS para el caso nominal se extraen como datos los “*Number Densities o densidades atómicas*” para los materiales del combustible, los “*bucklings críticos*” y las energías de fisión, para cada quemado.

• Se generan las entradas WIMS para cada caso particular con los datos ingresados por el usuario, y con los extraídos del caso nominal en el paso anterior.

• Se corren sucesivamente todos los casos particulares hasta la convergencia del k_{ef} a la unidad en cada paso de quemado.

• De todos los archivos de salida correspondientes se extraen los siguientes datos:

– Coeficientes de difusión, para calcular las secciones eficaces de transporte ($1/3D$).

– Secciones eficaces de absorción.

– Secciones eficaces de remoción.

– Secciones eficaces de fisión y los productos de las mismas por los correspondientes

valores de ν .

• Se escriben todas las secciones eficaces de cada caso en el archivo *XSMultientrada.txt* en el siguiente orden: Σ_{T1} , Σ_{T2} , Σ_{a1} , Σ_{12} , Σ_{21} , Σ_{a2} , $(\nu\Sigma f)_1$, $(\nu\Sigma f)_2$, Σ_{f1} , Σ_{f2} (ver Tabla 9 de la Sección 3.5.2.2).

Si el programa se interrumpe antes de obtener el archivo *XSMultientrada.txt* hay que reiniciar el procedimiento desde el principio.

CAPÍTULO 4

4. Resultados

4.1. Introducción

En el presente capítulo se exponen comparaciones entre cálculos de secciones eficaces y derivadas correspondientes a tablas muy reducidas en tamaño, obtenidas por un lado por medio del programa objeto de este trabajo, y por otro lado manualmente, es decir, confeccionando las entradas de WIMS de casos particulares elegidos especialmente dentro de las tablas, y luego de la evolución completa del quemado del caso nominal, iterando manualmente varias veces hasta lograr la convergencia del k_{ef} en cada caso, y obteniendo finalmente las secciones eficaces y sus derivadas, y el resto de datos requeridos, aplicando las ecuaciones (1) a (14). La celda utilizada corresponde a un reactor de tipo Atucha, lo cual implica en términos generales, un reactor que utiliza agua pesada como refrigerante y moderador, combustible de uranio natural, elementos combustibles de geometría esencialmente cilíndrica con representación en simetría uno. Los datos obtenidos para las comparaciones se adjuntan en soporte digital.

4.2. Casos propuestos para la verificación

Siguiendo los pasos detallados en el Capítulo 3, se arman los archivos *Derivada.txt* y *TMPE.txt* con los datos para las respectivas verificaciones con ambos métodos. El contenido de ambos archivos se muestra en las Tablas 11 y 12. Las dos tablas correspondientes, la de derivadas y la TMPE, se confeccionan ejecutando el programa aquí desarrollado, tomando como entrada estos dos archivos. Téngase en cuenta que al solicitar el método de TMPE, como se explicó en la Sección 3.4.2, no debe incluirse la línea de quemados en el archivo *Derivada.txt*.

Se tienen como resultados los correspondientes archivos *DerSecEfec.txt* y *XSMultientrada.txt*.

```
xe
vctc 637.0 136.52
vctr 295.8 14.22 6
vcdr 801.9 5 6
vctm 175 15 10 11
vcdm 996.2 5 10 11
cb 0.5E-4 0.5E-4 6 10 11
```

Tabla 11. Archivo *Derivada.txt* utilizado como entrada para generación de secciones eficaces y derivadas con el programa aquí desarrollado.

```

concentracion 4135 1 2 3 4
temperatura 1 2 3 4
densidad 6
temperatura 6
temperatura 10 11 correlacion
concentracion 1011 6 10 11
26 0 50 100 150 200 400 450 600 800 900 1100 1400 1700 1800 2000 2500 3000 3500 4000 4500 5000 5500 6000 6500 6850 7000
2 7.5e+013 1.8e+14
1 500
2 700 850
2 240 325
1 190
1 978.4
4 1.0E-7 1.0E-5 1.0E-4 1.0E-3

```

Tabla 12. Archivo *TMPE.txt* utilizado como entrada para generación de secciones eficaces con el programa aquí desarrollado.

A continuación se efectúan los mismos cálculos, pero manualmente. A partir del caso nominal con los quemados incluidos, y ya convergidos los *bucklings* por el programa con una tolerancia de 10 pcm, se forma la entrada WIMS de cada caso particular y se ejecutan uno por uno haciendo iteraciones, manualmente, tantas veces como sea necesario para obtener convergencia con el mismo error en reactividad (10 pcm). Cada caso particular hace referencia al conjunto de secciones eficaces asociadas a algunos "nodos" seleccionados de la tabla de derivadas y a algunos "nodos" de la TMPE, representando estos "nodos" las combinaciones de parámetros de la Tabla 12, y las combinaciones de valores centrales y desplazamientos de la Tabla 11. En el caso de las derivadas se eligen para comparar los resultados correspondientes a los valores de quemado 3500 y 6850 MWd/TonU, más los valores centrales y desplazamientos que se muestran en la Tabla 11; para el caso de la TMPE se utilizan los siguientes valores:

- Quemados: 450, 2500, 6500 MWd/TonU.
- Concentración de Xe: $1.8E^{14}$ átomos/cm³.
- Temperatura del combustible: 500 °C.
- Temperatura del refrigerante: 240 °C.
- Densidad del refrigerante: 700 kg/m³.
- Temperatura del moderador: 190 °C.
- Densidad del moderador: 978.40 kg/m³.
- Concentración de B: E^{-5} , E^{-4} (g/g) %.

Los cálculos manuales implican la creación de los archivos de WIMS, uno por uno y sin recurrir a la herramienta desarrollada en este trabajo, de todos los casos particulares con los valores seleccionados para la comparación en cada método, a partir de los datos para la tabla de derivadas y para la TMPE (Tablas 11 y 12). Implican además la búsqueda de la convergencia de cada nuevo caso, para luego extraer la información necesaria, esto es, las secciones eficaces usadas directamente en la TMPE, y usadas para el cálculo de las derivadas parciales, rendimientos efectivos y secciones eficaces microscópicas (ecuaciones (1) a (14)) en el caso del método de las derivadas.

Una vez conseguidos todos los resultados manualmente, se comparan con los obtenidos mediante el uso del programa, contenidos en los archivos *DerSecEfec.txt* y *XSMultientrada.txt*. Todas las secciones eficaces y sus derivadas de interés son recolectadas para su posterior tratamiento en planilla de cálculo en Microsoft Excel.

Estas comparaciones se realizan a fin de tener una certeza respecto a las diferencias en el cálculo entre ambos modos (manual y mediante el uso del programa), y para verificar si el programa realiza toda la operatoria correctamente, o si existe algún error en los procedimientos. Los resultados de estas comparaciones pueden observarse en las Tablas 13 y 14, que corresponden respectivamente a los métodos de las derivadas y de la TMPE. Para el caso de la TMPE, todos los nodos seleccionados poseen algunos parámetros que se repiten y otros que no. A los efectos de distinguir fácilmente los distintos casos a continuación se detallan aquellos valores que no se repiten en los nodos, rotulándolos como casos a), b), c), d), e) y f); luego se da una lista con los valores que poseen en común esos mismos nodos.

Casos generados cuyos parámetros no se repiten en los diferentes casos:

Caso a)

- Quemado: 450 MWd/TonU; concentración de B: 10^{-5} (g/g) %.

Caso b)

- Quemado: 450 MWd/TonU; concentración de B: 10^{-4} (g/g) %.

Caso c)

- Quemado: 2500 MWd/TonU; concentración de B: 10^{-5} (g/g) %.

Caso d)

- Quemado: 2500 [MWd/TonU; concentración de B: 10^{-4} (g/g) %.

Caso e)

- Quemado: 6500 [MWd/TonU; concentración de B: 10^{-5} (g/g) %.

Caso f)

- Quemado: 6500 MWd/TonU; concentración de B: 10^{-4} (g/g) %.

Listado de valores que se repiten en todos los nodos seleccionados para la comparación programa-manual en TMPE:

- Concentración de Xe: $1.8E^{14}$ átomos/cm³.
- Temperatura del combustible: 500 °C.
- Temperatura del refrigerante: 240 °C.
- Densidad del refrigerante: 700 kg/m³.
- Temperatura del moderador: 190 °C.
- Densidad del moderador: 978.40 kg/m³.

La comparación entre resultados se realizó mediante una estimación de error según la siguiente ecuación:

$$Error(\%) = 100 * \left| \frac{X_M - X_P}{X_P} \right| \quad (20)$$

donde X representa cualquiera de los valores a comparar, rendimiento efectivo, secciones eficaces microscópicas y macroscópicas, y derivadas, la M significa cálculo manual, y la P significa cálculo mediante el programa desarrollado.

A partir de estas comparaciones se observa que los errores son despreciables, no superando el 7% en ninguno de los casos. Este valor máximo de 7% se da singularmente

en un único caso (Tabla 13, derivada con respecto a la temperatura del refrigerante, para el quemado de 6850 MWd/TonU) Hay que considerar además que en este caso, al tratarse de una derivada (cociente de diferencias), su valor es mucho más sensible que en el caso de las secciones eficaces, a variaciones despreciables entre los cálculos de secciones eficaces manual y por programa, no siendo esa sensibilidad originada por falencias del programa en sí. Se verificó en este caso que las diferencias, no en las derivadas, sino en el cálculo de las secciones eficaces, se deben al redondeo que efectúa el programa al tomar los valores numéricos de los archivos de texto que manipula. Posteriormente a esta comparación, se corrigió el programa para que tome los valores tal como se encuentran en los archivos de texto, y se evite de este modo errores espurios en las derivadas.

Quemado 3500										
	Σ_{T1}	Σ_{T1}	Σ_{a1}	Σ_{12}	Σ_{21}	Σ_{a2}	$(v\Sigma F)_1$	$(v\Sigma F)_2$	Σf_1	Σf_2
Valores centrales	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001
	SI1	SI2	SXe1	SXe2	s1	s2				
Rendimientos	0.001	0.001	0.001	0.001	0.000	0.000				
	$\partial\Sigma_{T1}/\partial z$	$\partial\Sigma_{T2}/\partial z$	$\partial\Sigma_{11}/\partial z$	$\partial\Sigma_{12}/\partial z$	$\partial\Sigma_{21}/\partial z$	$\partial\Sigma_{22}/\partial z$	$\partial v\Sigma F_1/\partial z$	$\partial v\Sigma F_2/\partial z$	$\partial\Sigma F_1/\partial z$	$\partial\Sigma F_2/\partial z$
Derivada Xe	0.448	0.089	0.034	0.005	0.084	0.002	0.008	0.003	0.065	0.014
Derivada TC	0.129	0.074	0.003	0.010	0.037	0.016	0.028	0.001	0.009	0.094
Derivada TR	1.078	0.361	0.108	1.025	0.012	0.002	0.069	0.036	2.759	0.009
Derivada DR	0.013	0.016	0.020	0.010	0.078	0.022	0.000	0.013	2.386	0.041
Derivada TM	1.173	0.000	0.535	0.001	0.001	0.011	0.163	0.004	0.851	0.554
Derivada DM	0.000	0.000	0.000	0.000	0.003	0.000	0.000	0.001	0.006	0.007
Derivada B	0.334	1.447	0.080	0.006	0.068	0.003	0.075	0.053	0.106	0.259
Quemado 6850										
	Σ_{T1}	Σ_{T1}	Σ_{a1}	Σ_{12}	Σ_{21}	Σ_{a2}	$(v\Sigma F)_1$	$(v\Sigma F)_2$	Σf_1	Σf_2
Valores centrales	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.002
	SI1	SI2	SXe1	SXe2	s1	s2				
	0.001	0.001	0.001	0.001	0.000	0.001				
	$\partial\Sigma_{T1}/\partial z$	$\partial\Sigma_{T2}/\partial z$	$\partial\Sigma_{11}/\partial z$	$\partial\Sigma_{12}/\partial z$	$\partial\Sigma_{21}/\partial z$	$\partial\Sigma_{22}/\partial z$	$\partial v\Sigma F_1/\partial z$	$\partial v\Sigma F_2/\partial z$	$\partial\Sigma F_1/\partial z$	$\partial\Sigma F_2/\partial z$
Derivada Xe	0.010	0.013	0.004	0.003	0.000	0.002	0.005	0.002	0.014	0.020
Derivada TC	2.601	0.193	0.003	0.014	0.002	0.011	0.017	0.026	0.022	1.091
Derivada TR	7.241	0.052	1.338	0.708	0.000	0.004	0.235	0.103	1.905	0.939
Derivada DR	0.013	0.016	0.009	0.016	0.035	0.020	0.096	0.026	0.692	0.002
Derivada TM	0.850	0.003	0.302	0.024	0.001	0.072	0.065	0.005	2.831	0.006
Derivada DM	0.000	0.000	0.005	0.000	0.005	0.000	0.000	0.001	0.003	0.005
Derivada B	0.336	0.596	0.004	0.007	0.001	0.001	0.078	0.415	0.006	5.938

Tabla 13. Error porcentual absoluto en la comparación utilizando el método de derivadas.

	Σ_{T1}	Σ_{T2}	Σ_{a1}	Σ_{12}	Σ_{21}	Σ_{a2}	$(v\Sigma f)_1$	$(v\Sigma f)_2$	Σf_1	Σf_2
Caso a	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.013	0.013
Caso b	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.012	0.013
Caso c	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.021	0.021
Caso d	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.090	0.031
Caso e	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.009
Caso f	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.008	0.009

Tabla 14. Error porcentual absoluto de comparación utilizando el método TMPE.

CONCLUSIONES

Según las comparaciones realizadas en el Capítulo 4, se deduce que el programa calcula confiablemente las secciones eficaces y demás datos requeridos para la confección de tablas de derivadas y TMPE requeridas en PUMA, de acuerdo con los objetivos planteados al comienzo de este trabajo.

En el presente trabajo y por razones de tiempo, el programa debió restringirse al caso de reactores tipo Atucha. Se considera, sin embargo, que se deja armada una línea de programación que puede ser ampliada paulatinamente, adecuándose a casos cada vez más generales, no quedando confinado su uso a un tipo particular de reactores.

REFERENCIAS

- [1]: PUMA Código de reactor de diferencias finitas.
- [2]: PUMA versión 4. "Manual del Código PUMA Versión 4", C. Grant, CNEA.C.RCN.MUS.059.
- [3]: PUMA versión 5.00. "Manual del Código PUMA Versión 5.00", C. Grant. CNEA MA-06REC-276.
- [4]: "WIMS-D5. A neutronics code for standard lattice physics analysis", distribuido por NEA data bank, NEA 1507/03, Noviembre de 1998.
- [5]: "Implementación de un modelo de ATUCHA II con dependencia espacial de Xenón para PUMA 4", C. Grant, C. Fait, C. Barberis, A. Yunes, CNEA ITA-06REC-276.
- [6]: "Desarrollo de un modelo de ATUCHA II con dependencia espacial de Xenón y reacoplamiento termohidráulico para PUMA 4", C. Grant, C. Fait, C. Barberis, A. Yunes, CNEA ITA-06REC-281.
- [7]: "Implementación en el Código de Reactor PUMA del Cálculo de las Secciones Eficaces por Interpolación a partir de una Tabla de Múltiples Parámetros de Entrada" C. Grant, A. Tarazaga, A. Yunes, L. Romero, CNEA ITA-06REC-211.