

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1985

02.85.04

CNEA-NT 18/85

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

NUEVA VERSION DEL PROGRAMA DOT 3.5:
DESARROLLO Y PUESTA EN OPERACION

M.M. SBAFFONI y M.J. ABBATE

Buenos Aires

1985

DOT 3.5 CAB - A NEW VERSION OF THE DOT 3.5 CODE

Development and implementation

M.M. Scaffoni y M.J. Abbate

Abstract

The use of code DOT 3.5 in calculations that involve neutron thermalization processes in systems with a strong upscattering effect, has shown several problems, i.e. arise of negative fluxes, instability of the solutions, and random convergence/1/.

Because of these undesirable results, a new version of the code was developed, which maintain the possibilities of the former one and adds, as option, the utilization of a new upscattering acceleration method, called "differential method" or "group by group".

It is more adequate for this kind of cases and solves, with the addition of a few other minor modifications, the above mentioned problems.

Since this new version includes the original one, the modifications described in this report, in particular those of input and output features, are an addendum to the corresponding user's manual.

DOT 3.5 CAB

NUEVA VERSION DEL PROGRAMA DOT 3.5:
Desarrollo y Puesta en operación

M.M. Sbaffoni y M.J. Abbate

La utilización del programa DOT 3.5 en cálculos que involucran la termalización de neutrones en sistemas con fuerte efecto de "upscattering", presentó diversos problemas, como por ejemplo aparición de flujos negativos, inestabilidad de las soluciones y convergencias al azar. /1/

Ante ello se encaró el desarrollo de una nueva versión de dicho código, que mantiene las posibilidades de la anterior y agrega, como opción, la utilización de un nuevo método de aceleración por "upscattering" denominado "método diferencial" o "grupo a grupo".

Este resulta más apto para este tipo de casos y soluciona, junto a algunas modificaciones menores del programa, los problemas antes mencionados.

Como esta nueva versión incluye a la anterior (CCC276) las modificaciones que aquí se detallan, especialmente en lo referido a "input" y "output" constituyen un addendum al correspondiente manual. /2/

Nuevo método de aceleración por "upscattering"

La principal novedad de la versión DOT 3.5 CAB es la inclusión del método diferencial de aceleración por upscattering, que calcula factores de corrección por grupo, o sea dependientes de la energía. /3/

Este método evita correcciones innecesarias en grupos ya convergidos y ha demostrado proporcionar soluciones estables en problemas con fuerte efecto de "upscattering."

Las modificaciones efectuadas al programa original para su inclusión fueron:

- a) SUBROUTINA INP Inclusión de los vectores necesarios para el dimensionamiento variable de los nuevos parámetros, y dos sentencias COMMON ad hoc.
- b) SUBROUTINA CLUGE Nueva dimensión del vector 63* (ahora contiene 22 elementos en lugar de 18), para incluir los nuevos parámetros de input y agregado de los mismos como argumentos de la subrutina.
- c) SUBROUTINA DOT Inclusión de los citados COMMON y agregado de los nuevos argumentos en los llamados a la subrutinas OUTER y CNNP.
- d) SUBROUTINA LOCO Agregado de COMMON y modificación de argumentos en el llamado a CLUGE. Definición de valores por defecto para los nuevos parámetros de input.
- e) SUBROUTINA CNNP Agregado de COMMON y nuevos argumentos, dimensionamiento de nuevos vectores, llamado a la nueva subrutina de cálculo de factores de corrección por grupo (MOMAX) y corrección de los flujos con estos nuevos factores.
- f) SUBROUTINA OUTER Agregado de argumentos, inclusión de COMMON y dimensionamiento de vectores, y cálculo de la fuente de "inscattering", necesaria para el cálculo de los nuevos factores FG de corrección por grupo.
- g) SUBROUTINA MOMAX Se agregó esta subrutina que calcula los factores FG de corrección por grupo.

Para más detalles acerca de las modificaciones puede solicitarse a los autores los listados actualizados de las subrutinas modificadas.

Modificaciones al INPUT

De la inclusión de este nuevo método se deriva sólo una modificación al INPUT standard, que es agregar en el vector 63*, a continuación de SPE, los siguientes datos (reales)

UPDIF (0.0/1.0 = INTEGRAL/DIFFERENTIAL)

- en el primer caso usará el "scaling" original del programa (a menos de una corrección que se explicará más adelante); no tendrán significado en ese caso los 3 siguientes datos.
- Si UPDIF es 1.0 usará corrección diferencial por "upscattering".

UPEPS (CONVERGENCE CRITERION) (Valor por defecto 10^{-6} EPS) Precisión para la convergencia en el cálculo de los factores de escala del método diferencial, que se obtienen iterativamente.

UPITMA (MAXIMUM ITERATIONS) (Valor de defecto 100). Número máximo de iteraciones en el cálculo de los factores de escala.

UPOMEG (OVERRELAXATION FACTOR): (Valor por defecto 1.4). Utilizado para acelerar la convergencia de los factores de escala empleando el método de sobrerelajación.

El vector 63* tiene entonces ahora 22 entradas, en el orden que aquí se indica:

63* ARRAY 22 ENTRIES

S01 = -----SOURCE NORMALIZATION FACTOR

EPS = -----GENERAL CONVERGENCE CRITERION (INTEGRAL INNER
ITERATION, LAMBDA AND FISSION DENSITY)

G06 = -----POINTWISE FLUX ERROR CRITERION (INTEGRAL
ITERATION TEST USED IF G06=0.0)

G05 = -----MAXIMUM CPU TIME FOR THIS PROBLEM

S03 = -----PARAMETRIC EIGENVALUE FOR SEARCH (K or ALPHA)

EV = -----FIRST EIGENVALUE GUESS
EVM = -----EIGENVALUE INCREMENT TO BE ADDED TO EV
LAL = -----LINEAR EXTRAPOLATION USED WHEN CONVERGED
CLOSER THAN LAL
EPSA = -----CONVERGENCE CRITERION FOR CHANGING EV IN
SEARCH
LAH = -----UPPER LIMIT ON ABS (LAMBDA-1.0) IN LINEAR
SEARCH, R.V. = 0.05

POD = -----PARAMETER OSCILLATION DAMPER, R.V. = 0.75
SH = -----HEIGHT OF POINT SOURCE
HSA = -----COSINE OF ANGLE WITH Z AXIS INTO WHICH SOURCE
IS EMITTED
SF = -----SOURCE MAGNITUDE
ZEXC = -----EXCLUDED RADIUS

ORF = -----SPARE
SFE = -----SPARE
SPE = -----SPACE-POINT RESCALING CONVERGENCE CRITERION
(0 DEFAULT = 1.E-4)

DIFFERENTIAL UPSCATTERING SCALING PARAMETERS

UPDIF = -----0.0/1.0 = INTEGRAL/DIFFERENTIAL
UPEPS = -----CONVERGENCE CRITERION (DEFAULT 10*EPS)
UPITMA = -----MAXIMUM ITERATIONS (DEFAULT 100)
UPOMEG = -----OVERRELAXATION FACTOR (DEFAULT 1.4)

Otras modificaciones

Además de los cambios ya indicados se realizaron a la versión original del DOT 3.5 (CCC-276) una serie de modificaciones menores, surgidas de su puesta en operación y uso.

a) Seguimiento del cálculo

En el caso de cálculo de sistemas con gran efecto de "upscattering", dada la gran cantidad de iteraciones exteriores involucradas, resulta muy importante poder tener, en forma interactiva, acceso a parámetros que den información sobre la evolución del cálculo que se está realizando.

Para ello se definió un nuevo archivo de datos de salida que es asignado a una terminal (CONSOLE FILE), al que se envían algunos datos claves para el seguimiento, que pueden ser observados mientras se realiza el cálculo, o a posteriori. Ellos son:

a.1) Monitor de iteraciones interiores en la primera y última iteración interior de cada grupo (subrutina INNER)

a.2) Monitor de iteraciones exteriores
(Subrutina S8830)

a.3) Información sobre la convergencia En este programa la convergencia integral se verifica comparando con la precisión (EPS), el valor de

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

donde $UP2 = \sum_g \epsilon_g^{up} N2g$

y $UP1 = \sum_g \epsilon_g^{up} P2g$

N2g: flujo de la presente iteración

P2g: flujo de la anterior

Se definió entonces el parámetro

$$UP2UP1 = 1.0 - \left| \frac{UP2}{UP1} \right|$$

que permite observar la forma de aproximación a la convergencia y que se envía al CONSOLE FILE en cada iteración exterior (subrutina CNNP).

Se definió este nuevo valor ya que los que proporciona la versión original del programa (máximo error de flujo en las iteraciones interiores y balance) no permiten ver con suficiente detalle la evolución del cálculo.

b) Información sobre los métodos de aceleración aplicados

b.1) Aceleración de fuente

Ante fuertes oscilaciones del flujo el factor de corrección o de escala E01 puede resultar negativo, por lo que su valor se encuentra acotado entre 1.0 y 10.0. No se creyó necesario extraer información sobre esto.

b.2) Aceleración por selfscattering

El factor de escala aquí aplicado (V07) se envía al CONSOLE FILE cuando resulte negativo o implique correcciones al flujo mayores del 25% (subrutina INNER).

b.3) "Upscattering scaling"

El factor de escala por corrección de "upscattering" también puede resultar menor que cero, con lo que al corregir se generarán flujos negativos que carecen de significado. Ello fue lo ocurrido en los casos citados previamente.

Ante esto se incluyó para esta corrección un test que elimina la aceleración en esa iteración si el factor de corrección es menor que cero.

IF (TEMP.LE.0.0) TEMP = 1.0

Además, se observó que en el caso de aplicarse esta corrección integral (según CCC-276) el cálculo del "upscattering scaling factor" se realizaba con los flujos de la iteración anterior no corregidos, mientras que para calcular los flujos de la presente iteración se los utilizaba corregidos con

los factores de escala; esto generaba nuevos factores de corrección que resultaban exagerados y que desestabilizaban los flujos, por lo que se cambió la definición del factor integral de corrección para hacerla compatible con el cálculo.

Ahora:

$$\text{TEMP} = \frac{\text{EO(IGP)} + \text{El(IGP)}}{\text{EO(IGP)} + \text{El(IGP)} - \text{UP2} + \text{UP1} * \text{TEMPC}}$$

siendo TEMPC el factor de escala de la iteración anterior.

Estas correcciones fueron incluidas en la subrutina CNNP

c) Puesta en operación

La puesta en operación del programa en un equipo IBM/370 modelo 165 con compilador FORTRAN G implicó también otras modificaciones de menor importancia (especialmente en la definición de los DATA) que no se considera necesario explicitar ya que no restringen ni cambian el uso de la versión original.

La presente versión puede identificarse a través del encabezamiento que imprime la subrutina MESSAGE. El encabezamiento actual es:

*****DOT 3.5(ORNL 12/18/75)*****

**** CAB VERSION AUGUST 1984 ****

ORIGINAL VERSION CCC-276, MODIFIED AT CENTRO ATOMICO BARILOCHE BY M.M. SBAFFONI AND M.J. ABBATE

Notas sobre la ejecución del programa

Si bien se sugería el uso del compilador FORTRAN H por su mayor velocidad, finalmente se optó por el compilador G, ya que el programa original compilado en "H" indicaba una gran cantidad de errores e incompatibilidades, lo que implicaba realizar modificaciones a la versión original que en principio no se consideraban deseables (cantidad de argumentos de las subrutinas, ubicación de los COMMON, definición de los DATA y EQUIVALENCE, etc.)

Tampoco fue posible utilizar en este sistema operativo (VM/CMS) la combinación de subrutinas en ASSEMBLER y subrutinas en FORTRAN recomendada en el manual de la versión original, por lo que finalmente se optó por utilizar todas las subrutinas en FORTRAN-IV, y compilador G, que era la combinación que requería menos cambios iniciales para su puesta en operación.

Esta configuración fue finalmente probada con éxito ejecutando los 6 problemas ejemplo provistos por la NEA-Computer Program Library junto con el programa.

La versión final DOT 3.5 CAB está dividida en 14 fases según el esquema que se muestra en la figura 1.

La ejecución del programa es comandada por un módulo denominado ARRANQUE EXEC que:

- dispone la ejecución.
- genera el archivo con la información que es enviada a la terminal y que permite observar el desarrollo de la ejecución desde la terminal en forma interactiva o a posteriori (CONSOLE FILE).
- advierte al operador la finalización de la ejecución.
- desconecta la máquina virtual.

Sus instrucciones son:

```
CP SET RUN ON
CP PURGE RDR
CP SP CONSOLE STOP
CP SP CONSOLE CLOSE
CP PURGE RDR
CP SP CONSOLE * START
CP Q TIME
EX DOT35D
CP MSG OP TERMINE
CP Q TIME
CP SP CONSOLE STOP
CP SP CONSOLE CLOSE
READ CONSOLE FILE D
CP DISC
```

Por su parte el módulo de ejecución, DOT35D EXEC, es:

```
FI FT01F001 DUMMY
FI FT15F001 TERM
FI FT02F001 DISK DOT FILE2 D
FI FT03F001 DISK DOT FILE3 D
FI FT04F001 DISK DOT FILE4 D
FI FT10F001 DISK DOT FILE5 D
FI FT21F001 DISK DOT FILE6 D
FI FT11F001 DISK DOT FILE7 D
FI FT12F001 DISK DOT FILE8 D
FI FT13F001 DISK "NNN" FILE9 D
FI FT20F001 DISK DOT FILE10 D
FI FT21F001 DISK DOT FILE11 D
FI FT05F001 DISK "DATOS" "MMM" D
FI FT06F001 DISK "PPP" IMPRE D
LOAD MAIN A B CC DD E F G H II J AA K L
START
```

•

Con respecto a las unidades simbólicas, caben aclarar las siguientes:

15 = TERM para utilizar la terminal en el CONSOLE FILE

05 = "DATOS" "MMMM" es el archivo que contiene los datos del problema en imagen de tarjetas

13 = "NNN" FILE9 contiene los flujos para los casos de "restart"

06 = "PPP" IMPRE es el archivo de salida

El archivo "PPP" IMPRE, output completo del programa, queda grabado en disco, por lo que podrá luego ser analizado antes de imprimirlo total o parcialmente, si fuera necesario.

Al respecto se desarrolló localmente un programa auxiliar (NYR231B) que permite seleccionar del IMPRE sólo ciertos flujos, en los grupos de energía y/o puntos espaciales que interesa analizar. Toma los flujos escalares y angulares del output general del programa, les cambia las unidades y los ordena como espectros en dadas posiciones y ángulos y como distribuciones espaciales en dados grupos de energía, con lo que permite reducir considerablemente la salida impresa.

Agradecimientos

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

Los autores desean agradecer a la NEA Computer Program Library por haber proporcionado el programa DOT 3.5; como así también al Centro de Tecnología y Ciencia de Sistemas de la Universidad de Buenos Aires en cuyo centro de cómputos fue realizado el trabajo de cálculo.

BIBLIOGRAFIA

- 1) M.M. SBAFFONI y M.J. ABBATE: "Métodos de aceleración y modelos en cálculos S_N " CNEA - NT 13/84, Centro Atómico Bariloche, Bariloche (R.N.), (1984)
- 2) W.A. RHOADES: "DOT 3.5, Two dimensional discrete ordinates radiation transport code" CCC-276 RSIC, ORNL, Oak Ridge, Tennessee, (1976).
- 3) M.M. SBAFFONI and M.J. ABBATE: "Group by group upscattering scaling method" (to be published).

Figura 1: DOT3.5 CAB, subdivisión en fases

